

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»  
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова  
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»



**Сборник тезисов докладов**  
**Молодежная Школа**  
**по физике конденсированного состояния**  
**(Школа ФКС-2025)**

24 - 28 марта 2025 года, пгт. Рошино, Ленинградская область

Гатчина, 2025

В данном выпуске представлены тезисы докладов Молодежной Школы по физике конденсированного состояния (Школа ФКС-2025), 24 - 28 марта 2025 года, Гатчина.

Сборник подготовили: Губанова Н.Н., Васильев А.И., Васильева В.Н.

**Организатор:** НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

**Программный комитет:**

Воронин Владимир Владимирович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ) - председатель программного комитета;

Аристов Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ) - сопредседатель программного комитета.

Авдеев Михаил Васильевич, д.ф.-м.н. (ОИЯИ);

Волков Владимир Владимирович, д.х.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - институт кристаллографии и фотоники);

Григорьев Сергей Валентинович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Демишев Сергей Васильевич, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН);

Дмитриенко Владимир Евгеньевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - институт кристаллографии и фотоники);

Зобкало Игорь Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Кравцов Евгений Алексеевич, д. ф.-м. н. (ИФМ УрО РАН);

Кулевой Тимур Вячеславович, д.т.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ККТЭФ)

Курбаков Александр Иванович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Марченков Никита Владимирович, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»);

Мушников Николай Варфоломеевич, д.ф.-м.н., акад. РАН (ИФМ УрО РАН);

Ниязов Рамиль Асхатович, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Рогожкин Сергей Васильевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»);

Савицкая Наталья Евгеньевна, д.ф.-м.н. НИЦ («Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Смирнов Александр Иванович, д.ф.-м.н., член-кор. РАН (ИФП РАН);

Стишов Сергей Михайлович, д.ф.-м.н., акад. РАН (ИОФ РАН);

Чубова Надежда Михайловна, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»).

**Организационный комитет:**

Васильева Виктория Николаевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), председатель оргкомитета;

Васильев Андрей Иванович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Губанова Надежда Николаевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Дьячков Максим Вадимович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Куга Наталья Алексеевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), финансовые вопросы;

Матвеев Василий Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Никитина Наталия Владимировна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), визовая поддержка;

Пшеничный Кирилл Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), информационное обеспечение;

Сазонова Яна Дмитриевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Галактионова Татьяна Викторовна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), экономические вопросы.

***Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.***

© НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2025

## Установки малоуглового рассеяния нейтронов на реакторе ПИК

Л.А. Азарова<sup>1,2</sup>, Д.О. Сканченко<sup>1,2</sup>, К.Ю. Терентьев<sup>1</sup>, Е.В. Алтынбаев<sup>1,2</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 53.084, 681.2, 001.891.573, 086.48

Развитие методов нейтронного рассеяния играет ключевую роль в исследовании структурных и динамических свойств материалов на нано- и микрометровом масштабах. В рамках создания приборной базы реакторного комплекса ПИК (Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ) разработаны три установки для изучения крупномасштабных неоднородностей в различных материалах: малоугловые нейтронные установки «TENZOR» и «Мембрана-2», а также установка спин-эхо малоуглового рассеяния «SESANS». Все три установки являются комплементарными друг другу и в комплексе позволяют получить детальную информацию о структуре, динамике и свойствах материалов, что делает их ценными инструментами в различных областях науки и техники [1]. Классическое МУРН («TENZOR», «Мембрана-2») предоставляет информацию о форме, размерах и взаимодействиях нанообъектов (1–100 нм), тогда как SESANS расширяет диапазон до микрометровых масштабов, выявляя глобальную организацию систем (например, доменные структуры или сетчатые образования).

Установка «TENZOR» представляет собой высокопоточный монохроматический инструмент с опцией поляризации нейтронов. Использование поляризованных нейтронов позволяет изучать магнитные структуры и взаимодействия в материалах с высоким пространственным разрешением в диапазоне 1-100 нм, что критически важно для исследований в области сложных спиновых систем, сверхпроводимости и гибридных нанокomпозитов. Установка «Мембрана-2» сочетает монохроматический режим работы с перспективной времяпролетной методикой, которая будет реализована на следующем этапе модернизации. В текущей конфигурации инструмент позволяет проводить исследования в области биологии (например, изучение мембранных белков и липидных бислоев), физике полимеров и материаловедении, фокусируясь на статических свойствах образцов. После внедрения времяпролетного режима установка станет ключевой для анализа кинетических процессов *in situ*, включая фазовые переходы и динамику релаксации в мягких материалах. Установка «SESANS» (спин-эхо малоугловое рассеяние) обеспечивает уникальную возможность изучения крупномасштабных неоднородностей (0.1–40 мкм), недоступных для классического МУРН. Метод основан на корреляции спинов нейтронов, что позволяет регистрировать экстремально малые углы рассеяния без физической коллимации пучка. Это делает SESANS незаменимым для анализа фрактальных систем, биологических структур (например, упаковки хроматина в клеточных ядрах [2]), фотонных кристаллов и коллоидных растворов, где ключевыми параметрами являются дальний порядок и пространственная корреляция объектов.

В докладе представлены технические параметры установок, примеры их применения в междисциплинарных исследованиях, а также потенциал комбинации методов. Инструментарий РК ПИК открывает новые возможности для решения задач в нанотехнологиях, биомедицине и разработке функциональных материалов, обеспечивая полный цикл анализа — от атомно-молекулярного уровня до мезоскопических систем.

1. Schmatz W. et al. Neutron small-angle scattering: experimental techniques and applications //Journal of Applied Crystallography.1974. V. 7. No. 2. P. 96-116.

2. Iashina E. G. et al. Small-angle neutron scattering (SANS) and spin-echo SANS measurements reveal the logarithmic fractal structure of the large-scale chromatin organization in HeLa nuclei //Journal of applied crystallography. 2019. V. 52. No. 4. P. 844-853.

**Исследование Н-Т фазовых диаграмм соединений магнитной структуры соединений  $Mn_{0.98}Rh_{0.02}Si$  и  $Mn_{0.975}Rh_{0.025}Si$  методом малоуглового рассеяния нейтронов**  
***И.В. Алферьев<sup>1,2</sup>, Е.В. Алтынбаев<sup>1,2</sup>, Д. О. Сканченко<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.955

В последнее время исследования стабильности геликоидальной магнитной структуры в квазибинарных соединениях, имеющих структуру типа В20, являются актуальными для возможного применения исследуемых материалов в области спинтроники и магноники.

Синтезирование поликристаллических образцов твердых растворов замещения  $Mn_{1-x}Rh_xSi$  с концентрацией Родия  $x=0.02$  и  $x=0.025$ , при высоких давлениях и температурах, в камере типа «тороид», осуществлялось в ИФВД РАН. Кристаллическая структура полученных образцов – кубическая В20 (пространственная группа Р213) без центра инверсии, как и у материнского  $MnSi$ . В таких структурах реализуется взаимодействие Дзялошинского-Мории (ДМ), которое приводит к образованию монокиральной геликоидальной магнитной структуры при температурах  $T < T_c$  [1, 2]. Таким монокиральным соединениям свойственно образование необычного упорядочения - А-фазы (топологически стабильной спин-вихревой структуры с волновым вектором  $k \perp H$ ) вблизи  $T_c$ . Исследования магнитных свойств данных образцов проходили, с помощью проведения эксперимента МУРН.

Эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов проводились, для изучения магнитной структуры образца, в городе Дунгуань, Китай, на установке ВL01. Длина волны направленного пучка нейтронов изменялась от 2 до 15 нм, расстояние от образца до детектора равнялось 6 метров, переданный импульс измерялся в диапазоне от 0.005 до  $0.5 \text{ \AA}^{-1}$ . Измерения проходили при внешнем магнитном поле и температуре. Магнитное поле было направлено перпендикулярно падающему пучку нейтронов и изменялось от 0 до 1Тл с шагом в 0.1 Тл. Температура также изменялась в диапазоне от 5 К до 30 К, с интервалом в 5 К.

По итогу проведенного эксперимента, были получены карты магнитного рассеяния нейтронов на образцах  $Mn_{0.98}Rh_{0.02}Si$  и  $Mn_{0.975}Rh_{0.025}Si$ , при различных температурах и магнитных полях. В том числе, данные результаты были успешно сопоставлены с аналогичными результатами, которые были получены путем проведения эксперимента SQUID [3].

1. Dzyaloshinskii I.E. et al. Theory of helicoidal structures in antiferromagnets // J. Exp. Theor. Phys. 1964. V. 19. No.4. P. 1420-1437.
2. Bak P., Jensen M.H. et al. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in  $MnSi$  and  $FeGe$  // J. Phys. C Solid State Phys. 1980 V. 13. No. 31 P. L881–L885.
3. V. N. Krasnorussky et al. Disorder-induced coexistence of itinerant low-spin and localized high-spin states of Mn in Rh-doped  $MnSi$  Phys. Rev. Mat. 2024. V. 8. №12. P. 124405.

## Двухслойный графен: моделирование структуры в атомноподобном базисе

*Е.В. Аникина<sup>1</sup>, М.В. Каплун<sup>1</sup>, В.П. Бескачко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Южно-Уральский государственный университет, Челябинск

УДК: 004.942-539.2, 538.9

Многослойные структуры с графеном могут представлять интерес для наноэлектроники, т.к. различное расположение графеновых слоев относительно друг друга может влиять на электронную структуру всей системы. Первопринципные расчеты позволяют исследовать свойства подобных структур до проведения натуральных экспериментов, но различные приближения, используемые при моделировании, могут оказать сильное влияние на результат, особенно в случае слабосвязанных систем. Например, атомноподобный базисный набор делает расчеты достаточно быстрыми, но приводит к возникновению ошибки суперпозиции базисного набора, которая вызывает завышенное значение энергии связи и искусственное «сжатие» системы.

В данной работе были исследованы структурные и энергетические свойства двухслойного графена в различных конфигурациях с помощью пакета SIESTA [1], где имплементирован базис атомноподобных орбиталей. Рассматривалась ячейка, содержащая 64 атома углерода (по 32 атома на один слой), с параметром трансляции 9,87 Å. Разбиение обратного пространства на  $19 \times 19 \times 1$   $k$ -точек позволило получить погрешность вычисления энергии связи слоев не более 10 мэВ.

Результаты, полученные в приближении обобщенных градиентов, показали, что без учета поправки к ошибке суперпозиции базисного набора межслоевые расстояния занижаются на 10-12 %, а энергия связи принимает положительное значение. Таким образом, необходимо учитывать эту поправку не только для корректировки энергии связи системы, но и рассматривать её влияние на геометрию структуры, это снизит погрешности вычислений при моделировании с атомноподобным базисом.

*Работа выполнена в рамках грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее».*

1. Soler J.M. et al. The SIESTA method for *ab initio* order- $N$  materials simulation // J. Phys. Condens. Matter. 2002. V. 14. No. 11. P. 2745–2779.

## Оптическое исследование тонкопленочных систем металл/оксид металла

Х.Н. Ахмедова<sup>1,2,3</sup>, С.Г. Джабаров<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку

<sup>2</sup>Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности, Баку

<sup>3</sup>Университет Хазар, Баку

УДК: 538.9

Развитие нанотехнологий оказало значительное влияние на области электроники и спинтроники. Получение функциональных материалов в наномасштабах имеет решающее значение для разработки новых преобразователей. Следовательно, текущие исследования сосредоточены на синтезе известных материалов в наномасштабах из-за уникальных физико-химических свойств, проявляемых наноматериалами [1]. Среди этих наноматериалов особое значение имеют наночастицы алюминия (Al). Было замечено, что атомы на поверхности наночастиц алюминия реагируют с кислородом и водой, образуя оксид алюминия и гидроксид алюминия [2]. В этой работе тонкие слои алюминия были нанесены на стеклянные подложки с помощью вакуумного термического напыления. Оптические свойства этих тонких пленок Al, различающихся по толщине, были исследованы с помощью метода спектроскопической эллипсометрии (SE). SE широко признан одним из самых мощных методов изучения оптических переходов в тонких пленках и объемных материалах, особенно в области выше энергетической щели [3-6].

Успешно изготовлены тонкие слоистые пленки наноразмерного алюминия (Al) на подложках из натриево-кальциевого стекла (SLG). Эти тонкие пленки различной толщины были получены методом термического напыления. Исходный материал Al имел размер частиц 50 нм. Для определения оптических параметров систем Al/SLG были проведены спектральные исследования с использованием спектроскопической эллипсометрии (СЭ). Для изучения толщины и оптических свойств материалов использовался метод СЭ — высокочувствительный и точный. Данный метод заключается в анализе изменения состояния поляризации света при его наклонном отражении от тонкопленочного образца. Измерения СЭ проводились при комнатной температуре в диапазоне энергий фотонов от 0,5 до 6 эВ. Для анализа спектров СЭ использовался модельный подход, который позволил рассчитать толщину тонких пленок, интерфейсов и шероховатость поверхности, а также оптические свойства образцов. Было отмечено, что на изменение показателя преломления влияет микроструктура пленок, на которую влияет парциальное давление кислорода во время осаждения.

1. Ibrahimov H.D., Amirov F.A., Huseynov H.J., Ibragimova Z.M., Zamanova L.S., Asadzadeh R.N., Jabarov S.H. Carbon nanotubes obtained from natural bas by CVD // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2019. V.13. P.1244-1247.
2. Abdullayeva T.T., Jabarov S.H., Huseynli S., Abdurakhimov B.A., Abiyev A.S., Mirzayev M.N. Effect of electron beam on the crystal structure of nanoscale Al particles // Modern Physics Letters B. 2020. V.34. P. 2050231.
3. Ahmadova Kh.N., Jabarov S.H. Obtaining of Al nanolayers and crystal structure // International Journal on «Technical and Physical Problems of Engineering». 2022. Is. 52. V. 14. N.3. P. 116-120.
4. Ahmadova Kh.N. Spectroscopic Ellipsometric Investigation of Optical Parameters of Oil-Water Thin Multiple Systems // International Journal of Modern Physics B. 2020. V. 34. N. 8. P. 2050058.
5. Ahmadova Kh.N., Jabarov S.H. Obtaining of Al Nanosized Thin Layers and Their Structural Properties // Arabian Journal for Science and Engineering. 2023. N.48. P. 8083–8088.
6. Ahmadova Kh. N. The new innovative optic complete method of identification of oil and its fraction // International Journal of Modern Physics B. 2021. P. 2150241.

## Влияние примесей и длины волны на эффект фотопроводимости в полупроводниковых кристаллах CdTe

*Н.А. Башлыков<sup>1,2</sup>, П.Л. Подкур<sup>1</sup>, И.С. Волчков<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>МИРЭА – Российский технологический университет, Москва

УДК: 621.315.592.3; 537.311.322; 621.382.2/.3, 538.9

Теллурид кадмия используется в качестве материалов для детекторов ионизирующего излучения за счёт ширины запрещенной зоны (~1.44 эВ при 300К), и как материал для солнечных элементов, за счет светопоглощающих и фотоэлектрических свойств [1].

На проводимость полупроводниковых материалов влияет множество факторов. Так, например, введение легирующих примесей в кристалл способно как изменить тип проводимости, так и изменить величину удельной проводимости материала. Также при освещении полупроводника светом наблюдается эффект фотопроводимости. Явление фотопроводимости (фоторезистивный эффект) состоит в увеличении электропроводности полупроводников под действием электромагнитного излучения. При этом при изменении длины волны света, также изменится величина фотопроводимости, в зависимости от ширины запрещенной зоны полупроводникового кристалла и его примесной структуры.

В связи с этим, целью работы являлось определение влияния примесей, таких как: Fe, Co, Ni, Zn, In, Se, а также влияние светового излучения различных длин волн (565 нм, 635 нм, 700 нм,) на фотопроводимость CdTe.

Исследование примесного состава проводилось при помощи метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой, а также при помощи энергодисперсионного анализа, который так же позволял выяснять матричные соотношения Cd к Te. Исследование проводимости проводилось при помощи двухконтактного метода.

Исследования показали, что наиболее значительное влияние оказывают примеси Zn и Se. Наиболее же интенсивное изменение проводимости происходило под действием света с длиной волны 700 нм (красный свет видимого спектра). Данная работа позволит более точно учитывать связь примесного легирующего состава полупроводников с шириной запрещенной зоны и величинами фотопроводимости.

*Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Oluyamo S.S., Faremi A.A., Olusola O. I. O. et al., Tunability of conductivity type and energy band gap of CdTe thin film in the electrodeposition technique // Materials Today: Proceedings. 2021. V.28. Pt. 2. P. 558–563.

## Оптимизация системы формирования импульсной структуры пучка нейтронов для установки малоуглового рассеяния «Мембрана-2»

*Р.Д. Борисов<sup>1,2</sup>, Л.А. Азарова<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 681.2, 53.08, 538.9

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) — неразрушающий дифракционный метод, обеспечивающий анализ структурных характеристик материалов на нанометровом масштабе, включая определение размеров, морфологии и межчастичных взаимодействий в системах нанообъектов, молекулярных ансамблей, кластерных систем и пр. [1]. Актуальность метода стимулирует развитие специализированного оборудования, такого как установка «Мембрана-2», разработанная в Петербургском институте ядерной физики (НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ). Данная установка в перспективе будет иметь два режима работы: монохроматический и времяпролетный, что расширяет экспериментальные возможности в области биологии, физики полимеров, материаловедении и исследованиях кинетических процессов.

Доклад посвящен разработке и оптимизации методов обрезания рабочего спектра с использованием системы дисковых прерывателей и длинноволновых зеркальных фильтров для времяпролетной моды на установке «Мембрана-2». Основной целью работы является определение параметров системы прерывателей, обеспечивающих минимальные потери интенсивности нейтронного пучка при максимальной гибкости в выборе разрешения по длине волны и переданному импульсу. Оптимизация системы прерывателей основана на математическом моделировании с использованием программного пакета McStas [2], что позволяет определить оптимальные параметры системы: частоты вращения, фазовые сдвиги и геометрию фильтров.

Система дисковых прерывателей (чопперов) установки «Мембрана-2» включает в себя четыре диска, каждый из которых имеет щель в  $120^\circ$ , расположен на фиксированном расстоянии и имеет возможность настройки фазового сдвига для реализации «слепой» геометрии [3]. Использование различных пар дисков в качестве слепой пары, позволяет реализовать шесть возможных конфигураций, каждая из которых дает определенное спектральное разрешение, при этом остальные два диска обеспечивают обрезание нежелательных нейтронов (рециклических и неподходящих по энергии) из итогового спектра.

В результате оптимизации определены параметры системы прерывателей, обеспечивающие работу в требуемых спектральных диапазонах. Среди возможных конфигураций выделены режимы с максимальной интенсивностью нейтронного пучка, при этом предложенные решения сохраняют высокую гибкость выбора экспериментальных условий. Исследователь получает возможность адаптировать параметры эксперимента под конкретные задачи, выбирая между режимами с высоким или низким спектральным разрешением, различными диапазонами длин волн и итоговым разрешением по переданному импульсу, что позволяет расширить функциональность установки «Мембрана-2» в исследованиях динамики и структуры сложных систем.

1. Schmatz W. et al. Neutron small-angle scattering: experimental techniques and applications // Journal of Applied Crystallography. 1974. Т. 7. №. 2. С. 96-116.
2. Lefmann K., Nielsen K. McStas, a general software package for neutron ray-tracing simulations // Neutron news. 1999. Т. 10. №. 3. С. 20-23.
3. Van Well A. A. Double-disk chopper for neutron time-of-flight experiments // Physica B: Condensed Matter. 1992. Т. 180. С. 959-961.

## Структура и свойства графеновых аэрогелей, сформированных в гидро и сольвотермальных условиях

*А.Н. Бугров<sup>1,2</sup>, Г.П. Копица<sup>3</sup>, Е.М. Иванькова<sup>1</sup>, Н.В. Пермяков<sup>2</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.9

Графеновые аэрогели (ГА) представляет собой трехмерные пористые углеродные структуры, стенки пор которых состоят из листов графена. ГА обладают низкой плотностью, высокой пористостью, большой площадью поверхности, хорошей электропроводностью и теплоизоляцией. Это позволяет применять ГА в качестве теплоизоляционных материалов, пористых каркасов для суперконденсаторов, элементов энергосберегающих светодиодных ламп, сорбентов, фильтров для опреснения воды и др. Поэтому задача по исследованию влияния условий формирования ГА на их структуру, морфологию и физико-химические свойства представляет несомненный интерес как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. В данной работе модифицированным методом Хаммерса из графита марки ГСМ-1 был синтезирован оксид графена (ОГ), который впоследствии подвергался обработке в гидро и сольвотермальных условиях. Температура обработки варьировалась от 100 до 180°C с шагом 10°C, время изотермической выдержки при этом составляло 8, 10 и 12 часов. Растворитель удалялся из сформированных самосборкой трехмерных углеродных структур в процессе сублимационной или сверхкритической сушки. При гидротермальной обработке происходило расслоение листов ОГ и формировалась более рыхлая морфология геля. Похожая ситуация наблюдалась и для аэрогелей, полученных в сольвотермальных условиях с последующим удалением из них этанола через сверхкритический флюид. Такие аэрогели также имели макропоры, но их стенки по сравнению с трехмерными каркасами сформированным в гидротермальной среде были менее плотные, а морфология была скорее сетчатая нежели ламеллярная. Далее полученные аэрогели на основе ОГ подвергались термическому восстановлению при 2000°C в инертной атмосфере. Высокотемпературная обработка аэрогелей в аргоне позволила получить каркасы с высокопористой морфологией, где стопки листов восстановленного ОГ были случайным образом соединены между собой, создавая трехмерную сеть с большими порами (1-10 мкм). С помощью низкотемпературной адсорбции азота по методу БЭТ была оценена величина площади удельной поверхности ( $S_{уд}$ ) сформированных в гидро- и сольвотермальных условиях аэрогелей многослойного восстановленного ОГ до и после их термической обработки. Аэрогели сформированные самосборкой чешуек ОГ при сольвотермальной обработке с последующей их сушкой в сверхкритических условиях имели  $S_{уд}$  на несколько порядков выше, чем у лиофилизированных аналогов, полученных из водных дисперсий. Высокотемпературная обработка в атмосфере аргона дополнительно повышала величину  $S_{уд}$  практически вдвое. В режиме сканирующей Кельвин-микроскопии было проведено сравнение рельефа и карт токов для синтезированных ГА. При лиофильной сушке гидрогеля и его последующем высокотемпературном отжиге формировались более плотные стенки из нанодисперсного многослойного восстановленного ОГ, нежели в случае аэрогеля, который получали в сверхкритических условиях и затем термообработывали. Было обнаружено, что чем плотнее стенки аэрогеля, выступающие в роли каналов проводимости, тем меньше их электрическое сопротивление.

## Подбор и оптимизация параметров установки нейтронной текстурной дифракции

*К.И. Бусуек<sup>1</sup>, А.А. Павельева<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

УДК:53.072, 538.9

К методам исследования текстуры материалов посредством различных типов излучения относятся дифракция рентгеновских лучей, дифракция нейтронов и синхротронные методы. Основное преимущество нейтронной дифракции заключается в слабом взаимодействии нейтронов с атомами исследуемых материалов. Поэтому глубина проникновения нейтронов, как правило, на два или три порядка больше, чем при дифракции рентгеновских лучей.

Яркими примерами установок по нейтронной текстурной дифракции являются D20 (ILL High-Flux Reactor, Франция), STRESS-SPEC (FRM II, Германия), Kowari (OPAL, Австралия), NTD (CARR, Китай), FCD (HANARO, Южная Корея) и VULCAN (HFIR, США). На территории России на данный момент существует установка СКАТ на базе импульсного реактора периодического действия ИБР-2, однако установки на базе реактора с постоянным потоком нейтронов в настоящее время в России нет. В этом заключается актуальность оптимизации параметров станции TEX-3, которая будет построена на основе установки TEX-2 (FRG-1, Германия) [1], на нейтроноводе Н7-1 реакторного комплекса ПИК (РК ПИК).

В качестве одного из монохроматоров для дифрактометра TEX-3 предлагается использование PG(002), что является актуальным для исследования образцов с межплоскостным расстоянием более 1,5 Å [2]. При использовании PG наблюдается вклад высших гармоник в суммарную интенсивность потока нейтронов, приходящих на образец, что приводит к снижению разрешающей способности установки. Для исключения доли высших гармоник в общем потоке монохроматического пучка необходимо применение нейтронного фильтра. В качестве фильтра выбран графитовый фильтр, эффективно исключающий второй или третий порядки отражения [3].

Для решения данной задачи была разработана и реализована математическая модель установки с фильтром перед узлом монохроматора с помощью программного пакета McStas. Для определения параметров фильтра толщина графитовой пластины варьировалась в диапазоне от 0,00 до 0,15 м с шагом 0,01 м. Исходный поток нейтронов имел интенсивность  $4,7 \cdot 10^{13}$  усл. ед. (соответствующую РК ПИК для нейтроновода Н7-1).

Оптимальная интенсивность нейтронов на образце должна быть близка к  $10^7$  усл. ед. Результаты моделирования показали, что толщина фильтра до 10 см является недостаточной, т.к. суммарная интенсивность нейтронов  $\lambda/2$  при 9 см составляет примерно  $10^6$  усл. ед., что является достаточно близким значением к величине интенсивности доли потока первого порядка. При толщине 15 см коэффициент пропускания фильтра оказывается ниже 45%, в то время как, наиболее эффективным является коэффициент пропускания равный 55 %. Таким образом, оптимальная толщина фильтра составляет 12 см, при данной толщине фильтра интенсивность нейтронов с длиной волны 2,14 Å составляет  $7,4 \cdot 10^6$ , а интенсивность доли высшей гармоники с длиной волны 1,07 Å составляет  $4,7 \cdot 10^4$  усл. ед., эффективность и коэффициент пропускания фильтра составляют 0,28 % и 52 %, соответственно.

Данная толщина графитового фильтра минимизирует потери интенсивности первого порядка, сохраняя его на приемлемом уровне, и в достаточной степени снижает интенсивность второго порядка.

1. Pranzas P.K., Mueller M., Willumeit R., Schreyer A. GeNF-Experimental report. 2008.
2. Anderson I. S. Neutron techniques // International Tables for Crystallography. 2006. P. 430–487.
3. Adib M. Pyrolytic Graphite as a Tunable Second order Neutron Filter // 7. Conference on Nuclear and Particle Physics (NUPPAC,09). Sharm El-Sheikh (Egypt). 11-15 Nov 2009. P. 15 – 24.

## **Фотоэлектронная спектроскопия магнетронно-осажденных пленок оксида титана**

***Р.Г. Валеев, Т.С. Картапова, Т.З. Гусейнов***

*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск*

*УДК: 538.915, 538.971*

За последние десятилетия оксид титана, который с древних времен использовался как белый краситель, стал незаменим и в других приложениях. Например, тонкие пленки нестехиометрического оксида титана активно изучаются как материалы для биоинженерии (биосовместимые композиты, барьерные пленки между органической и неорганической средами), энергетики и электроники (мемристоры, солнечные и топливные элементы), защиты окружающей среды (катализаторы и фотокатализаторы, самоочищающиеся покрытия). Известны следующие основные формы оксида титана, стабильные при нормальных условиях:  $TiO$ ,  $Ti_2O_3$  ( $TiO_{1.5}$ ),  $Ti_3O_5$  и  $TiO_2$ , определяемые возможными степенями окисления, или валентностью, титана 2+, 3+ и 4+. В зависимости от условий синтеза, например, концентрации кислорода в реакционной атмосфере магнетронного распылительного устройства, возможно получение нестехиометрических оксидов  $TiO_x$  со значениями  $x$  от 0 до 2. Анализ содержания кислорода в таких пленках, а также определение степени окисления титана, могут быть проведены методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

В данной работе исследована многослойная пленка  $TiO(20\%)/Co/TiO(5\%)/Co/TiO(3\%)/Co/Ti/Co/Si$ , полученная магнетронным распылением титановой мишени в реакционной смеси аргона и кислорода с соотношением концентраций газов от 100 (Ar):0 ( $O_2$ ) до 100 (Ar):20 ( $O_2$ ). Травление выявило наличие интерфейсов между слоями. Также показано, что валентность титана изменяется от 4+ до 0 при уменьшении содержания кислорода в реакционной атмосфере, за счет образования оксидов переменного состава.

Таким образом, в данной работе методом РФЭС исследован концентрационный профиль образца многослойной пленки на основе оксидов титана с промежуточными слоями кобальта. Показано, что в зависимости от содержания кислорода в реакционной смеси установки магнетронного распыления можно контролируемо управлять валентным состоянием титана, определяющим его электронные свойства. Зная эти зависимости, можно синтезировать материал с заданными свойствами, например, для использования в тонкопленочных мемристорных элементах.

*Исследование выполнено с использованием оборудования ЦКП УдмФИЦ УрО РАН в рамках темы государственного задания Отдела ФХП ФТИ УдмФИЦ УрО РАН (№FUUE-2024-0007).*

## **Биосовместимые материалы на основе взаимопроникающих сеток полиакриламида и бактериальной целлюлозы**

***В.О. Виноградова<sup>1</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>2</sup>, Е.М. Иванькова<sup>2</sup>, Г.В. Ваганов<sup>2</sup>, А.К. Хрипунов<sup>2</sup>, А.Н. Бугров<sup>1,2</sup>***

*<sup>1</sup>СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург*

*<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург*

*УДК: 678, 538.9*

Хрящевая ткань состоит из «каркаса», роль которого выполняет коллаген и наполнителя, представляющего собой протеогликановые комплексы. Благодаря такому строению она обладает высокой прочностью и упругостью, способна выдерживать большие нагрузки. С возрастом вероятность повреждения хрящевой ткани увеличивается, поэтому актуальной задачей является разработка материала, способного ее заменить. В качестве альтернативы хрящевой ткани предлагается использовать композитный материал на основе взаимопроникающих полимерных сеток бактериальной целлюлозы (БЦ) и полиакриламида (ПАА). БЦ обладает рядом таких важных свойств как биосовместимость, высокое водопоглощение и хорошие механические характеристики, ПАА в свою очередь нетоксичен и биоразлагаем. Варьирование параметров полимеризации акриламида и количества БЦ в композите позволит контролировать морфологию и механические характеристики получаемых материалов.

В ходе работы были исследованы деформационно-прочностные характеристики и морфология полученных материалов в зависимости от выбора инициатора (динитрил азобисизомасляной кислоты (ДАК) или  $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ ), условий полимеризации акриламида (температура и время), а также концентрации БЦ в композите. Полученные композиты исследованы с помощью сканирующей электронной микроскопии и испытаний на сжатие (получены кривые деформация-напряжение). Было установлено, что модуль упругости возрастает при уменьшении количества инициатора и времени полимеризации акриламида, а также в случае соотношения сшивателя и мономера 1:1. В зависимости от условий криополимеризации менялась морфология образцов (слоистая или ячеистая структура, размер ячеек, толщина стенок). Также варьировались способы пропитки каркаса БЦ полимеризационной смесью (капиллярная, диффузионная, использование инъекции). Однако при проведении криополимеризации полимеризационная смесь не успевала равномерно пропитать пласт БЦ. Для более равномерного распределения макромолекул ПАА внутри БЦ в качестве инициатора использовался ДАК. Механические характеристики возрастали при увеличении процентного содержания полимеризационной смеси в БЦ (предварительно отжатой до потери 50% воды). В результате были найдены оптимальные условия полимеризации акриламида позволяющие получать гидро и криогели с высокими механическими свойствами. Кроме того, были синтезированы композиты на основе взаимопроникающих сеток ПАА и БЦ существенно превосходящие по своим деформационно-прочностным характеристикам составляющие их отдельно взятые полимеры.

## Создание оптоэлектронных устройств на основе эпитаксиальных слоёв GaPNAs на Si

**В.С. Волосатова<sup>1</sup>, А.М. Можаров<sup>1</sup>, В.В. Фёдоров<sup>1,2</sup>, Л.Н. Дворецкая<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбПУ, Санкт-Петербург

УДК: 335.93, 538.9

Прогресс в интеграции полупроводниковых фосфидных гетероструктур на кремнии способствует развитию монолитной интегрированной оптоэлектроники на основе кремния. Среди различных полупроводниковых материалов фосфид галлия (GaP) имеет более близкую к кремнию кристаллическую решетку, что обеспечивает преимущества с точки зрения снижения деформации и образования дефектов [1]. Наибольший интерес для создания оптоэлектронных устройств, работающих в оранжево-красном диапазоне, представляет собой полупроводниковый твёрдый раствор GaPNAs совместимый с технологиями на кремнии, позволяя оптимизировать дорогостоящий синтез фосфидных соединений, для которого традиционно используются подложки GaP, что делает актуальным использование именно этого материала. Технология эпитаксиального синтеза позволяет формировать приборные гетероструктуры, такие как GaPNAs на кремниевой основе высокого кристаллического совершенства, что положительно влияет на работоспособность конечного устройства.

В данной работе продемонстрированы результаты исследования по созданию светоизлучающей структуры на базе GaP/GaPNAs/GaP на подложке кремния. В работе развиты методы постростовых технологий для формирования отдельных пикселей микронных размеров из планарной гетероструктуры. Также отработаны методы образования контактов из различных материальных систем. Сформированные светоизлучающие структуры были исследованы с помощью вольтамперных и спектральных характеристик.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 23-72-01133.*

1. Václavík J., Vápenka D. Gallium phosphide as a material for visible and infrared optics // EPJ Web of Conferences. EDP Sciences. 2013. V. 48. P. 00028.

## Динамика фазовых переходов металл-полупроводник и обратного полупроводник-металл в тонких пленках SmS, индуцированных механическим и термическим воздействиями

*И.С. Волчков<sup>1</sup>, Д.Р. Хайретдинова<sup>1</sup>, Е.Б. Баскаков<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 539.23, 536.42, 53.096, 538.9

Моносulfид самария (SmS) — халькогенидный материал, существующий в двух возможных состояниях: металлическом и полупроводниковом. Переход между этими состояниями является изоструктурным (NaCl–NaCl) скачкообразным переходом. Переход возможен при различных механических воздействиях на образец [1], за счет термического воздействия [2] и, в некоторых случаях, этот процесс может быть индуцирован оптически [3]. При этом фазовый переход между высокотемпературной (металлической) и низкотемпературной (полупроводниковой) фазой эндотермический и возможен на этапе охлаждения образца.

SmS перспективен в качестве материала для элементов термоэлектрических генераторов n-типа, полупроводниковых тензо-, пьезо и газовых датчиков. Все эти приложения возможны благодаря свойствам SmS. SmS характеризуется высокой термостабильностью, значительными значениями термоэлектродвижущей силы, большими значениями пьезо- и тензорезисторного эффектов. При этом свойства SmS значительно отличаются в зависимости от фазового состояния.

В связи с этим, целью работы было исследование динамики фазовых переходов полупроводник-металл, индуцированного давлением, и металл-полупроводник, индуцированного температурным воздействием.

Объектами исследований являлись тонкие пленки SmS, нанесенные на подложку ситалла СТ-50, методом магнетронного распыления мишени из поликристаллического SmS (с отношением исходных компонентов Sm:S =1.3:1). Полученные тонкие пленки подвергались механической полировке и последующим многократным этапам термического отжига в диапазонах температур 323–498 К. Исследования образцов производились методами РЭМ, ЭДС, АСМ, РФА и исследования температурных зависимостей электрических и термоэлектрических характеристик. Описанные исследования производились как для исходных образцов, так и для образцов, прошедших полировку, а также для образцов, прошедших каждый из этапов термического отжига.

В работе проведены исследования динамики фазовых переходов SmS - механически индуцированного полировкой фазового перехода S-SmS в M-SmS и термически индуцированного фазового перехода M-SmS в S-SmS. Обратный фазовый переход M-SmS – S-SmS наблюдается при охлаждении образцов, в интервале температур 408–373 К. В ходе механической полировки и последующего термического отжига наблюдается изменение элементного состава (к стехиометрии). Обнаружено изменение анизотропии термоЭДС и изменение температурных зависимостей электрических свойств, в зависимости от фазового состояния образцов, что позволяет создавать модулируемые градиентные элементы на основе SmS, представляющие интерес в качестве термоэлектрогенераторов.

*Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Barla A., et al. Pressure-induced magnetic order in golden SmS // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 066401.
2. Rogers E., et al. The thermally induced metal–semiconducting phase transition of samarium monosulfide (SmS) thin films // J. Phys. Condens. Mat. 2010. V. 22. P. 015005.
3. Sousanis A., et al. Switchable piezoresistive SmS thin films on large area // Sensors. 2019. V. 19(20). P. 4390.

**Исследование методом нейтронной дифракции структурных особенностей твердых растворов гексагонального феррита  $\text{SrFe}_{12-x}(\text{CoSn})_x\text{O}_{19}$  ( $x = 0-0,5$ ), частично замещенного ионами  $\text{Co}^{2+}$  и  $\text{Sn}^{4+}$**

***К.М. Гасанов<sup>1,2</sup>, С.В. Сумников<sup>1</sup>, В.Г. Костишин<sup>4</sup>, А.В. Труханов<sup>3,4</sup>, С.В. Труханов<sup>3,4</sup>, М. Чебела<sup>5</sup>, В.А. Турченко<sup>1,4</sup>***

<sup>1</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

<sup>2</sup>*Институт радиационных проблем, Баку*

<sup>3</sup>*ГНПО «Научно-практический центр материаловедения НАН Беларуси», Минск*

<sup>4</sup>*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва*

<sup>5</sup>*Институт ядерных наук Винча, Белград*

УДК: 537.9, 538.9

Гексаферриты М-типа привлекают значительное внимание благодаря возможности их практического применения в различных областях техники: магнитные носители информации с высокой плотностью записи, постоянные магниты и СВЧ-устройства. Интерес к этим материалам обусловлен взаимосвязью химического состава, структурных особенностей и магнитных свойств [1–3].

В данном исследовании была изучена кристаллическая и магнитная структура ферритмагнитного материала, частично замещенного ионами  $\text{Co}^{2+}$  и  $\text{Sn}^{4+}$ . Экспериментальные исследования проводились методом нейтронной дифракции с использованием нейтронного дифрактометра ФДВР при комнатной температуре. Анализ данных выполнен методом Ритвельда с использованием программного пакета FullProf.

Замещение магнитоактивных ионов Fe ионами Co и Sn в твердом растворе  $\text{SrFe}_{12-x}(\text{CoSn})_x\text{O}_{19}$  приводит к немонотонному изменению объема и параметров элементарной ячейки. Параметры решетки (a и c) немонотонно возрастают от 5.884 Å до 5.884 Å и от 23.04 Å до 23.07 Å, соответственно, при увеличении концентрации x от 0 до 0.5. Наблюдаемое поведение обусловлено различием ионных радиусов Co ( $r = 0.885$  Å) и Sn ( $r = 0.83$  Å) в сравнении с ионом Fe ( $r = 0.785$  Å).

Согласно данным нейтронной дифракции, полный магнитный момент формульной единицы уменьшается с 13.6  $\mu_B$  до 11.7  $\mu_B$  при легировании ионами Co и Sn, что коррелирует с изменением температуры Кюри, которая монотонно снижается с 674 К ( $x = 0.1$ ) до 660 К ( $x = 0.6$ ). Подобное поведение свидетельствует о нарушении сверхобменных взаимодействий между ионами Fe-O-Fe в кристаллической решетке.

Сравнение результатов уточненных нейтронных данных показывает, что концентрационная зависимость полного магнитного момента определяется кристаллографическими позициями, в которых ионы Co и Sn замещают ионы Fe, что связано с искажениями отдельных структурных фрагментов. Методом нейтронной дифракции установлено уменьшение полного магнитного момента, вследствие локализации ионов Co и Sn в кристаллографических позициях  $4f_2$  и  $2b$  (при  $x = 0.1-0.2$ ), а также  $4f_2$  (при  $x = 0.3-0.5$ ).

1. Topkaya R., Auwal I., Baykal A. Effect of temperature on magnetic properties of  $\text{BaY}_x\text{Fe}_{12-x}\text{O}_{19}$  hexaferrites // *Ceramics International*. 2016. V. 42. N. 14. P. 16296-16302.
2. Amir Md, et al. Concentration and temperature-dependent magnetic properties of  $\text{Ba}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$  hexaferrites // *Ceramics International*. 2018. V. 44. N. 1. P. 988-992.
3. Iqbal M. et al. Magnetic, physical and electrical properties of Zr-Ni-substituted co-precipitated strontium hexaferrite nanoparticles // *Scripta Materialia*. 2007. V. 57. P. 1093–1096.

## Исследование кристаллической и магнитной структуры $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_6$ ( $x = 0-0,25$ ) при комнатной температуре методом нейтронной дифракции

*К.М. Гасанов<sup>1,2</sup>, С.В. Сумников<sup>1</sup>, В.Г. Костишин<sup>3</sup>, М. Чебела<sup>4</sup>, В.А. Турченко<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Институт радиационных проблем, Баку

<sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

<sup>4</sup>Институт ядерных наук Винча, Белград

УДК: 537.9, 538.9

Соединения с двойной перовскитоподобной структурой  $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$  (где А представляет собой катион редкоземельного или щелочноземельного элемента, а В и В' — переходные металлы), привлекают внимание благодаря уникальной кристаллической структуре и выдающимися свойствам, включая полуметаллическую проводимость, а также магнитные и оптоэлектронные характеристики. Такие особенности делают их весьма перспективными для различных технологических применений, например спинтроники [1–3].

Особенности кристаллической и магнитной структуры оксидов двойного перовскита  $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_6$  ( $x = 0-0,25$ ) были исследованы методом нейтронной дифракции при комнатной температуре на нейтронном дифрактометре ФДВР. Дифракционные данные анализировали с использованием метода Ритвельда в программном пакете FullProf для уточнения параметров кристаллической и магнитной структуры.

Результаты анализа указывают на систематическое изменение параметров решетки с увеличением содержания ванадия. Параметр решетки 'а' уменьшается от 5,579 Å до 5,576 Å при увеличении концентрации  $x$  от 0 до 0,25. Значение объема элементарной ячейки 'V' уменьшается от 246,2 Å<sup>3</sup> ( $x = 0$ ) до 245,7 Å<sup>3</sup> ( $x = 0,25$ ). Данная тенденция свидетельствует о сжатии кристаллической решетки, что объясняется меньшим ионным радиусом  $\text{V}^{5+}$  ( $r = 0,54$  Å) по сравнению с  $\text{Mo}^{5+}$  ( $r = 0,61$  Å). Нейтронная дифракция и анализ Ритвельда  $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_6$  показывают, что замещение ванадия приводит к тонким структурным изменениям и значительному снижению магнитного момента. Наблюдается заметное уменьшение магнитного момента на атом железа с увеличением содержания ванадия. Для немодифицированного образца ( $x = 0$ ) магнитный момент на атом Fe составляет 1,196  $\mu_B/\text{Fe}$ , уменьшаясь до 0,577  $\mu_B/\text{Fe}$  при  $x = 0,25$ .

Данные результаты способствуют пониманию того, как замещение катионов в позиции В-подрешетки влияет на структурные и магнитные особенности оксидов двойного перовскита и представляются полезными при разработке новых устройств с контролируемыми функциональными свойствами.

1. Ghorbani Z., Ehsani M. H. Synthesis and magnetic properties of  $\text{Ba}_{2-x}\text{Sm}_x\text{FeMoO}_6$  ( $0.0 \leq x \leq 0.1$ ) Double perovskite // *Ceramics International*. 2023. V. 49. N. 16. P. 27362-27372.
2. Jonathan H., et al. Perovskites in catalysis and electrocatalysis // *Science*. 2017. V. 358. N. 6364. P. 751-756.
3. Feroz A N., Sultan K. From halfmetallicity to dielectric tensor: Atomistic study of phase stability and optical spectrum of  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  double perovskite and its potential applications // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2022. V. 171. P. 111039.
4. Erchidi Elyacoubi A. S., et al. Magnetic Properties and Magnetocaloric Effect in Double  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  Perovskites // *Materials Research Bulletin*. 2018. V. 99. P. 132-135.

**Динамика димеров ибупрофена по результатам расчетов методом DFT и комплементарных экспериментальных исследований**

**П.А. Гергеледжиу<sup>1,2</sup>, Е.В. Ракша<sup>1</sup>, А.В. Белушкин<sup>1,3</sup>, А.Б. Ерьско<sup>1</sup>, Л.И. Савостина<sup>3</sup>,  
Д.М. Худоба<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Филиал МГУ имени М.В. Ломоносова, Дубна

<sup>3</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

УДК: 538.9+547-32+544.174

Многие лекарственные вещества представляют собой рацемическую смесь двух энантиомеров S и R, из которых только один биологически активный. Ярким примером является ибупрофен – препарат из перечня жизненно важных лекарств. Его неактивный R-энантиомер в организме подвергается метаболической инверсии и превращается в активный S. В большинстве случаев ибупрофен используется в виде твердых лекарственных форм, в которых он находится в кристаллическом состоянии. По известным экспериментальным данным [1] в кристаллической структуре ибупрофена можно выделить структурный фрагмент, а именно циклический димер R и S энантиомеров.

На уровне межмолекулярных взаимодействий большую роль играет структурная подвижность основных фрагментов вещества, которая будет определяться внутримолекулярной динамикой. Для ибупрофена детальными исследованиями внутримолекулярной динамики с учетом наличия двух энантиомеров и их возможных взаимодействий ранее не проводилось. При переходе от кристаллической формы к раствору нельзя исключить как сохранения межмолекулярных водородных связей между энантиомерами, так и образования новых типов ассоциатов.

Объектом исследования являются R и S энантиомеры ибупрофена, а также их димеры. В работе использовалась комбинация расчетных (DFT) и экспериментальных (ИК- и Раман-спектроскопия) методов. Оптимизация молекулярной геометрии, расчет параметров электронного строения и колебательных частот энантиомеров ибупрофена и их димеров выполнены на уровне теории BP86/def2-TZVP (программный комплекс ORCA 5.0.3).

Для энантиомеров ибупрофена был проведен конформационный анализ и выявлены наиболее стабильные конформеры, для которых выполнен расчет колебательных частот [2]. Исходная молекулярная конфигурация циклического R-S димера соответствовала таковой в кристаллической структуре рацемата ибупрофена [1]. Для нее также выполнены полная оптимизация геометрии и расчет колебательных частот.

Показано, что наличие межмолекулярной водородной связи в циклическом R-S димере влияет на колебательные частоты групп атомов, принимающих участие в межмолекулярных взаимодействиях (карбоксильная группа). Использование димера в качестве модели для DFT-расчетов позволяет получить более корректные результаты, сравнимые с экспериментом [2]. Получены хорошие линейные корреляции между расчетными и экспериментальными колебательными частотами ибупрофена. Выявлены ключевые колебательные частоты карбоксильной группы, которые могут быть использованы в качестве маркеров межмолекулярных взаимодействий при исследовании динамики ибупрофена и других соединений из этой группы лекарственных препаратов.

*Работа выполнена при поддержке гранта молодым ученым и специалистам ОИЯИ 24-402-01.*

1. Derollez P. et al. Ab initio structure determination of phase II of racemic ibuprofen by X-ray powder diffraction // Acta Crystallographica Section B: Structural Science. 2010. V. 66. No. 1. P. 76-80.
2. Logacheva K., Gergelezhiiu P., Raksha E. et al. Vibrational Spectroscopic Features of Ibuprofen and Ketoprofen: IR and Raman Spectroscopy Combined with DFT Calculations // Physics of Particles and Nuclei Letters. 2024. V. 21. No. 4. P. 839-842.

## Тропический центр во Вьетнаме. О натуральных испытаниях покрытий в тропиках

*И.Б. Глебова, К.А. Полетаев, О.А. Шилова*

*Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург*

*УДК: 667.637.2: 629.5.018.75*

В Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова на протяжении ряда лет разрабатываются органосиликатные, органо-неорганические и лакокрасочные покрытия на основе различных полимерных связующих и золь-гель композиций для защиты металлов и сплавов, композитных материалов и древесины от атмосферной коррозии, морского биообрастания и биодеструкции. При этом основное внимание уделяется созданию экологически безопасных покрытий, не содержащих жестких биоцидов, оказывающих минимальную нагрузку на окружающую среду. Оценить эффективность защитного действия покрытий от тех или иных неблагоприятных факторов внешней среды и, соответственно, определить срок службы покрытий удобно эффективно при проведении натуральных испытаний, например, в экстремальных условиях тропического климата. Такая возможность появилась у Института в 2020 году. Благодаря субсидиям Минобрнауки России, осуществляются атмосферные и морские натурные испытания разработанных покрытий на климатических станциях Совместного Российско-Вьетнамского Тропического научно-исследовательского и технологического центра (Тропического центра), расположенного в Социалистической Республике Вьетнам. Тропический центр создан в 1987 году и является филиалом Института проблем экологии и эволюции им. А.Н. Северцова Российской академии наук (ИПЭЭ РАН). Он осуществляет свою деятельность в областях тропического материаловедения, тропической экологии и тропической медицины.

Благодаря вытянутости территории Вьетнама с севера на юг, климатические испытательные станции (КИС) Тропического центра расположены в разных климатических зонах. Головное Отделение находится в г. Ханое (КИС Хоа Лак), где тип климата относится к субтропическому. Морская научно-исследовательская испытательная станция (МНИИС Дам Бай) относится к Приморскому Отделению, которое находится в г. Нячанг, где климат тропический муссонный. Южное Отделение Тропического центра базируется в г. Хошимин (КИС Кон Зо), который лежит всего в 8 градусах к северу от экватора, здесь климат субэкваториальный. Натурные испытания покрытий в разных климатических зонах тропического климата дают возможность сравнить эффективность защитного действия покрытий в зависимости от количества осадков, интенсивности солнечной радиации и других факторов. Например, при атмосферных испытаниях информационными являются результаты оценки коррозионной стойкости [1, 2], цвето- и светостойкости [3] и грибостойкости покрытий [4]. Весьма ценными являются результаты морских испытаний по выявлению противообрастающих свойств покрытий, видов обрастателей, влияния на них биоцидных добавок, входящих в состав покрытий [1]. В докладе более подробно будет рассказано о самом Тропическом центре, его структуре и о возможностях, которые открываются для проведения натуральных испытаний в тропическом климате.

*Исследования финансируются по темам госзаданий Филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС №№ 1023032900385-8-1.4.3 и 1023033000122-7-1.4.3 и по темам НИР «Эколан» Т-1.14 (2020-2024 г.г.) и «Эколан» Т-1.6 (2025-2029 г.г.) Минобрнауки России.*

1. Кондратенко Ю.А., Голубева Н.К., Кочина Т.А. и др. Натурные испытания защитных эпоксидных покрытий в условиях влажного тропического климата // Физ. и хим. стекла. 2023. Т. 49. № 1. С. 80-88.
2. Ivanova A.G., Dolmatov V.Yu., Ugolkov V.L. et al. Nanostructured diamond particles in the development of protective anticorrosion epoxy coatings // Prot. Met. Phys. Chem. Surf. 2024. Vol. 60. P. 75–85.
3. Krasil'nikova, et al. Weather-resistant organosilicate coatings with improved water resistance // Colloid J. 2024. Vol. 86. No. 5. P. 719–729.
4. Shilova O.A., Tsvetkova I.N., Vlasov D.Yu. et al. Microbiologically induced deterioration and environmentally friendly protection of wood products pp. In: Biodegradation and Biodeterioration at the Nanoscale, Elsevier, 2021, pp. 283-321. Series: Micro and Nano Technologies.

## Исследование модификации поверхности УНТ ферроценил-содержащими (поли)силоксанами

*Е.А. Головенко, Р.М. Исламова*

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург*

УДК: 538.9, 54.02

Модификация углеродных нанотрубок (УНТ) железосодержащими соединениями открывает новые возможности для их использования в качестве компонентов электрохимических (био)сенсоров, оптоэлектронных устройств, а также в области катализа [1]. Перспективными железосодержащими соединениями являются ферроценил-содержащие полисилоксаны. Полисилоксаны представляют собой элементоорганические полимеры, основная цепь которых состоит из атомов кремния и кислорода. Данные полимеры гибкие, биоинертные, гидрофобные, стабильные при хранении и имеют широкий интервал рабочих температур. Среди железосодержащих функциональных групп наиболее предпочтительными являются ферроценильные ввиду их легкого и стабильного одноэлектронного редокс-перехода, устойчивости при комнатной и повышенных температурах, коммерческой доступности [2]. Таким образом, модификация УНТ ферроценил-содержащими (поли)силоксанами позволит придать УНТ редокс-активные свойства, улучшит диспергируемость модифицированных УНТ в растворителях и в полимерной матрице, что расширит круг их потенциального практического применения. Одним из способов модификации ферроценил-содержащими полисилоксанами является реакция лигандного обмена, когда атом железа координируется к гексагональному кольцу наружной стенки УНТ [3]. Эта модификация позволяет не только скоординировать атом железа к поверхности УНТ, но и вводить ферроценил-содержащие полисилоксановые цепи к поверхности УНТ.

В данной работе проведена модификация УНТ ферроценил-содержащим полисилоксанами, что подтверждено методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния (КРС) [4]. Полученные с использованием КРС экспериментальные данные находятся в соответствии с проведенными нами теоретическими расчетами.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-13-00038.*

1. Zhang, Z., Turner, C. H. Structural and Electronic Properties of Carbon Nanotubes and Graphenes Functionalized with Cyclopentadienyl–Transition Metal Complexes: A DFT Study // *Journal of Physical Chemistry C* 2013. V. 117. P. 8758–8766.
2. Deriabin, K.V., Islamova, R.M. Ferrocenyl-Containing Oligosiloxanes and Polysiloxanes: Synthesis, Properties, and Application // *Polymer Science, Series C*. 2022. V. 64. P. 95–109.
3. Golovenko, E. A., Pankin, D. V., Deriabin, K. V., Volkov, A. I., Kirichenko, S. O., Levin, O. V., Islamova, R. M. Ligand Exchange Reaction between Ferrocene and Multiwalled Carbon Nanotubes: A Contemporary Approach // *Langmuir* 2024. V. 40. 6909–6917.
4. Golovenko, E. A., Pankin, D. V., Deriabin, K. V., Kirichenko, S. O., Perevyazko, I., Koroleva, A. V., Islamova, R. M. Modified with ferrocenyl-containing oligo- and polysiloxanes multi-walled carbon nanotubes for soft conductive silicone composites // *Materials Today Communications* 2024. V. 41. P. 110429.

## Невзаимные свойства пленок ЖИГ, интеграция кристаллов в развязывающие узлы СВЧ электроники

*С.И. Горбунов<sup>1,2</sup>, Н.С. Максимов<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>АО «Всероссийский НИИ радиотехники», Москва

<sup>2</sup>Кафедра формирования и обработки радиосигналов ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ» Москва

<sup>3</sup>Кафедра радиотехнических приборов и антенных систем ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ», Москва  
УДК:538.975

Ферриты нашли широкое применение при производстве СВЧ-устройств диапазона 1–110 ГГц в частности фильтров, циркуляторов, вентилях [1,2] за счет свойств невзаимности спиновых волн. Этот эффект широко используется при создании фильтров МСВ и заключается в возбуждении, распространении и приеме спиновой волны в монокристалле железоитриевого граната (ЖИГ). В работе рассматриваются характеристики передачи и отражения ЖИГ пленок различной геометрии с микрополосковыми антеннами в качестве возбудителей спиновой волны. Намагниченность насыщения пленок ( $4\pi M_s$ ) экспериментально определена как точка, в которой намагниченность ферритового образца перестает нарастать при увеличении внешнего магнитного поля и составляла 1750 Оэ. Во время расчетов пленок ЖИГ учитывалась зависимость магнитных свойств ферромагнетика от поляризации его намагничивания относительно осей кристаллической решетки [1]. Кроме СВЧ-фильтров, на основе монокристаллических пленок ЖИГ возможно изготовление электронно перестраиваемых фазовращателей, генераторов и других СВЧ-компонентов [2]. Их главными достоинствами являются миниатюрность, планарность конструкции и возможность изготовления по интегральной технологии.

Рабочий частотный диапазон СВЧ-вентиля может лежать как в области ферромагнитного резонанса, так и ниже или выше частоты ФМР. При заданной напряженности внешнего магнитного поля частота ФМР зависит от значений  $4\pi M_s$  и  $H_A$ , а также от формы образца [3].

1. Гуревич А., Мелков Г. Магнитные колебания и волны. – М.: Физматлит, 1994, 464 с.
2. Вапнэ Г. СВЧ-устройства на магнитостатических волнах // Обзоры по электронной технике. 1984. Сер. 1. 78 с.
3. Калиникос Б., Устинов А., Баруздин С. Спин волновые устройства и эхо-процессоры. Монография под ред. Ушакова В. – М.: Радиотехника, 2013, 216 с.

## Влияние анизотропии поглощения на спектр запрещённых отражений в резонансной дифракции синхротронного излучения

*М.В. Горбунова, Е. Н. Овчинникова*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
физический факультет, Москва*

УДК 519.26:539.3: 548.7

Измерение спектральных, угловых, поляризационных свойств брэгговских отражений, запрещенных правилами погасаний пространственных групп симметрии, дает возможность изучения разных видов упорядочения (зарядового, магнитного, орбитального, мультипольного) на атомном уровне, и реализуется на специализированных станциях синхротронного излучения.

Такие отражения существуют благодаря наличию анизотропных вкладов в структурную амплитуду, которые отражают симметрию изучаемого вида упорядочения, малы по сравнению с амплитудой рассеяния на зарядовой плотности, но возникают только при энергиях падающего излучения, близким к краям поглощения атомов в кристалле. В настоящее время существуют достаточно надежные методы расчета резонансной амплитуды рассеяния с учетом мультипольных вкладов, реализуемые, например, в программе FDMNES [1]. Однако при расчете интенсивности брэгговского отражения обычно используется кинематическая теория, и не учитываются эффекты самопоглощения, дихроизма и двулучепреломления. В работе [2] развит подход с использованием матрицы распространения, который позволяет учесть эти факторы, и получен явный вид этой матрицы.

В настоящей работе приводятся результаты обработки спектров запрещенных отражений в кристалле  $\text{Fe}_3\text{BO}_6$ , выполненные с помощью программы, написанной на языке Python, в основу которой положен метод, развитый в [2]. Показано, что использование данной программы позволяет улучшить соответствие экспериментальным данным [3] по сравнению с традиционным методом обработки спектров отражения. Полученные результаты могут быть очень полезны в тех случаях, когда точность обработки экспериментальных спектров позволяет выделить малый вклад в резонансное рассеяние и играет критическую роль для интерпретации результатов эксперимента.

1. <https://fdmnes.neel.cnrs.fr>. (дата обращения 15.02.2025)

2. Lovesey S.W., Collins S. P. X-ray birefringence and dichroism obtained from magnetic materials // J. Synchrotron Radiat. 2001. V.8. P. 1065–1077.

3. Beutier G., et al. Interplay of inequivalent atomic positions in resonant x-ray diffraction of  $\text{Fe}_3\text{BO}_6$  // J.Phys.:Condens.Matter. 2009. V.21. P. 265402 - 265414.

## Структурная нестабильность монокристаллов гексаборидов празеодима и неодима при температурах от 30 до 293 К

*В.М. Гридчина, О.Н. Хрыкина, Н.Б. Болотина*  
КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 548.736.6, 538.9

Настоящая работа является частью фундаментального исследования, направленного на выявление структурных особенностей и их влияния на физические свойства гексаборидов редкоземельных элементов (РЗЭ) [1]. Объектами исследования являются кристаллы-магнетики  $\text{NdB}_6$  и  $\text{PrB}_6$

При комнатной температуре гексабориды РЗЭ обладают структурой типа  $\text{CaB}_6$ . Атомы бора образуют ковалентно связанный каркас, обеспечивающий материалы высокой прочностью, твердостью и температурой плавления. Полости каркаса центрированы атомами металла, определяющими физические свойства.

Проведена серия рентгеноструктурных экспериментов с использованием монокристалльного дифрактометра Synergy DW HyPix-Arc 150° в диапазоне 30–293 К. Модель структуры  $\text{NdB}_6$  и  $\text{PrB}_6$  была уточнена в пространственной группе симметрии  $R\bar{m}-3m$ .

Обнаружены области немонотонного температурного поведения параметров элементарной ячейки и межатомных расстояний, а также малые статические отклонения от кубической симметрии решетки, связанные с проявлением эффекта Яна–Теллера.

Выявленные тенденции температурного изменения соответствуют отклонениям зависимости ширины квазиупругого рассеяния нейтронов от линейного закона Корринги ниже 80 К [2] в  $\text{PrB}_6$  и аномалия типа Шоттки на зависимости теплоемкости в области 50 К [3] в  $\text{NdB}_6$ .

Вычислено распределение электронной плотности в ячейке с помощью метода максимальной энтропии на основе структурных данных. Обнаружено перераспределение электронной плотности с образованием динамических зарядовых страйпов в направлении  $\langle 001 \rangle$ , которое усиливается с понижением температуры вплоть до 30 К. Такое электронное фазовое расслоение в виде полос, описанное в [1], свидетельствует о динамической природе эффекта Яна–Теллера. Стоит отметить выраженную неэквивалентность распределения электронной плотности в эквивалентных в кубическом классе симметрии плоскостях.

*Работа выполнена в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования ЦКП НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Khrykina O.N. et. al. Evidence for nanosized magnetic clusters of Ce-ions in the archetypal heavy fermion metal  $\text{CeB}_6$  // J. Alloys Compd. 2024. V. 970.P. 172527.
2. Alekseev P.A. et. al. Specific features of the formation of the ground state in  $\text{PrB}_6$  // Physics of the Solid State. 2010. V. 52. № 5. P. 914–916.
3. Reiffers M. et. al. Heat capacity of  $\text{NdB}_6$  // J. Magn. Magn. Mater. 2007. V. 310. P. e595–e597.

## Свердловск и становление атомного проекта СССР

С.А. Гудин

*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург*

УДК: 539.18, 539.9

В работе освещается вклад сотрудников научных и образовательных учреждений г. Екатеринбурга в первый этап Атомного проекта СССР [1]. Вклад этот малоизвестен, в основном в связи с переводом привлекаемых в Атомный проект на работу в такие специально создаваемые учреждения, как Лаборатория № 2 АН СССР, Уральский электрохимический комбинат (г. Новоуральск), КБ-11 (РФЯЦ-ВНИИЭФ) г. Саров. Основная часть доклада посвящена описанию разрешения одной из труднейших задач, вставших перед разработчиками атомного щита СССР, - промышленное разделение изотопов урана.

Доклад состоит из следующих частей:

1. Начало Атомного проекта;
2. Первые исследования на центрифуге Ланге;
3. Помощь советской разведки;
4. Начало работ по Атомному проекту в Свердловске;
5. Пористые фильтры;
6. Перенос работ из Свердловска в Москву;
7. Вопрос рецензента;
8. Уральский электрохимический комбинат;
9. Поездка в Берлин в мае 1945 г.;
10. Второй десант в Атомный проект Свердловских ученых;
11. Первый диффузионный завод Д-1;
12. Центрифужная технология обогащения урана;
13. Разработка методов регистрации ядерных взрывов;
14. Сотрудники лаборатории фазовых превращений Института физики металлов;
15. Ученые химики;
16. Вместо эпилога.

Разработка диффузионного метода разделения изотопов урана являлась одной из труднейших задач, вставших перед учеными страны. Еще более трудной являлась задача получение урана методом центрифугования: если при создании диффузионных машин можно было опираться на разработки в США и Великобритании, то разработка центрифужного метода разделения опередила на несколько десятилетий мировую ядерную промышленность. Важность перехода на новый метод разделения, можно прокомментировать двумя фактами. 1 факт: всемирная ядерная ассоциация (англ. World Nuclear Association) утверждает, что в разгар холодной войны три газодиффузионных завода США в период наибольшей мощности потребляли 7% электроэнергии, производимой в США. 2 факт: опытный центрифужный завод Уральского электрохимического комбината в 1958-м г. «вышел на расчетный режим и показал, что при таком методе как минимум в двадцать раз (!) сокращается энергопотребление на единицу разделения» по сравнению с газодиффузным методом разделения изотопов урана [2].

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.*

1. Гудин С.А. Сотрудники Института физики металлов УрО РАН и становление атомного проекта СССР // Успехи физических наук. 2024. Т. 194. №7. С.765-789.
2. Емельяненко А.Ф. Соло на центрифуге // - АНО «Информационный центр атомной отрасли». 2013. 28 с.

## Исследование миграции кислорода в нестехиометрической наноразмерной пленке $TiO_x$

Т.З. Гусейнов<sup>1,2</sup>, О.Р. Бакиева<sup>2</sup>, Р.Г. Валеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, Ижевск

<sup>2</sup>Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр УрО РАН, Ижевск

УДК: 543.428.2, 538.9

Мемристор – это двухполюсное запоминающее устройство, которое может изменять свое сопротивление в зависимости от протекшего через него электрического заряда. Приоритетным направлением применения мемристивных устройств является создание суперкомпьютеров с искусственным интеллектом. Считается, что благодаря своим свойствам, мемристоры могут играть роль электронного синапса. Технически мемристивные элементы состоят из двух проводников между которыми есть активный слой. В качестве активного слоя могут использоваться наноразмерные пленки оксидов металлов. Работа устройства обеспечивается миграцией вакансий кислорода, при этом существует проблема деградации оксидного слоя и потери мемристивных свойств с течением времени.

Целью настоящей работы является провести исследования изменений химического и элементного состава пленок  $TiO_x$ , происходящих в условиях естественного окисления. Объектом исследования являлась наноразмерная пленка  $TiO_x$  с переменной концентрацией кислорода, синтезированная методом магнетронного осаждения на подложке из монокристаллического кремния. Методом Оже-электронной спектроскопии были проведены исследования изменений, происходящих в мемристивном оксидном слое  $TiO_x$  с течением времени. Были построены зависимости концентрации химических элементов от толщины пленки. Показана миграция кислорода от кремниевой подложки к поверхности.

*Данная работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351. Исследования проводились с использованием средств совместного исследовательского центра “Поверхность и новые материалы” УдмФИЦ УрО РАН.*

## Упругие свойства бензофенона при высоких давлениях и низких температурах

*И.В. Данилов<sup>1</sup>, Е.Л. Громницкая<sup>1</sup>, В.В. Бражкин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва*

УДК: 534-8, 538.9

Ультразвуковым методом определены упругие свойства стеклообразного и кристаллического (в  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификации) бензофенона ( $C_6H_5$ )<sub>2</sub>CO при высоких давлениях до 1 ГПа и в интервале температур от 77 К до 293 К. В исследованном температурном диапазоне 77–293 К экспериментально исследован каскад фазовых переходов между четырьмя состояниями бензофенона: стекло, переохлажденная жидкость и две кристаллические модификации:  $\beta$  (метастабильная) и  $\alpha$  (стабильная) [1]. Определены границы фазовых переходов при изобарическом отогреве. Получены барические и температурные зависимости упругих свойств: модуля объемной упругости  $B$ , модуля сдвига  $G$ , коэффициента Пуассона  $\sigma$  и плотности  $\rho$ . Стеклообразный бензофенон имеет существенно более низкие упругие модули, чем  $\alpha$ -модификация при 77 К (модуль сдвига  $G$  стекла примерно вдвое меньше, чем у кристалла) [2]. Кристаллическая  $\alpha$ -модификация демонстрирует сильное размягчение обоих модулей с ростом температуры в диапазоне 77–293 К. Нагревание стекла приводит к образованию очень вязкой переохлажденной жидкости, которая кристаллизуется в метастабильную  $\beta$ -модификацию. Дальнейшее повышение температуры приводит к монотропному фазовому переходу  $\beta - \alpha$ .

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта РФФ 24-12-00037.*

1. Davydova N.A. et al. The structural differences of benzophenone glasses according to different thermal history // Journal of Molecular Structure. 2002. V. 614. P. 173–176.
2. Gromnitskaya E.L. et al. Benzophenone glass, supercooled liquid, and crystals: elastic properties and phase transitions // Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. V. 25. P. 16060-16064.

## Топологические дефекты в физике конденсированного состояния и их связь с другими разделами науки

П.В. Долганов

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка*  
УДК: 538.91, 539.22

Топологические дефекты представляют собой сингулярности поля параметра порядка и существуют в различных системах со спонтанно нарушенной симметрией [1]. Топологические дефекты представляют интерес сами по себе, они влияют на статические и динамические свойства систем. Кроме того, исследование топологических дефектов позволяет определить характеристики среды, как количественные, так и качественные, связанные с симметрией параметра порядка.

В докладе будет рассказано о топологических дефектах и солитонах в различных конденсированных средах и их основных свойствах. Описаны упорядоченные структуры различного типа, образованные дефектами, закономерности поведения дефектов, роль топологических дефектов молекулярного упорядочения в самоорганизации частиц в анизотропных средах [2-4]. Обсуждается аналогия топологических дефектов в конденсированных средах и объектов, изучаемых в других разделах науки. Представлены результаты исследования топологических дефектов в поле ориентационного упорядочения жидкого кристалла в ограниченной геометрии [4]. Обсуждается физика образования структур пониженной размерности из топологических дефектов, коллективное поведение дефектов, аннигиляция дефектов-антиподов с топологическими зарядами противоположного знака, зависимость коллективной динамики дефектов от размерности системы. Описывается обнаруженная нами последовательность топологических переходов с изменением Эйлеровой характеристики и суммарного топологического заряда системы.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-12-00200.*

1. Selinger J. Introduction to Topological Defects and Solitons in Liquid Crystals, Magnets and Related Materials // Springer, 2024.
2. Dolganov P.V. et al. Manifold configurations of director field formed by topological defects in free and confined geometry in smectic films // Phys. Rev. E. 2014. V. 90. No. 6. P. 062501.
3. Dolganov P.V. et al. Interaction and self-organization of inclusions in two-dimensional free-standing smectic films // Liquid Crystals Reviews. 2019. V. 7. No. 1. P. 1.
4. Dolganov P.V. et al. Ordered structures formed by nematic topological defects and their transformation with changing the Euler characteristics // Phys. Rev. E. 2024. V. 110. No. 2. P. 024703.

**Проводящие металлполимерные композиты на основе трековых мембран  
И.М. Долуденко<sup>1</sup>, И.С. Волчков<sup>1,2</sup>, П.Л. Подкур<sup>1</sup>, Д.Р. Хайретдинова<sup>1,3</sup>, И.О. Кошелев<sup>1</sup>,  
В.М. Каневский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>2</sup>РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

<sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва, Россия  
УДК: 537.9, 538.9

Одними из перспективных материалов для применений в микроэлектронике, сенсорике и радиоэлектронике, а также в качестве многофункциональных подложек, являются проводящие металлполимерные нанокompозиты (МПК). Существуют различные методы получения подобных материалов.

В данной работе рассматривался метод получения на основе электрохимического заполнения пор трековых мембран, расположенных под разными углами к нормали пленки. Заполняя данные поры металлом, можно получать проводящие МПК на основе нанопроволок (НП). При этом, характер распределения наклонов пор и, как следствие, НП будет определять анизотропию электрической проводимости, а степень заполнения пор или длина НП будут определять проводимость всей структуры.

Целью представляемой работы было установление взаимосвязи степени заполнения матрицы и проводимости МПК для создания датчиков давления на их основе.

В работе матрицы из ПЭТФ с углом отклонения от нормали  $\pm 30^{\circ}$  по одной оси и  $\pm 0,5^{\circ}$  по второй оси заполнялись сплавом FeNi по составу приближенному к пермаллою. Длина получаемых НП контролировалась за счет изменения времени осаждения. Методом РЭМ исследовались массивы получаемых НП. Были подтверждены отклонения углов от нормали оси роста в обоих направлениях. Установлена взаимосвязь времени осаждения и длины НП.

Исследовались электрические свойства полученных МПК с разной степенью заполнения пор. Результаты показали, что проводимость структуры увеличивается с ростом степени заполнения матрицы. Также рассчитывалось количество пересечений НП в зависимости от их длины. Было доказано, что с ростом степени заполнения матрицы или длины НП нелинейно растет количество пересечений НП, и, как следствие, проводимость всей структуры.

Исследовались прочностные характеристики МПК. Было доказано, что микротвердость образцов резко увеличивается с ростом длины нанопроволок начиная с длины НП более 2,5 мкм, что связано с увеличением количества их пересечений.

*Работа проведена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

## Магнитные коллоиды на основе анизотропных жестко магнитных наночастиц SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>

Ар.А. Елисеев<sup>1</sup>, В.В. Королев<sup>1,2</sup>, Е.О. Анохин<sup>1</sup>, А.В. Васильев<sup>1</sup>, А.А. Семина<sup>3</sup>, Л.А. Трусов<sup>1</sup>,  
П.Е. Казин<sup>1</sup>, Ан.А. Елисеев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

<sup>2</sup>Лаборатория функциональных квантовых материалов НИТУ МИСИС, Москва, Россия

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия

538.955, 538.958

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. В последнее время значительно возрос интерес к наночастицам гексаферрита, что вызвано несколькими уникальными свойствами: анизотропная пластинчатая форма и значительный остаточный магнитный момент вдоль оси *c*. Подобный набор свойств обеспечивает ряд перспективных применений материала: устройства записи высокой плотности, наноструктуры и композиты, использование в медицинских целях.

Синтез коллоидных растворов осуществлялся в соответствии с ранее разработанной методикой растворения боратной стеклокерамики [1]. В более ранних работах было показано наличие зависимости динамики частиц дисперсной фазы от вязкости растворителя [2] и возможность управления как ориентацией, так и структурированием феррожидкости [3]. Данные факторы позволяют перейти от фундаментальных исследований к адаптации данных свойств для технологических применений.

Наличие магнитооптического отклика системы, оптимизированного за счет вариации условий синтеза в ходе работы [4], позволило исследовать возможность использования наночастиц гексаферрита в качестве сенсоров вязкости растворителя с высокой скоростью отклика и локальностью. Было обнаружено, что величина тангенса фазового сдвига магнитооптического отклика линейно коррелирует с вязкостью растворителя (были протестированы полярные растворители в интервале вязкостей 0.6-1000 мПа\*с) в широком диапазоне частот и напряженностей переменного магнитного поля. Использование лазерного источника излучения в сочетании с конфокальной микроскопией позволило достичь латерального пространственного разрешения 4 мкм. Для демонстрации высокой разрешающей способности было проведено картирование процесса смешения потоков двух жидкостей (воды и этиленгликоля, содержащих наночастицы гексаферрита в качестве зонда) в т-образном микроканале (ширина 180 мкм, толщина 100 мкм). За счет высокой скорости отклика системы (при вязкости 1000 мПа\*с время регистрации не превышает 10 с) оказывается возможным и *in-situ* измерение вязкости. Последнее было продемонстрировано при помощи получения данных об изменении вязкости смеси вода-глицерин с понижением температуры последней в режиме реального времени. Кроме того, за счет анизотропной формы частиц при высоких концентрациях оказывается возможным изменение проводимости раствора при воздействии магнитного поля ( $\Delta R/R \sim 3\%$  в поле 100 Э) и применение наночастиц в качестве активных миксеров для усиления массопереноса.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 23-73-10045.*

1. Trusov L.A. et al. Stable colloidal solutions of strontium hexaferrite hard magnetic nanoparticles // Chem. Commun. United Kingdom: United Kingdom, 2014. Vol. 50, № 93. P. 14581–14584.
2. Eliseev A.A. et al. Rotational dynamics of colloidal hexaferrite nanoplates // Appl. Phys. Lett. 2018. Vol. 113, № 11. P. 113106.
3. Eliseev A.A. et al. Tunable order in colloids of hard magnetic hexaferrite nanoplatelets // Nano Res. 2022. Vol. 15, № 2. P. 898–906.
4. Chen J. et al. Hard magnetic colloidal nanoplates with tunable size for magneto-optical applications // J. Mater. Chem. C. The Royal Society of Chemistry, 2024.

**Исследование структурной организации хроматина в  
рудиментарном ядре куриного эритроцита с помощью методов  
малоуглового рассеяния**

***М.А. Елфимов<sup>1,2</sup>, С. В. Григорьев<sup>2</sup>, Е.Ю. Варфоломеева<sup>2</sup>, Р.А. Пантина<sup>2</sup>, Р. А. Ковалев<sup>2</sup>, Н. Д. Федорова<sup>2</sup>, Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>*СПбГУ(Санкт-Петербургский государственный университет)*

<sup>2</sup>*Петербургский институт ядерной физики имени Б. П. Константинова НИЦ Курчатовский институт, Санкт-Петербург*

УДК: 539, 538.9

Ранее по результатам исследований с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения была разработана модель пространственной организации хроматина в ядре биологической клетки [1]. Согласно этой модели, внутри плотнозапакованного транскрипционно неактивного хроматина существует система транспортных каналов, сформированная по принципу логарифмического фрактала [1], которая необходима для метаболизма и инфраструктуры внутри ядра. За последние двадцать лет были проведены многочисленные эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов на ядрах куриных эритроцитов [2-4]. В данной работе представлен новый взгляд на анализ экспериментальных данных малоуглового рассеяния нейтронов и ультра малоуглового рассеяния нейтронов на ядрах куриных эритроцитов, который позволил разработать модель пространственной организации хроматина в рудиментарном ядре. Были произведены измерения интенсивности малоуглового рассеяния на ядрах куриных эритроцитов помещенных в разные растворы тяжелой и легкой воды. В тяжелой воде были получены следующие данные: 1)  $R_g$  (радиус гирации) =  $(11400 \pm 300) \text{ \AA}$  в области переданных импульсов  $[1.5 \cdot 10^{-5} - 3 \cdot 10^{-5}] \text{ нм}^{-1}$ ; 2)  $n$  (показатель степени, отражающий фрактальные свойства) =  $(2.94 \pm 0.02)$  в области переданных импульсов  $[3 \cdot 10^{-5} - 9 \cdot 10^{-5}] \text{ нм}^{-1}$ ; 3)  $n = (2.38 \pm 0.01)$  в области переданных импульсов  $[9 \cdot 10^{-5} - 4 \cdot 10^{-3}] \text{ нм}^{-1}$ . В смеси тяжелой и легкой воды, в соотношении 40% и 60% соответственно: 1)  $R_g = (12000 \pm 200) \text{ \AA}$  в области переданных импульсов  $[10^{-5} - 4 \cdot 10^{-5}] \text{ нм}^{-1}$ ; 2)  $R_g = (2670 \pm 40) \text{ \AA}$  в области переданных импульсов  $[4 \cdot 10^{-5} - 2 \cdot 10^{-4}] \text{ нм}^{-1}$ ; 3)  $n = (2.33 \pm 0.01)$ ,  $c$  (корреляционная длина рассеяния) =  $(450 \pm 30) \text{ \AA}$  в области переданных импульсов  $[2 \cdot 10^{-4} - 1.5 \cdot 10^{-2}] \text{ нм}^{-1}$ . В смеси тяжелой и легкой воды, в соотношении 60% и 40% соответственно:  $n = (2.33 \pm 0.01)$ ,  $c = (6000 \pm 1000) \text{ \AA}$  в области переданных импульсов  $[1.5 \cdot 10^{-5} - 8 \cdot 10^{-3}] \text{ нм}^{-1}$ . Авторы выражают благодарность нейтронному центру MLZ (Германия, Гархинг) за предоставление пучкового времени на установках KWS-2 и KWS-3, и А. Радulesку и В. Пипича за помощь в проведении экспериментов.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-72-20011).*

1. Iashina E.G., Velichko E. V., Filatov M. V., Bouwman W. G., Duif C. P., Brulet A., Grigoriev S. V. // Physical Review 2017. E 96. 1. P. 012411.
2. Lebedev D.V., Filatov M.V., Kuklin A.I., Islamov A.Kh., Kentzinger E., Pantina R., Toperverg B.P., Isaev-Ivanov V.V. // FEBS Lett. 2005. V. 579, P. 1465.
3. Grigoriev S.V., Iashina E.G., Bairamukov V.Yu., Pipich V., Radulescu A., Filatov M.V., Pantina R.A., Varfolomeeva E.Yu. // Physical Review 2020. E 102.P. 032415.
4. Яшина Е.Г., Варфоломеева Е.Ю., Пантина Р.А., Байрамуков В.Ю., Ковалев Р.А., Федорова Н.Д., Пшеничный К.А., Горшкова Ю.Е., Григорьев С.В. // Письма в ЖЭТФ. 2023ю Т. 118. № 10. с. 776–781.

## Рентгеновское исследование процесса фазообразования в алюминиевом сплаве Al-Li, состаренном в постоянном и импульсном магнитных полях

*М.А. Еремеева, Ю.В. Осинская, С.Г. Магамедова*

*Самарский национальный исследовательский университет  
им. акад. С.П. Королева, Самара*

УДК: 621.785.78:537.636

Старение как явление фазового перехода первого рода в твёрдом состоянии давно привлекает внимание теоретиков и экспериментаторов. С одной стороны, это объясняется разнообразием протекающих при этом физических процессов, с другой – возможностью получения конструкционных металлических сплавов с контролируемыми физико-механическими свойствами, необходимыми в конкретной отрасли промышленности.

Имеются данные [1-3], которые показывают, что наложение на старение постоянного и импульсного магнитных полей (МП) может оказывать существенное влияние на структуру и свойства медно-бериллиевых и алюминиевых сплавов.

В данной работе проводилось экспериментальное исследование влияния постоянного МП напряженностью 557.2 кА/м и импульсного МП амплитудой напряженности 557.2 кА/м и частотой импульсов 2 Гц на процесс фазообразования в алюминиевом сплаве Al-Li, состаренном при температуре старения 120 °С длительностью от 2 до 8 ч методом рентгенофазового анализа. Предварительно сплав подвергали закалке: образцы одновременно выдерживали в печи в атмосфере воздуха при температуре 500 °С в течение 1 ч, затем охлаждали, быстро погружая в воду температурой 20 °С.

В результате было обнаружено, что старение алюминиевого сплава Al-Li без наложения МП приводит уширению дифракционных линий на  $0,053^\circ$ , соответствующих  $\alpha$ -твёрдому раствору на основе алюминия, и увеличению их интенсивности в 7 раз, что свидетельствует об искаженности кристаллической решетки, связанной с процессами старения и соответствующей перестройкой тонкой структуры сплава. В свою очередь, наложение постоянного и импульсного МП приводит к увеличению интенсивности дифракционных линий, соответствующих  $\alpha$ -твёрдому раствору на основе алюминия, до 2 раз, а их полуширина практически всегда уменьшается до  $0,27^\circ$  по сравнению с дифракционными линиями образцов, состаренных без поля. Данный факт свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры сплава.

1. Осинская Ю.В., Воронин С.В., Макеев С.Р., И.И. Левин. Влияние постоянного магнитного поля на параметры магнитоупругого эффекта в алюминиевом сплаве В95пч // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2024. № 2. С. 60-67.
2. Осинская Ю.В., Магамедова С.Г., Покоев А.В. Влияние амплитуды напряженности импульсного магнитного поля на параметры магнитоупругого эффекта в состаренном алюминиевом сплаве Al-Si-Cu-Fe // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2024. № 1. С. 17-22.
3. Осинская Ю.В., Магамедова С.Г., Макеев С.Р. Влияние постоянного магнитного поля на плотность стареющего сплава бериллиевой бронзы БрБ-2 // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2024. № 6. С. 50-55.

## Структура и фазовые переходы сплава Fe<sub>73</sub>Ga<sub>27</sub>: сравнительный анализ синхротронной и нейтронной дифракции

Б. Ержанов<sup>1,2</sup>, А.М. Балагуров<sup>1</sup>, И.С. Головин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Казанский федеральный университет, Казань

<sup>3</sup>Университет науки и технологий МИСИС, Москва

УДК: 538.911

Сплавы на основе железа обладают многочисленными полезными функциональными свойствами, которые давно и широко используются в различных технологиях. Одним из них является «гигантская» магнитострикция, открытая в начале 2000-х годов в сплавах Fe-Ga с двумя максимумами магнитострикции в зависимости от содержания в них Ga, активно изучаемая в течение последних двух десятилетий [1]. Физические и технические свойства этих функциональных материалов во многом зависят от их специфической атомной структуры, объемного содержания различных структурных фаз и их микроструктурного состояния [2]. Несмотря на многочисленные исследования, механизм формирования повышенной магнитострикции в сплавах Fe-Ga и его связь с атомным упорядочением до сих пор остается предметом дискуссий.

Нейтронные дифракционные эксперименты со сплавом Fe<sub>73</sub>Ga<sub>27</sub> выполнены на установке ФДВР (ОИЯИ, ИБР-2, Дубна) в двух режимах: с высоким разрешением по межплоскостному расстоянию и с высокой светосилой в ходе непрерывного сканирования по температуре при нагреве до ~950 °С с шагом 2 °С/мин. Синхротронные данные получены на установке BM01 (ESRF, Гренобль) в режиме высокого разрешения при непрерывном сканировании по температуре при нагреве до ~950 °С и последующем охлаждении с шагом ±60 °С/мин.

Исследованы процессы эволюции структурных фаз в порошкообразных сплавах Fe<sub>73</sub>Ga<sub>27</sub> методами нейтронной и синхротронной дифракции при нагреве и охлаждении *in situ* [3]. При сравнении результатов анализа с качественной точки зрения экспериментальные структурные данные, полученные для этого состава, в первом приближении оказались схожими. Их различия относятся, прежде всего, к температурам фазовых переходов и небольшим изменениям в последовательности этих переходов. Так установлено, что из-за отличия в скорости изменения температуры, в синхротронном эксперименте, температура фазовых переходов сместилась на 120 °С. В этих же экспериментах установлено образование B2 структуры в процессе нагрева, уже после того, как сверхструктурная фаза D0<sub>3</sub> перешла в неупорядоченную A2, чего в эксперименте с нейтронной дифракцией не наблюдалось. Также в эксперименте с дифракцией синхротронного излучения были обнаружены дифракционные пики, относящиеся к оксидам Fe и Ga, к которым чувствителен данный метод.

*Работа выполнена в рамках проекта № 19-72-20080 РНФ.*

1. Summers E.M., Lograsso T.A., Wun-Fogle M. Magnetostriction of binary and ternary Fe–Ga alloys // J. Materials Science. 2007. V. 42. P. 9582–9594.
2. Головин И.С. и др. Структура и свойства Fe-Ga сплавов - перспективных материалов для электроники // Физика металлов и металловедение. 2020. Т. 121. С. 937–980.
3. Balagurov A.M. et al. Comparative study of structural phase transitions in bulk and powdered Fe–27Ga alloy by real-time neutron thermodiffraction // J. Applied Crystallography. 2017. V. 50. P. 198–210.

## Влияние материала электрода и режима переключения полем на усталостные характеристики плёнок на основе цирконата-титаната свинца

*Н. С. Жукова, М. А. Князева, Р.Г.Бурковский, П. Ю. Ванина, А. Ф. Вакуленко*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург*

УДК: 537.9, 538.9

Сегнетоэлектрические (СЭ) материалы, особенно тонкопленочные конденсаторы, вызывают значительный интерес благодаря их потенциалу в области хранения данных.. Элементы памяти (FeRAM) на основе СЭ позволяют создавать энергонезависимую память, обладающую рядом преимуществ перед другими технологиями [1]. Но существует проблема, касающаяся коммерциализации этих устройств – поляризационная усталость, снижение величины устойчивой поляризации при её частом переключении. Было обнаружено, что усталостная поляризация зависит от ряда факторов [2, 3].

В данной работе рассматривалось влияние материала электрода и режима переключений полем на поляризационную усталость образца тонкой эпитаксиальной пленки на основе цирконата-титаната свинца (PZT) с 70% титана толщиной 60 нм на подложке титаната стронция. На пленку наносились золотые (Au) и никелевые (Ni) электроды.

В первом эксперименте изучалось влияние режима переключения полем. На золотые электроды пленки подавалась итерационная последовательность из 50 переключений, каждое из которых состояло из двух пар треугольных импульсов ( $\pm 8$  В, 0.02 с) с двухминутными паузами между группами переключений. Обнаружено, что полярность завершающего импульса задаёт тренд на поляризацию, которая постепенно устанавливается в СЭ во время паузы между измерениями. При возобновлении измерений потребуется поле большей величины для изменения поляризации на противоположную. Таким образом, за счёт управления полярностью переключающих импульсов можно направленно влиять на характер восстановления поляризации после акта измерений.

Во втором эксперименте изучалось влияние материала электрода на форму петли гистерезиса при многократном приложении импульсов (50 Гц,  $\pm 8$  В). Установлено, что натяжение материала электрода существенно влияет на усталостные характеристики. В данном случае контактные явления не учитывались, т.к. между электродами и пленкой была нанесена хромовая прослойка, выполняющая роль буфера для улучшения адгезии. Было выявлено, что в случае никелевых электродов петля СЭ гистерезиса сдвигалась вправо: положительная компонента коэрцитивного поля  $E_c$  увеличивалась, а отрицательная уменьшалась. Для золотых электродов обе компоненты  $E_c$  росли равномерно и петля симметрично «растягивалась». Такие различия обусловлены тем, что Ni создает большее механическое напряжение на пленке, чем Au, что влияет на доменную структуру и на величину коэрцитивных полей. Кроме того, на никелевых электродах наблюдалось снижение остаточной поляризации с увеличением числа импульсов. Это связано с тем, что с увеличением  $E_c$  затрудняется переключение доменов, а механическое напряжение дополнительно усугубляет этот процесс. Эксперимент показывает возможность управления переключением поляризации через механические напряжения, создаваемые материалом электрода, что перспективно для использования таких эффектов на практике, например, для управления характеристиками СЭ устройств.

*Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 24-22-00453).*

1. Scott J. F. Applications of modern ferroelectrics // Science. 2007. Т. 315. №. 5814. С. 954-959.
2. Tagantsev A. K. et al. Polarization fatigue in ferroelectric films: Basic experimental findings, phenomenological scenarios, and microscopic features // Journal of Applied Physics. 2001. Т. 90. №. 3. С. 1387-1402.
3. Do M. T. et al. Interfacial dielectric layer as an origin of polarization fatigue in ferroelectric capacitors // Scientific reports. 2020. Т. 10. №. 1. С. 7310.

## Межподзонное магнитооптическое поглощение в сверхрешетках квантовых точек

*С.А. Залова<sup>2</sup>, Б.Г. Ибрагимов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Французско-Азербайджанский Университет, Баку*

<sup>2</sup>*Институт Физики Министерство науки и образования Азербайджанской Республики, Баку*  
УДК: 621.315.592, 538.9

Около 30 лет назад были найдены и сейчас активно развиваются методы выращивания больших упорядоченных массивов квантовых точек. В отсутствие электрического поля спектр электронов и дырок в сверхрешетке (СР) представляет собой набор минизон, образующихся в дополнительном периодическом потенциале СР, модулирующем дно зоны проводимости и верх валентной зоны материала, в котором выращена СР [1].

Наноструктуры, такие как множественные массивы квантовых точек, в последнее время привлекают значительное внимание благодаря своим необычным физическим свойствам и предлагаемым применениям в фотоэлектрических солнечных элементах, фотодетекторах, термоэлектрических элементах. Сверхрешетки квантовых точек привлекают внимание исследователей также благодаря своим необычным оптическим и оптоэлектронным свойствам, которые могут быть использованы для разработки новых оптоэлектронных устройств.

В работе [2] исследовалось поглощение электромагнитного излучения свободным электронным газом, взаимодействующим с колебаниями решетки в сверхрешетке квантовых точек.

В данной работе мы исследуем межподзонное оптическое поглощение низкоразмерных электронных систем в сверхрешетках квантовых точек в магнитных полях. Коэффициент магнито оптического поглощения между подзонами задается как в работе [3].

Межподзонное оптическое поглощение низкоразмерных электронных систем в сверхрешетках квантовых точек в магнитных полях, рассчитанное как функция магнитного поля, показало, что коэффициент поглощения осциллирует с резкими скачками.

1. Келдыш Л.В. О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла // Физика твердого тела. 1962. Т. 4. С. 2265-2267.
2. Ibragimov G.B., et.al. Intraband absorption of electromagnetic radiation by electrons with optical phonon participation in quantum dot superlattices Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies // RENSIT . 2024. Vol. 16. No. 2, p. 249-254.
3. Ibragimov G.B. Intersubband optical absorption in parabolic quantum wires under a tilted magnetic field // Physica status solidi b. 2004. 241 (8). P.1923-1927.

## Эволюция фазового состава сплава $\text{Fe}_{77}\text{Ga}_{11.5}\text{Ge}_{11.5}$ в ходе температурного сканирования

А.С. Захарова<sup>1</sup>, Т. Н. Вершинина<sup>1</sup>, С. В. Сумников<sup>1</sup>, А. М. Балагуров<sup>1</sup>, И. С. Головин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

УДК: 538.911

Известно, что магнитострикционные свойства  $\alpha$ -Fe могут быть изменены при частичном замещении железа такими элементами, как алюминий, германий, кремний или галлий [1]. Особенно заметное увеличение константы магнитострикции наблюдается в сплавах Fe-Ga и Fe-Al (см., напр. [2]). В литературе широко представлена информация о фазовых и структурных состояниях, формирующихся в двойных сплавах железа, тогда как исследования тройных сплавов пока почти не проводились (см., напр. [3]).

В настоящей работе проведено исследование эволюции фазового состава сплава  $\text{Fe}_{77}\text{Ga}_{11.5}\text{Ge}_{11.5}$ , подвергнувшегося непрерывному нагреву до  $1000^\circ\text{C}$  и последующему охлаждению со скоростями  $\pm 2^\circ\text{C}/\text{мин}$ . Измерения были выполнены методом дифракции нейтронов на дифрактометре общего назначения GPPD, действующем на импульсном источнике типа spallation CSNS (Китай). Благодаря реализованной на установке детекторной системе, позволяющей регистрировать нейтронограммы на нескольких углах рассеяния ( $2\theta = 150^\circ, 90^\circ, 30^\circ$ ), анализ дифракционных спектров проводился в широком диапазоне  $d_{\text{hkl}}$ .

В исходном литом состоянии сплав  $\text{Fe}_{77}\text{Ga}_{11.5}\text{Ge}_{11.5}$  содержит две структурные фазы  $D0_3$  и  $D0_{19}$ , с предположительным составом  $\text{Fe}_3(\text{Ga}, \text{Ge})$ . С ростом температуры наблюдается уменьшение интегральной интенсивности рефлексов обеих фаз, причём интегральная интенсивность сверхструктурных пиков изменяется быстрее, чем основных. При нагреве наблюдается исчезновение сверхструктурных пиков (111), (311) и др., относящихся к фазе  $D0_3$ , т.е. происходит переход  $D0_3 \rightarrow B2$ , сопровождающийся скачкообразным ростом параметра элементарной ячейки. При достижении  $950^\circ\text{C}$  наблюдается полное исчезновение рефлексов фазы  $D0_{19}$ , что свидетельствует о том, что образец переходит в однофазное  $B2$  состояние, которое сохранялось до конца этапа нагрева.

При охлаждении сверхструктурный пик (111) фазы  $D0_3$  появляется при необычно высокой температуре ( $T \approx 900^\circ\text{C}$ ), что соответствует обратному переходу  $B2 \rightarrow D0_3$ . При  $T \approx 870^\circ\text{C}$  появляется основной рефлекс (200) фазы  $D0_{19}$ , малоинтенсивные сверхструктурные пики (110), (101) этой фазы становятся хорошо различимы при температуре  $850^\circ\text{C}$ . При дальнейшем охлаждении до  $150^\circ\text{C}$  двухфазное состояние  $D0_3 + D0_{19}$  сохраняется, но изменения интегральных интенсивностей пиков свидетельствуют о росте объёмной доли  $D0_3$  по сравнению с исходным литым состоянием.

Сравнение этих результатов с полученными ранее данными для  $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$  ( $\text{Fe}_3\text{Ge}$ ) [4] показало их существенное различие как в исходном фазовом составе, так и в происходящих фазовых трансформациях.

Авторы выражают благодарность сотрудникам CSNS Дж. Хао, Х. Лю, Л. Хе за проведение измерений.

*Работа выполнена в рамках проекта № 19-72-20080 РФФ.*

1. Restorff J.B. et.al. Tetragonal magnetostriction and magnetoelastic coupling in Fe-Al, Fe-Ga, Fe-Ge, Fe-Si, Fe-Ga-Al, and Fe-Ga-Ge alloys // Journal of Applied Physics. 2012. V. 111 (2). P. 023905.
2. Summers E.M. et.al. Magnetostriction of binary and ternary Fe-Ga alloys // Journal of Materials Science. 2007. V. 42. P. 9582–9594.
3. Балагуров А.М. и др. Структурные и фазовые переходы в Fe-Ga-Al сплавах // ФТТ 2022 В. 12 С. 1873.
4. Balagurov A.M. et.al. Structural and magnetic phase transitions in  $\text{Fe}_3\text{Ge}$ : A neutron diffraction study // Physical Review Materials. 2023. T. 7. №. 6. С. 063603.

## Поглощение свободных носителей в полупараболической квантовой яме при рассеянии фононов

***Б.Г. Ибрагимов<sup>1</sup>, З.С. Агаев<sup>2</sup>***

*<sup>1</sup>Французско-Азербайджанский Университет, Баку*

*<sup>2</sup>Институт Физики Министерство науки и образования Азербайджанской Республики, Баку*  
УДК: 621.315.592, 538.9

Оптические свойства в низкоразмерных полупроводниковых структурах интенсивно изучались в последние десятилетия из-за их новых физических характеристик и возможности применения в электронных и оптоэлектронных устройствах. Это привело к быстрому развитию соответствующих технологий и увеличению числа экспериментальных и теоретических исследований таких структур [1].

Молекулярно-лучевая эпитаксия и связанные с ней методы осаждения предложили беспрецедентный контроль над ростом структур с квантовыми ямами в соответствии с заданными спецификациями. Одной из основных проблем в моделировании квантовых ям является подходящее представление профиля потенциала квантовой ямы. Обычно считается, что структуры на основе квантовых ям с нарушением инверсионной симметрии отличаются уникальными нелинейными оптическими и электрическими свойствами.

В настоящей работе теоретически исследуются некоторые оптические свойства, связанные с межподзонами переходами в асимметричных квантовых ямах полупараболического типа.

Поглощение света свободными носителями с участием фононов вычисляется во втором порядке теории возмущений. Формула оптического коэффициента поглощения вычисляется через вероятность перехода с использованием теории возмущения. При включении электрон-фононного взаимодействия оптический коэффициент поглощения в двумерных системах задается как в [2]. Различия между результатами параболического потенциала и для случая электрона, заключенного в асимметричной квантовой яме наноструктуры также представлены.

1. Darwish A.A.A., et.al. Linear and nonlinear optical properties of  $\text{GeSe}_{2-x}\text{Sn}_x$  ( $0 \leq x \leq 0.8$ ) thin films for optoelectronic applications // Journal of Alloys and Compounds Volume 709, 30 June 2017, P. 640-645.
2. İbragimov G.B. Free-carrier magnetoabsorption in quantum well wires // J. Phys.:Condens. Matter 2003. V. 15, P.8949.

## Структурные особенности кристалла $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$

*С.И. Ибрагимова, С.Х. Джабаров, Г.М. Агамирзаева, Л.В. Рустамова*

*Министерство Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку*

УДК: 3937, 538.9

Кристаллическая структура и различные физические свойства медных и серебросодержащих халькогенидных полупроводников уже давно изучаются различными методами. В халькогенидных полупроводниках велик эффект катион-катионных замещений, потому что при замещениях происходят важные изменения как в электронной, так и в кристаллической структурах. В это время у халькогенидов появляются интересные оптические, электрические и термические свойства. Поэтому в этом направлении проводятся обширные исследования [1-4]. В данной работе синтезировано новое соединение  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  с замещениями  $\text{Cu} \rightarrow \text{In}$ . Строение и атомная динамика полученного соединения изучены аналитическими методами. Необходимый для исследования поликристаллический образец соединения  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  был синтезирован стандартным методом, типичным для халькогенидных полупроводников.

Дифракционную картину, полученную для соединения  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  в интервале углов  $10^\circ \leq 2\theta \leq 90^\circ$ , анализировали методом Ритвельда в программе Mag2Pol. В результате анализа установлено, что кристаллическая структура этого соединения соответствует тетрагональной сингонии с пространственной группой  $P-42c(112)$ . Значения параметров решетки:  $a=b=5,7624 \text{ \AA}$ ,  $c=11,5432 \text{ \AA}$ ,  $V=382,870 \text{ \AA}^3$ ,  $\rho=4,9697 \text{ г/см}^3$ ,  $Z=2$ . В результате анализа спектра установлено, что кристаллическая структура соединения  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  состоит из атомов Cu, стоящих в узлах решетки, In, распределенного по объему решетки, и атомов Se, образующих тетраэдры, соединяясь с ними. В соединении  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  атомы меди расположены в одной кристаллографической позиции и находятся в двухвалентном состоянии.

Интересная атомная динамика наблюдается в кристаллах с полиэдрической структурой. Атомную динамику соединения  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  изучали методом рамановской спектроскопии. В кристалле  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  наблюдаются 3 основных режима колебаний. Эти моды колебаний были интерпретированы с помощью функции Гаусса. Установлено, что этим модам колебаний соответствуют частоты:  $\nu_1=146 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_2=171 \text{ см}^{-1}$  и  $\nu_3=229 \text{ см}^{-1}$ . Известно, что в диапазоне частот  $\nu=0-100 \text{ см}^{-1}$  наблюдаются колебания связей, образованных тяжелыми элементами. На более высоких частотах наблюдаются колебания связей, образованных атомами легких элементов, таких как H, C, O. Основная причина, по которой такие колебания не наблюдаются в спектре КР, полученном для кристалла  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$ , заключается видимо в том, что полученный образец был однородным по составу, с высокой степенью чистоты. Следовательно, полученные моды колебаний соответствуют только частотам связей, образуемых химическими элементами, входящими в состав. Установлено, что эти моды соответствуют связям In-Se и колебаниям октаэдров  $\text{InSe}_4$ , образованных этими связями. Из спектра комбинационного рассеяния света видно, что моды колебаний не наблюдаются на частотах  $\nu > 250 \text{ см}^{-1}$ . Режимы колебаний, возникающие на более высоких частотах, наблюдаются в основном в связях, образованных атомами легких элементов, таких как H, C, O. Известно, что в соединении  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  нет атомов легких элементов. Однако в реальных кристаллах за счет контакта с молекулами воды и углекислого газа воздуха возможно создание связей под воздействием атомов легких элементов.

1. Agamirzayeva G.M. et al. Crystal structure and magnetic properties of the compound  $\text{Cu}_3\text{Fe}_{0.5}\text{Se}_2$  // *Advanced Physical Research*. 2023. V. 5. № 1. P. 19-25.
2. Jabarov S.H. et al. Structural, vibrational, and dielectric properties of  $\text{CuInZnSe}_3$  chalcogenide compound // *Arabian Journal for Science and Engineering*. 2022. V. 47. №. 6. P.7817-7823.
3. Aliyev Y.I. et al. Influence of partial substitution of Cu atoms by Zn and Cd atoms on polymorphic transformation in the  $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$  crystal // *Modern Physics Letters B*. 2019. V. 33. №. 11. P.1850128.
4. Guliyeva Kh.M. et al. Synthesis, structure and thermal properties of the  $\text{Cu}_2\text{NiSeTe}$  // *Integrated Ferroelectrics*. 2023. V. 237. P.67-72.

## Автоматизация DFT расчетов в программном пакете SIESTA

*И.И. Иванов<sup>1</sup>, Е.В. Аникина<sup>1</sup>*

*Южно-Уральский государственный университет, Челябинск*

УДК: 004.942-539.2

Численные эксперименты в рамках теории функционала электронной плотности для хорошей точности результатов требуют определения адекватных поставленной задаче приближений (например, обменно-корреляционного функционала или дисперсионных поправок) и оптимальных параметров моделирования. Базисный набор, в котором будет представляться волновая функция системы, играет ключевую роль среди этих параметров. Атомноподобные базисы позволяют достаточно быстро получить результаты, но за такую быстроту приходится расплачиваться подготовительными расчетами, которые могут быть хотя и вычислительно не затратными, но многочисленными.

Для упрощения работы исследователя нами была создана программа для автоматизации подготовки и обработки файлов, используемых пакетом SIESTA [1] для расчетов электронных структур. Ручное создание и редактирование таких файлов занимает достаточное время и часто приводит к ошибкам. Программа значительно ускоряет этот процесс, позволяя исследователям сосредоточиться на анализе. Кроме того, она автоматизирует обработку данных, что упрощает визуализацию и интерпретацию результатов. Программа написана на языке Python, который был выбран благодаря своей простоте и гибкости.

Таким образом, разработанная программа позволяет автоматизировать рутинные процессы при проведении подготовительных расчетов для определения оптимальных параметров моделирования (как параметров базисного набора, так и, например, шага разбиения обратного пространства, параметра трансляции). Использование программы на данный момент было протестировано при исследовании процедуры оптимизации базисного набора на примере графена.

*Работа выполнена в рамках грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее».*

1. Soler J.M. et al. The SIESTA method for *ab initio* order-*N* materials simulation // J. Phys. Condens. Matter. 2002. V. 14. No. 11. P. 2745–2779.

## **Исследование поведения первого критического поля NbS<sub>2</sub> модуляционным методом с использованием катушек микронных размеров**

**Е.М. Иванова**

*Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва*

УДК: 538.945

Модуляционный метод измерения восприимчивости - один из самых распространённых методов исследования сверхпроводников [1]. Он является популярным, так как не требует слишком дорогостоящего оборудования, основан на простом физическом принципе, довольно прост в реализации. Точность измерений этого метода как правило определяется размерами принимающей катушки, степенью её заполнения и её близостью к образцу [2]. Из-за этого использование проволочных катушек не позволяет с достаточной точностью измерять восприимчивость сверхпроводящих образцов микронных размеров. Один из способов оптимизации данного метода измерения заключается в переходе к использованию плоских катушек, сравнимых по размерам с исследуемыми образцами.

Целью данной работы было создание техпроцесса создания такой катушки использование её в дальнейших измерениях магнитной восприимчивости сверхпроводников для определения их критических полей. В ходе работы использовались такие способы формирования микроструктур, как масочная прямая и обратная фотолитография, термическое и магнетронное напыление металлов и диэлектриков, жидкостное травление.

Был выбран оптимальный материал подложки, подобраны оптимальные рецепты прямой и обратной фотолитографии, термического испарения хрома и золота, магнетронного напыления оксида алюминия и его жидкостного травления. В итоге построен полный технологический процесс и создана желаемая структура с плоской катушкой на сапфировой подложке. Проведены измерения первого критического поля NbS<sub>2</sub> в температурном диапазоне от 2 К до критической температуры.

1. Topping C. V., Blundell S. J. AC susceptibility as a probe of low-frequency magnetic dynamics // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2018. V. 31. No. 1. P. 013001.
2. Jackson D. D. et al. Magnetic susceptibility measurements at high pressure using designer diamond anvils // *Review of scientific instruments*. 2003. V. 74. No. 4. P. 2467-2471.

## Особенности атомной структуры композита Cu-Nb-Ti под действием пакетной гидроэкструзии при P = 75 атм

Н.Н. Ивахненко<sup>1,3,5</sup>, З.А. Самойленко<sup>1</sup>, Е.И. Пушенко<sup>1</sup>, М.Ю. Бадекин<sup>2</sup>, В.Я. Сычева<sup>1</sup>,  
В.Г. Борулько<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», Донецк

<sup>3</sup>ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет - МСХА им. К.А. Тимирязева»,  
Москва

<sup>4</sup>Ордена Трудового Красного Знамени ФГБОУ ВО «Московский технический университет связи и  
информатики», Москва

<sup>5</sup>ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России, Москва

УДК: 538.9

Нанокompозиты на основе меди (Cu), ниобия (Nb) и титана (Ti) представляют собой перспективные материалы, которые находят широкое применение в различных областях науки и техники. Их уникальные свойства, такие как высокая прочность, устойчивость к радиационному воздействию, сверхпроводимость и биосовместимость, делают их востребованными в нанотехнологиях, атомной энергетике и медицине.

В нанотехнологиях материалы Cu-Nb-Ti используются для создания наноструктурированных композитов с улучшенными механическими и электрическими свойствами. В атомной энергетике они применяются в качестве конструкционных материалов для реакторов, благодаря их высокой радиационной стойкости и способности сохранять структурную целостность под воздействием интенсивных нагрузок. Интенсивная пластическая деформация (ИПД) является ключевым методом для модификации структуры и свойств таких материалов [1]. В результате ИПД происходит измельчение зерен, формирование наноразмерных структур и изменение фазового состава, что приводит к улучшению механических и функциональных характеристик материала. Структурные изменения в нанокompозите Cu-Nb-Ti после интенсивной пластической деформации при рабочем давлении 75 атмосфер были исследованы с помощью методов рентгеноструктурного анализа. На дифракционных картинах образцов Cu-Nb-Ti, наблюдаются значительные изменения в структуре материала. Эти изменения можно связать с формированием двух структурных групп в интервалах углов  $\Theta=(67-77)^\circ$  и  $\Theta=(27-45)^\circ$ . Кроме того в интервале углов  $\Theta=(67-77)^\circ$  наблюдается формирование группы плоскостей, центрированных вокруг семейства плоскостей (220) Cu. Это указывает на сохранение дальнего атомного порядка в этих плоскостях. Однако размытие оснований линий всей группы свидетельствует о наличии дефектов и напряжений в структуре[2,3].

Исследование показало, что интенсивная пластическая деформация приводит к формированию новой структуры нанокompозита Cu-Nb-Ti, характеризующейся: релаксированным состоянием атомного порядка, наличием мелкокристаллических и наноразмерных слоев с совершенным атомным порядком, формированием аморфизированных областей и дефектных структур, возможностью образования новой метастабильной наноразмерной фазы с пониженной симметрией. Полученные результаты позволяют рассматривать нанокompозит Cu-Nb-Ti как перспективный материал для применения в высокопрочных и сверхпроводящих устройствах.

1. Процессы самоорганизации структуры в композите Cu<sub>60</sub>Fe<sub>40</sub> при деформационно-термическом воздействии / З. А. Самойленко, Н. Н. Белоусов, Н. Н. Ивахненко [и др.] // Физика твердого тела. 2014. Т. 56, № 6. С. 1186-1190.

2. Self-Organization of Various-Scale Structural Groups in a Cu/NbTi Composite under the Effect of Hydrostatic Bundle Extrusion / Z. A. Samoilenko, N. N. Ivakhnenko, E. I. Pushenko [et al.] // Inorganic Materials. 2023. Vol. 59, No. 9. P. 932-939.

3. Разнообразие беспорядка и разномасштабного порядка при вариациях интенсивной деформации меди / З. А. Самойленко, Н. Н. Ивахненко, Е. И. Пушенко [и др.] // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, № 1. С. 82-90.

## Исследование внутреннего трения и модуля упругости в объёмных кристаллах бета-фазы оксида галлия

Д.А. Калганов<sup>1,2</sup>, А.Ю. Иванов<sup>1</sup>, Д.А. Бауман<sup>1</sup>, А.Е. Романов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

УДК: 539.67: 539.374: 534.23

На основе кристаллов бета фазы оксида галлия ( $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) разработаны прототипы новых устройств, таких как датчики ультрафиолета [1] и рентгеновского излучения, выпрямительные диоды Шоттки и МОП-транзисторы [2]. Уникальные свойства этого материала: большая ширина запрещённой зоны и напряжения пробоя, высокая температурная стабильность и радиационная стойкость ставят его в первый ряд полупроводников, перспективных для использования в экстремальных условиях различных сфер энергетики, космической промышленности и уникальных исследовательских установок. Актуальность исследований в этой области подчёркивает интерес международных корпораций и научных коллективов [1–4].

Создание подложек полупроводниковых устройств из  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> сопряжено с исследованиями различных структурных дефектов на микро- и наноуровнях образовавшихся в процессе синтеза и пост-ростовой обработки материалов и структур. Из-за низкой симметрии кристаллической структуры (моноклинной, пр. гр. симм. C12/m1), малой жесткости связи в направлении [100], выраженной анизотропии механических свойств и теплопроводности оптимизация процессов обработки на основе проволочной или лазерной резки и химико-механической полировки требует разработки новых методов оценки качества поверхности.

В данной работе исследованы дислокационные внутреннее трение и эффективный модуль упругости объёмных кристаллов  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, получены амплитудные и температурные зависимости характеризующие процессы взаимодействия дислокаций с точечными дефектами кристаллической структуры. Для различных кристаллических ориентаций величины модуля упругости возрастают в ряду  $E_{100} \approx 210$  ГПа,  $E_{001} \approx 245$  ГПа,  $E_{010} \approx 263$  ГПа. Амплитудные зависимости внутреннего трения показывают преимущественно струнный характер взаимодействия дислокаций с точечными дефектами, описывающийся моделью Келера-Гранато-Люкке.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-12-00229, <https://rscf.ru/project/24-12-00229/>.*

1. Wriedt N. et al. Enhanced UV–Vis Rejection Ratio in Metal/BaTiO<sub>3</sub>/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Solar-Blind Photodetectors // *Advanced Electronic Materials*. 2025. V. 11. No. 1. P. 2400552.
2. Tetzner K. et al. All-implanted lateral  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> MOSFET devices realized on semi-insulating (-201)  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrates // *Applied Physics Letters*. 2025. V. 126. No. 6.
3. Li Y.H. et al. Ga vacancies as dominant intrinsic acceptors in Sn-doped  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> revealed by positron annihilation spectroscopy // *Physical Review B*. 2024. V. 110. No. 17. P. 174106.
4. Rock N.D. et al. Utilizing (Al, Ga)<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> superlattices to measure cation vacancy diffusion and vacancy-concentration-dependent diffusion of Al, Sn, and Fe in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // *APL Materials*. 2024. V. 12. No. 8. P. 081101.

## Нейтронный дифракционный структурный анализ сплава Fe<sub>72</sub>Ga<sub>28</sub>

*К.В. Калугин<sup>1</sup>, А.М. Балагуров<sup>1,2</sup>, С.В. Сумников<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва

<sup>2</sup>Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 538.911

Интерес к сплавам Fe-Ga обусловлен их особыми магнитоэластичными свойствами, впервые описанными в начале 2000-х годов [1]. Эффект так называемой “гигантской” магнитоэластичности, наблюдаемый в этих сплавах, заключается в значительном увеличении константы магнитоэластичности, превышающей в ~20 раз аналогичный показатель для чистого Fe. Пока без ясного ответа остается вопрос о том, почему в Fe-Ga сплавах повышенные значения магнитоэластичности достигаются лишь при определенных концентрациях Ga (~19% и ~27%). Для ответа на него требуется дальнейшее изучение структурных особенностей этих сплавов.

В нейтронных дифракционных экспериментах, проведенных на ФДВР (ОИЯИ, ИБР-2, Дубна), были измерены спектры для двух составов Fe<sub>71.9</sub>Ga<sub>28.1</sub> и Fe<sub>71.1</sub>Ga<sub>28.9</sub> при их нагреве до 820°C и последующем охлаждении до КТ. Температура изменялась со скоростью ±2 °C/мин, для регистрации спектров использовался режим высокой светосилы (1 мин на полный спектр). До и после циклов нагрева-охлаждения дифракционные спектры были измерены в режиме высокого разрешения ( $\Delta d/d \approx 0.0015$ ).

По измеренным спектрам проведен структурный анализ сплавов и определена температурная эволюция их фазового состава. Получены данные по температурным зависимостям геометрических характеристик дифракционных пиков, атомным объемам отдельных структурных фаз и др. Одной из задач исследования был поиск тетрагональной фазы *L*<sub>60</sub>, описанной в работе [2]. Образование этой фазы рассматривается как одна из возможных причин резкого увеличения константы магнитоэластичности в сплавах Fe-Ga, однако по результатам нейтронного дифракционного эксперимента её следов обнаружить не удалось. Несмотря на малые различия исследуемых сплавов по концентрации Ga, эволюции их фазовых составов с изменением температуры отличаются заметно. Отличны они и от результатов нейтронного дифракционного эксперимента, проведенного с составом Fe<sub>73</sub>Ga<sub>27</sub> [3]. Особенно это заметно для температур переходов фазы *D*0<sub>3</sub> в неупорядоченное состояние при нагреве и образования фазы *D*0<sub>19</sub> в сплаве с меньшим содержанием Ga при охлаждении до КТ.

*Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-42-04404.*

1. Clark A.E. et al. Extraordinary magnetoelasticity and lattice softening in bcc Fe-Ga alloys // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. P. 8621-8623.
2. Lograsso T. A. et al. Structural transformation in quenched Fe-Ga alloys // J. Alloy. Comp. 2003. V. 350. P. 95-101.
3. Balagurov A.M. et al. Comparative study of structural phase transitions in bulk and powdered Fe-27Ga alloy by real-time neutron thermodiffraction // J. Applied Crystallography. 2017. V. 50. P. 198-210.

## Эпитаксиальное осаждение пленок $WSe_2$ на $Al_2O_3(0001)$ и $CaF_2(111)$ : влияние кристаллической структуры подложки и условий роста

Е.Ф. Канафиева<sup>1,2</sup>, Е.Ю. Лобанова<sup>1,3</sup>, Д.С. Кузин<sup>1</sup>, И.М. Мамаев<sup>1,2</sup>, В.Н. Загороднева<sup>1,4</sup>,  
С.М. Сутурин<sup>1</sup>, Н.С. Соколов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

<sup>3</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург

<sup>4</sup>ФГАОУ ВО «СПбПУ», Санкт-Петербург

УДК: 539.23, 538.9

Двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) представляют собой слоистые материалы, перспективные для применений в электронике и сенсорике, среди которых селенид вольфрама ( $WSe_2$ ) характеризуется высокой подвижностью носителей заряда p-типа [1]. В силу отсутствия внеплоскостных связей, ДПМ позволяют формировать высококачественные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры. Однако практическое применение ДПМ ограничено высоким содержанием дефектов и ловушек на границе раздела с аморфными диэлектриками. В связи с этим значительный интерес представляет использование кристаллических диэлектриков, таких как  $CaF_2(111)$  и  $Al_2O_3(0001)$ , обеспечивающих потенциал для создания высокопроизводительных и надежных электронных устройств. Данная работа посвящена исследованию процессов роста, морфологии и кристаллической структуры слоёв  $WSe_2$  на поверхности подложек  $Al_2O_3(0001)$  и  $CaF_2(111)$ .

Образцы  $WSe_2$  были выращены методом лазерной молекулярно-лучевой эпитаксии. Эксимерный KrF-лазер CompexPro 201 ( $\lambda \approx 248$  нм) применялся для абляции материала поликристаллической мишени  $WSe_2$ . Энергия лазерных импульсов варьировалась в диапазоне от 200 до 500 мДж. Рост осуществлялся при температуре подложки 500 °С. Для снижения кинетической энергии частиц, вылетающих из мишени, использовался буферный газ (аргон), давление которого изменялось от 0.025 до 0.2 мбар. Плотность энергии лазерных импульсов на мишени варьировалась от 1 до 4 Дж/см<sup>2</sup>. Предростовой отжиг подложек  $Al_2O_3(0001)$  проводился в муфельной печи при 1000 °С в течение 1 часа. Контроль кристаллической структуры выращиваемых пленок осуществлялся в реальном времени посредством регистрации и анализа картин дифракции быстрых электронов (ДБЭ). Для изучения морфологии пленок образцов использовалась атомно-силовая микроскопия (АСМ). Для измерения поверхностного сопротивления полупроводниковых пленок  $WSe_2$  использовался четырехзондовый метод.

Исследовалась зависимость морфологии тонких пленок, их кристаллического качества и сопротивления от условий в ростовой камере и выбора подложки. Было обнаружено, что большое влияние на ориентированный рост пленок  $WSe_2$  оказывает предварительный отжиг  $Al_2O_3(0001)$ . На неотожженных подложках  $Al_2O_3(0001)$  разворот кристаллической решетки пленки  $WSe_2$  относительно направления [100] подложки составил 30°, отжиг же способствовал развороту в 0°. Для гетероструктур  $WSe_2/CaF_2(111)$  и  $WSe_2/Al_2O_3(0001)$  были найдены оптимальные давления и значения плотностей энергии лазера на мишени. Осцилляции интенсивности рефлексов ДБЭ, наблюдаемые в процессе роста, указывали на реализацию послойного эпитаксиального роста пленки  $WSe_2$ . Анализ картин ДБЭ выращенных пленок показал их хорошее соответствие модельной кристаллической решетке, что свидетельствует о высоком качестве и кристалличности полученных структур. Проведенные исследования создали задел для создания высокоэффективных электронных устройств на основе  $WSe_2$ .

*Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта № 21-52-14007 АНФ\_а.*

1. Huang Z., Zhang W., Zhang W. Computational search for two-dimensional MX<sub>2</sub> semiconductors with possible high electron mobility at room temperature //Materials. 2016. Т. 9. №. 9. С. 716.

**Экспериментальная методика для исследования кинетики изменения магнитных и термодинамических параметров в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_{0,5}$**

**Д.А. Карпухин<sup>1</sup>, Е.В. Морозов<sup>1</sup>, В.В. Коледов<sup>1</sup>, В.Г. Шавров<sup>1</sup>, И.И. Мусабилов<sup>2</sup>,  
А.М. Алиев<sup>3</sup>, А.Г. Гамзатов<sup>3</sup>, Н.З. Абдулкадирова<sup>3</sup>, С.В. Таскаев<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*

<sup>2</sup>*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*

<sup>3</sup>*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала*

<sup>4</sup>*ФГБОУ ВО "Челябинский государственный университет", Челябинск*

УДК 538.9

На сегодняшний день большое количество работ посвящено изучению физических эффектов при фазовых переходах (ФП) в твердотельных материалах [1]. Среди огромного разнообразия твердотельных материалов с ФП можно выделить магнетики, в которых, магнитные ФП часто сочетаются и взаимодействуют со структурными ФП [1,2]. Изучение материалов в неустойчивом состоянии, вблизи ФП затруднено отсутствием стандартных методов изучения термодинамических параметров вещества в динамике, непосредственно в процессе ФП. Анализ современной литературы показывает, что кинетика процессов при ФП исследованы слабо [2,3]. Разработка новых методов изучения кинетики ФП открывает возможности для прикладного использования новых функциональных материалов с ФП [3,4].

В работе экспериментально, с применением оригинальной методики и теоретически с применением уравнения Ландау-Халатникова исследуется кинетика намагниченности при ФП в точке Кюри в чистом гадолинии и в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_{0,5}$  с магнитоструктурным ФП. Предварительные результаты позволяют сделать оценку для нахождения константы уравнения Ландау-Халатникова  $\gamma$ , показывающей минимальный предел для скорости изменения намагниченности при возбуждении импульсами магнитного поля до 200 кА/м в чистом гадолинии  $\gamma < 3 \cdot 10^3$  1/с.

Уравнения состояния вблизи ФП имеют аномалии, описывающие КЭ. Недавно, в работе [5] обнаружен эффект резкой зависимости магнитокалорического эффекта от частоты переменного сильного магнитного поля. Цель настоящей работы заключается в экспериментальном изучении зависимостей термодинамических параметров температуры и намагниченности для решения уравнений состояния и кинетики в магнитных полях порядка 1 Тл в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_{0,5}$ . Температура Кюри была измерена экспериментально и составила 286,5 К. Для исследования кинетики МКЭ использована методика, описанная в [11], для исследования кинетики намагниченности вблизи магнитного фазового перехода образца сплава  $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_{0,5}$  в импульсных полях была создана оригинальная установка.

Созданная установка позволяет применить метод определения точки Кюри в сплаве  $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_{0,5}$ . Разработан метод нахождения константы  $\gamma$  уравнения Ландау-Халатникова, показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода.

*Настоящая работа выполнена в рамках государственного задания ИРЭ имени В.А. Котельникова РАН.*

1. De Oliveira N. A., von Ranke P. J. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect // Physics Reports. 2010. Т. 489. №. 4-5. С. 89-159.
2. Basso V. et al. Hysteresis and phase transition kinetics in magnetocaloric materials // Physica status solidi (b). 2018. Т. 255. №. 2. С. 1700278.
3. Franco V. et al. Magnetocaloric effect: From materials research to refrigeration devices // Progress in Materials Science. 2018. Т. 93. С. 112-232.
4. Reis M. S. Magnetocaloric and barocaloric effects of metal complexes for solid state cooling: Review, trends and perspectives // Coordination Chemistry Reviews. 2020. Т. 417. С. 213357.
5. Aliev A. M. et al. // J. Al. Com. 2016. V. 676, P.601–605.

## Исследование электронного строения ионно-лучевых пленок $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$ методами РФЭС и УМРЭС

Е.С. Керсновский<sup>1</sup>, И.В. Польшин<sup>1</sup>, С.А. Ивков<sup>1</sup>, А.И. Чукавин<sup>1,2</sup>, Н.С. Буйлов<sup>1</sup>,  
А.В. Ситников<sup>3</sup>, К.А. Барков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж

<sup>2</sup>УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

<sup>3</sup>Воронежский государственный технический университет, Воронеж

УДК: 538.9

Система Cu-Si имеет широкий спектр применений [1]. В последнее время структуры на основе меди и кремния рассматриваются как перспективные материалы анодов нового типа литий-ионных аккумуляторов [2]. В ряде работ сообщалось, что медь, осаждаемая на кремниевую подложку, способствует интенсивному росту оксидного слоя на границе раздела Cu-Si [3]. Кроме того, ряд фаз в системе Cu-Si до сих пор в значительной степени не изучен, а закономерности фазообразования изменяются в зависимости от соотношения элементов и способа получения композитных пленок. Поэтому исследование электронного строения пленок  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$ , полученных ионно-лучевым распылением является важной задачей.

В настоящей работе нанокompозитные пленки  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$  были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени в вакууме при давлении  $1 \cdot 10^{-5}$  торг на подложки кремния Si(111) марки КДБ-12. Рентгенофазовый анализ проводился на дифрактометре ДРОН-4-07  $\text{CuK}\alpha_{1,2}$  ( $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$ ). Исследование элементного состава проводилось на РЭМ JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250. Исследование электронного строения пленок Cu-Si проводилось методами ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на рентгеновском спектрометре монохроматоре РСМ-500 [4] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на спектрометре SPECS с использованием  $\text{MgK}\alpha$  (1253.64 eV) источника рентгеновского излучения.

По результатам рентгендифрактометрических исследований в пленках  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$  формируется фаза  $\eta\text{-Cu}_3\text{Si}$ . Кроме того, в пленках богатых медью >51 вес.% часть меди окисляется формируя оксид  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Наличие в пленках  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$  диоксида  $\text{Cu}_2\text{O}$  подтверждается РФЭС Cu  $2p$  спектрами. Кроме того, по данным РФЭС в Si  $2p$  спектрах видно, что часть атомов кремния находится в окисленном состоянии со степенью окисления  $\text{Si}^{1+}$  и  $\text{Si}^{4+}$  что соответствует кремний-кислородным тетраэдрам типа Si-Si<sub>3</sub>O и Si-O<sub>4</sub> соответственно. Сильное окисление кремния может быть связано с каталитическими свойствами фазы  $\text{Cu}_3\text{Si}$ .

Электронное строение валентной зоны пленок  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$  анализировалось по рентгеновским эмиссионным Si  $L_{2,3}$ -спектрам при глубине анализа 60 нм. Плотность электронных  $3s$  состояний в валентной зоне кремния в пленках, с низким содержанием меди схожа с электронным строением валентной зоны  $a\text{-Si}$ , что свидетельствует о высоком содержании данной фазы в пленке. Однако, увеличение содержания меди приводит к росту O  $2p$  состояний в валентной зоне, связанных с наличием субоксидов кремния различной стехиометрии, что согласуется с данными РФЭС. Кроме того, в электронном строении пленок  $\text{Cu}_x\text{Si}_{1-x}$  наблюдаются характерные особенности фазы низшего силицида  $\text{Cu}_3\text{Si}$ .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Liu Y. et al. Diffusion barrier performance of reactively sputtered Ta-W-N between Cu and Si // Microelectronic engineering. 2004. V. 75. №. 3. P. 309-315.
2. Li H. et al. The crystal structural evolution of nano-Si anode caused by lithium insertion and extraction at room temperature // Solid State Ionics. 2000. V. 135. №. 1-4. P. 181-191.
3. Huang H. Y., Chen L. J. Growth kinetics of SiO<sub>2</sub> on (001) Si catalyzed by Cu<sub>3</sub>Si at elevated temperatures // Journal of Applied Physics. 2000. T. 88. №. 3. C. 1412-1417.

4. Terekhov V. A. et al. Determination of the phase composition of surface layers of porous silicon by ultrasoft X-ray spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy techniques // Journal of electron spectroscopy and related phenomena. 2001. T. 114. C. 895-900.

**Создание и исследование гибких светоизлучающих устройств на основе массивов фосфидных и нитридных полупроводниковых соединений нитевидных нано- и микрокристаллов, инкапсулированных в полидиметилсилоксан**

***Колесина Д.Е.<sup>1</sup>, Кочетков Ф. М.<sup>1,2</sup>, Мухин И. С.<sup>1,2</sup>***  
<sup>1</sup>СПбАУ РАН им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург  
<sup>2</sup>СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

УДК: 538. 911

В последние десятилетия для создания гибких светоизлучающих устройств себя зарекомендовала технология органических светодиодов (OLED), однако использование технологии ограничено из-за термической и химической нестабильности органических материалов, рекристаллизации и диффузии металлических слоев в органические материалы, что ограничивает срок службы устройства. Поэтому в условиях, где необходима стабильная работа при высокой яркости предпочтительнее использовать твердые растворы АЗБ5, а для создания гибкого устройства применяется альтернативная технология в виде нитевидных микро- и нанокристаллов (ННК) АЗБ5. Массив АЗБ5 ННК может быть инкапсулирован в различные силиконовые материалы для придания эластичности, однако, поскольку мембраны из массивов АЗБ5 способны к растяжению и гибкости, то для создания светоизлучающего устройства им необходимы гибкие и эластичные контакты. В качестве электрических контактов наиболее предпочтительно использовать одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) ввиду их высокой прозрачности (~ 80 % при 550 нм) и проводимости (~ 20 Ом\кв).

Настоящее исследование посвящено созданию и исследованию светоизлучающих устройств на основе нитевидных нано- и микрокристаллов фосфида и нитрида галлия, излучающих в видимом и ультрафиолетовом спектральных диапазонах. Массив нитевидных кристаллов был инкапсулирован в коммерческий силиконовый полимер полидиметилсилоксан Sylgard 184 методом гравитационной накрутки [1,2,3]. После отверждения инкапсулированный массив отделяется от ростовой подложки микротомным лезвием, методом механического трансфера на фронтную и тыльную стороны мембраны наносили осажденные на нитроцеллюлозном фильтре одностенные углеродные нанотрубки. У светоизлучающих структур были измерены электрофизические и оптические характеристики, были получены устройства, излучающие в красном (677 нм), зеленом (523 нм), синем (482 нм), также в ультрафиолетовом (345 нм) спектральных диапазонах. Излучение в ультрафиолетовом диапазоне позволяет комбинировать мембрану с различными люминофорами для создания неорганических светодиодов нового поколения.

*Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 23–79–01151 «Эластичная светодиодная мембрана АЗБ5 нитевидные нанокристаллы/силоксан с растяжимым электродом на основе одностенных углеродных нанотрубок».*

1. Kochetkov F. M. et al. Stretchable transparent light-emitting diodes based on InGaN/GaN quantum well microwires and Carbon nanotube films // *Nanomaterials*. 2021. Т. 11. №. 6. С. 1503.
2. Neplokh V. et al. Red GaPAs/GaP nanowire-based flexible light-emitting diodes // *Nanomaterials*. 2021. Т. 11. №. 10. С. 2549.
3. Amador-Mendez N. et al. UV-A Flexible LEDs Based on Core–Shell GaN/AlGaN Quantum Well Microwires // *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2024. Т. 16. №. 38. С. 51000-51009.

## Синтез наноалмазов из нанюглерода - продукта низкотемпературной карбонизации фенилборной кислоты

*К.М. Кондрина<sup>1,2</sup>, Е.А. Екимов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, Москва*

<sup>2</sup>*Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), Долгопрудный*

УДК: 546.27

Фазовые превращения фенилборной кислоты  $C_6H_5B(OH)_2$  были изучены при давлениях 7.5-8.5 ГПа и температурах до 1600 С [1]. Были реализованы 2 пути синтеза при 8.5 ГПа и 1600 С – из исходного прекурсора были получены легированные бором микроалмазы, а также были получены легированные бором наноалмазы в двухстадийном процессе синтеза под давлением из продукта предварительной карбонизации при 7 ГПа и 800 С.

В нашем случае продукт предварительной карбонизации представлял собой разупорядоченный графит, с толщиной пакета 6 нм, с сильно увеличенным параметром решетки  $c=6.81-6.96$  А (стандартно 6.711 А). В ИК-спектрах также видно присутствие бор-кислородных групп. Электротранспортные измерения показывают р-тип проводимости, который может быть связан с легированием бором.

Торможение процесса графитации карбонизированного продукта с бор-кислородными группами может быть ответственным за предпочтительное образование наноалмазов. Также предположительно образование наноалмазов может быть связано с уходом газовой среды.

Показана возможность контролируемого снижения степени легирования алмаза бором в углеродородных системах в присутствии кислорода и получения наноалмазов в карбонизированном продукте после удаления летучих компонентов в двухстадийном процессе. В двухстадийном процессе наблюдается снижение степени легирования алмазов до  $1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$  (при прямом синтезе  $4.5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ).

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-12-00037, <https://rscf.ru/en/project/24-12-00037/>.*

1. Kondrina K. M. et al. Transformations in phenylboronic acid at high pressures and temperatures // Diamond Relat. Mater. 2024. Т. 147. С. 111328.

**Динамика решетки тонкой пленки ВТО выращенной на MgO с буферным подслоем LSMO**

**А.С. Константинов<sup>1</sup>, А.С. Михайкин<sup>1</sup>, Н.В. Лянгузов<sup>1</sup>, В.Б. Широков<sup>1</sup>, Е.Д. Линник<sup>1</sup>,  
А.Г. Разумная<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

<sup>2</sup>Jožef Stefan Institute, Jamova Cesta, Slovenia

УДК:538.913

Среди перспективных материалов для перестраиваемых устройств микроволнового диапазона можно выделить сегнетоэлектрики, полимеры, жидкие кристаллы [1]. Особый интерес представляют сегнетоэлектрические материалы благодаря своим диэлектрическим свойствам. Для практического применения сегнетоэлектриков требуется развитие технологий производства тонких пленок и их последующей интеграции в существующие системы. Определяющим фактором при производстве тонких эпитаксиальных пленок является принципиальная совместимость параметров решетки подложки и пленки, а также влияние подложки на свойства тонкой пленки.

Тонкая пленка титаната бария (ВТО) толщиной 500 нм с проводящим подслоем  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$  (LSMO) была выращена на монокристалльной подложке MgO (001) при помощи импульсного лазерного напыления. Кристалличность, преимущественная ориентация и параметры ячейки были определены с помощью рентгеновского дифрактометра. Уточнение структуры и динамики решетки пленки выполнено с помощью измерения поляризованных спектров комбинационного рассеяния света в широком диапазоне температур от 80 до 500 К. Согласно данным, полученным при обработке спектров КРС тонкая пленка ВТО испытывает переход из параэлектрической в орторомбическую фазу при 400 К, а затем в моноклинную при температуре 340 К. Подобная последовательность фазовых переходов соответствует положительному значению вынужденной деформации пленки, что отличается от литературных данных по пленкам ВТО, выращенных на (001) MgO. В данной работе мы показываем, что тонкий буферный слой LSMO позволяет изменить знак вынужденной деформации пленки ВТО и достичь сегнетоэлектрической *aa* фазы, в которой поляризация лежит в плоскости пленки.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25–22-00478).*

1. Ahmed A. et al. Electrically tunable materials for microwave applications // Applied Physics Reviews. 2015. V.2. No. 1. P. 011302.

## Высокотемпературная кристаллохимия семейства типа стиллуэллита $RBTO_5$

( $R = La, Ce, Nd, Ba, T = Si, Ge, P$ )

*Ю.О. Копылова<sup>1,2</sup>, М.Г. Кржижановская<sup>1,2</sup>, Л.А. Горелова<sup>1</sup>, Р.С. Бубнова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Институт наук о Земле, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Филиал НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИХС, Санкт-Петербург

УДК:548.33, 538.9

В настоящий момент накоплено значительное количество данных по кристаллохимии и свойствам стиллуэллитоподобных синтетических фаз  $ABTO_5$ : получены боросиликаты с редкоземельными элементами (La, Ce, Nd) и борогерманаты (La, Nd, Eu, Pr), также синтезированы вариации, образующиеся при замещении лантаноидов щелочноземельными металлами (Ca, Sr, Ba, Pb) в сочетании с пентавалентными катионами (P, As) [1]. В данном семействе фазы, содержащие более крупные нететраэдрические катионы (такие как Pb, Ca, Sr, Ba, La, Ce, Pr) кристаллизуются со структурным типом стиллуэллита (за исключением датолита), тогда как представители с более мелкими РЗЭ имеют другую слоистую структуру типа датолита – гадолинита. Переход от структуры стиллуэллита к структуре датолита обусловлен уменьшением координационного числа и диаметра иона  $R^{3+}$  [2]. В настоящей работе мы представляем результаты исследования кристаллохимии соединений  $RBTO_5$  ( $R = La, Ce, Nd, Ba, T = Si, Ge, P$ ) при температурах -180–1200 °С.

Фазовые переходы между разупорядоченной низко- и упорядоченной высокотемпературной полиморфными модификациями  $RBSiO_5$  ( $P3_1 \leftrightarrow P3_121$ ) возникают вследствие процессов порядок-беспорядок в боросиликатных цепочках. Температура перехода резко возрастает при уменьшении радиуса лантаноида от 150 °С для  $LaBSiO_5$  и 450 °С для стиллуэллита-(Ce) до 900 °С для  $NdBSiO_5$ . Структура  $RBSiO_5$  расширяется анизотропно во всем исследованном температурном диапазоне с максимальным расширением вдоль спиральных тетраэдрических цепочек; расширение в перпендикулярной плоскости значительно меньше вплоть до нуля или даже отрицательного значения в диапазоне превращения:  $\alpha_{Vmin} \simeq -14.0$ ,  $\alpha_{Vmax} \simeq 16.0 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$  ( $LaBSiO_5$ ),  $\alpha_{Vmin} \simeq 3.9$ ,  $\alpha_{Vmax} \simeq 20.3 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$  ( $CeBSiO_5$ ),  $\alpha_{Vmin} \simeq 19.1$ ,  $\alpha_{Vmax} \simeq 23.4 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$  ( $NdBSiO_5$ ) [3].

Тип нететраэдрического катиона в фазах типа стиллуэллита может определять термическое поведение: для  $BaBPO_5$ , полиморфных переходов и процессов типа «порядок-беспорядок» не зафиксировано, тепловое термического расширение характеризуется отсутствием анизотропии ( $\alpha_V = 8.6 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ) [4].

Для борогерманата  $NdBGeO_5$  известны две вариации структуры: стиллуэлитовая и датолитовая [2]. Мы исследовали образец со структурой типа датолита (пр. группа  $P2_1/a$ ). В отличие от боросиликатов, мы не зафиксировали полиморфного перехода при нагревании. Термическое расширение анизотропно с максимальным расширением вдоль слоев и стабильно на всем изучаемом температурном диапазоне ( $\alpha_V = 21.6 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ).

*Работа выполнена в рамках государственного задания Филиала НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИХС (тема № 1023033000085-7-1.4.3). Авторы благодарят ресурсный центр «Рентгенодифракционных методов исследований» СПбГУ за предоставленную возможность использования приборной базы.*

1. ICSD-5.3.0 (ICSD release 2024.2)
2. Белоконова Е.Л. et al. Полиморфизм соединений  $LnBGeO_5$  // Неорганические материалы. 1991. Т. 27. С. 1700–1707.
3. Krzhizhanovskaya M.G. et al. The structural origin and boundaries of thermal transitions in stillwellite-type  $LnBSiO_5$  // Optical Materials. 2024. V. 147. 7114651.
4. Кржижановская М.Г. и др. Кристаллохимия стиллуэллитоподобного  $BaBPO_5$  по данным монокристалльной дифрактометрии в нестандартных условиях // Записки российского минералогического общества. 2024. Т. 153. С. 130–140.

## Фазовые и структурные превращения в эпитаксиальных плёнках Pd-PdO

*С.С. Копытин<sup>1</sup>, Е.К. Белоногов<sup>1,2</sup>*

<sup>1,2</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж

УДК: 546.98, 549.271.1, 548.25, 538.9

Система Pd-PdO привлекает внимание исследователей перспективой использования в каталитических процессах и газовых сенсорах [1]. Синтез эпитаксиальных пленок Pd/PdO актуальная задача в силу ожидаемого изменения их эффективности, как катализаторов [1] и чувствительных сенсоров [2].

В работе пленки Pd толщиной 50-100 нм наносили методом термического испарения и конденсации в вакууме ( $10^{-4}$  Па) на подложки ( $T_{\text{п}}= 20, 300; 400; 550^{\circ}\text{C}$ ): NaCl, слюда,  $\text{SiO}_2/\text{Si}(111)$ . Окисление проводили на воздухе в муфельной печи ( $T_{\text{о}}= 400, 550, 700^{\circ}\text{C}$ ). Окисленные пленки палладия подвергали восстановительному отжигу в вакууме при  $750^{\circ}\text{C}$ .

Методом электронографии, просвечивающей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и рентгеновской дифракции обнаружены закономерности фазовых переходов и структурных превращений в пленках Pd/PdO. Установлено, что окисление эпитаксиальных монокристалльных пленок Pd на NaCl и слюде формирует двухосную текстуру поликристаллических пленок PdO, а их восстановление приводит к образованию эпитаксиальных поликристаллических пленок Pd (без существенного изменения рельефа), ориентированных в соответствии с соотношениями: (001) [100] PdO II (100) [011] Pd II (100) [001] NaCl (несоответствие 10,6%); (100) [010], [002] PdO II (111),(112) [110] Pd II (001) слюда. На окисленном кремнии переходы Pd→PdO→Pd сохраняют одноосную аксиальную текстуру кристаллитов <111> Pd II [001] PdO II <111> Pd.

1. Badica P., Lőrinczi A. A Review on Preparation of Palladium Oxide Films // Coatings. 2024. V. 14. № 10. p. 1260.

2. Рябцев С. В. и др. Структурные и газочувствительные характеристики тонких полупроводниковых пленок PdO различной толщины при детектировании озона // Физика и техника полупроводников. 2021. Т. 55. № 11. С. 1034.

**Синтез  $\text{LiNbO}_3$  отжигом в вакууме гетероструктуры  $\text{PdO}/\text{Li-Nb-O}$**   
***А.В. Костюченко<sup>1</sup>, С.С. Копытин<sup>2</sup>, Е.Н. Федорова<sup>1</sup>, А.А. Камынин<sup>1</sup>, Е.К. Белоногов<sup>1,2</sup>***  
<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж  
<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж  
УДК: 529.23

Тонкие пленки ниобата лития ( $\text{LiNbO}_3$ ) – перспективный функциональный элемент акустоэлектроники ввиду нелинейных физических свойств и высокой спонтанной поляризации. Эффективный вариант синтеза кристаллических текстурированных пленок – отжиг аморфных конденсатов на ориентирующей подложке в вакууме, но отжиг  $\text{Li-Nb-O}$  в кислород-дефицитных средах приводит к образованию фаз  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ ,  $\text{LiNb}_3\text{O}_8$  с дефицитом кислорода и лития.

В работе методами ПЭМ исследован фазовый состав тонких ( $\approx 50$  нм) аморфных пленок системы  $\text{Li-Nb-O}$ , полученных методом высокочастотного магнетронного распыления мишени  $\text{LiNbO}_3$  и конденсации на поверхности фторфлогопита (ФФ), гетероструктуры ФФ/ $\text{PdO}$  ( $\approx 50$  нм) после изотермического отжига (ТО) при  $650^\circ\text{C}$ , 5 мин в вакууме  $1 \cdot 10^{-3}$  Па. Выбор в качестве подслоя пленки  $\text{PdO}$  обусловлен его способностью к разложению и быть источником кислорода для  $\text{Li-Nb-O}$  при отжиге в вакууме.

Установлено, что в процессе ТО аморфных пленок  $\text{Li-Nb-O}$  на ФФ происходит синтез кристаллических фаз  $\text{LiNbO}_3$ ,  $\text{LiNb}_3\text{O}_8$  с произвольной ориентацией кристаллитов. В результате ТО гетероструктуры ФФ/ $\text{PdO}/\text{Li-Nb-O}$  наблюдали: 1) разложение  $\text{PdO}$  до металлического  $\text{Pd}$ ; 2) эпитаксиальной рост пленки  $\text{Pd}$  в ориентационном соотношении (111),(112) [110]  $\text{Pd}$  II (001) ФФ; 3) синтез однофазной пленки  $\text{LiNbO}_3$  на поверхности  $\text{Pd}$ .

Следовательно, разложение  $\text{PdO}$  может служить источником кислорода, который способен компенсировать его потери в процессе кристаллизации аморфного слоя  $\text{Li-Nb-O}$  и синтезе  $\text{LiNbO}_3$ . Реализованный подход решает проблему синтеза стехиометрического  $\text{LiNbO}_3$  на металлическом основании.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 24-22-20046.*

**Особенности роста тонких пленок CdTe на различных подложках**  
***И.О. Кошелев<sup>1</sup>, П.В. Резникова<sup>1,2</sup>, И.С. Волчков<sup>1</sup>, И.М. Долуденко<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>.***

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>МИРЭА – Российский технологический университет, Москва

УДК: 548.532.78; 539.216.2; 539.23; 538.975.

CdTe - широкозонный полупроводников, имеющий оптимальную ширину запрещенной зоны в 1.5 эВ при T = 300 К [1]. CdTe может применяться как элемент ИК-детекторов, детекторов рентгеновского, гамма-излучений и солнечных элементов. Получение качественных кристаллов методами роста из расплава осложнено из-за наличия сложной фазовой структуры. Альтернативой объемным кристаллам являются тонкие пленки на различных подложках.

В данной работе исследованы особенности роста тонких пленок CdTe, на подложках Si (111), Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) и силикатного стекла. Тонкие пленки CdTe были выращены методом высоковакуумного термического напыления. Процесс напыления проходил в условиях высокого вакуума (~10<sup>-8</sup>–10<sup>-7</sup> мбар). Температура подложки в ходе процесса роста ~250°C, температура источника ~673°C. Время напыления – от 60 до 120 мин.

Полученные пленки были исследованы методами EDX спектроскопии, РФА, оптической и рамановской спектроскопий. Выращенные образцы тонких пленок CdTe показали соотношение элементов Cd к Te, близкое к стехиометрии. Образцы, выращенные на подложках Si, обладают структурой типа сфалерита, образцы, выращенные на Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> имеют 2 фазы - типа сфалерита и вюрцита. CdTe, выращенный на силикатном стекле, является разориентированным, со структурой сфалерита. Методом оптической спектроскопии исследованы спектры пропускания образцов.

Учет особенностей роста тонких пленок на различных подложках, а также возможность получения тонких пленок вюрцитной модификации значительно расширяет перечень получаемых многослойных структур на основе CdTe.

*Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Fonthal G., et al. // J. Phys. Chem. Solids. 2000 V.61 № 2 P. 579.

## Анализ влияния наполнителя фотополимерных смол на твердость конечного изделия

**В.В. Кошкин<sup>1</sup>, М.В. Солонинкина<sup>1,2</sup>, Д.В. Логинов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

<sup>2</sup>Карельский научный центр РАН, Петрозаводск

УДК: 678, 538.9

Преимуществом использования 3D-печати по сравнению с литьем и механической обработкой заготовок является скорость производства, меньшие трудозатраты, высокая точность производства, а также возможность выбора материала для изготовления [1-4]. На рынке представлено большое количество фотополимерных смол от таких производителей, как HARZ Labs (Россия), Gorky Liquid (Россия), Anycubic (Китай), Elegoo (Китай), PioGreat 3D (Китай), IFUN (Китай), SUNLU (Китай). Это мировые бренды, доступные как обычному покупателю в небольших количествах, так и в оптовых поставках. Таким образом, перед крупной закупкой существует возможность провести испытания и оценить, удовлетворяет ли конечная деталь установленным требованиям.

Проведены исследования, направленные на возможность улучшения эксплуатационных характеристик деталей 3D-принтера, изготовленных из фотополимерных смол, за счет введения наполнителей и получения композиционного материала. В частности, необходимо было произвести их упрочнение. В качестве наполнителя фотополимерной смолы был выбран кварц, который демонстрирует высокие показатели твердости, легко поддается помолу и доступен как с точки зрения финансовых затрат, так и по объему сырья. Отобранный  $\alpha$ -кварц измельчали с применением шаровой мельницы на протяжении десяти часов. Измельченный наполнитель исследовали с использованием растровой электронной микроскопии, и было установлено, что продолжительный помол приводит к снижению минимального размера частиц до  $\sim 200$  нм. Внедрение наполнителя в жидкий фотополимер и смешивание на высоких оборотах с помощью магнитной мешалки модели MM-135NM позволяет получить однородную массу без образования комков. Синтез образцов производился в гипсовой форме под действием УФ-излучения с длиной волны 405 нм. Таким образом, были изготовлены кубические образцы для исследования с линейными размерами 2 см. В качестве исходных компонентов для изготовления опытных образцов использовали фотополимерную смолу марок Sunlu ABS-like темно-серого цвета и HARZ Labs Industrial Rigid, а также полученный порошок  $\alpha$ -кварца в наполнении 10, 15, 30 мас. %.

Сравнительный анализ результатов экспериментального исследования влияния наполнителя в фотополимерных смолах на твердость конечного изделия показал, что введение  $\alpha$ -кварцевого наполнителя в количестве 10 мас. % повышает её износостойкость. Однако с увеличением концентрации керамики до 30% материал становится более хрупким. В то же время керамика способствует повышению твердости благодаря своей жесткости и рекомендуется для условий, требующих высокой прочности или воздействия ударных нагрузок.

*Исследование выполнено в рамках реализации Программы поддержки НИОКР студентов, аспирантов и лиц, имеющих ученую степень, финансируемой Правительством Республики Карелия.*

1. Толочко Н. К. и др. Аддитивные технологии в производстве и ремонте машин. 2022.
2. Дожделев А. М., Лаврентьев А. Ю. Обзор фотополимерных материалов для 3D печати методом стереолитографии //Международный журнал гуманитарных и естественных наук. 2020. №. 9-2. С. 99-101.
3. Фарниев А. С., Новиков П. А. Анализ свойств материалов, используемых в аддитивных технологиях, и особенности их влияния на формирование внутренних резьб //Вестник современных технологий. 2020. №. 3. С. 42-46.
4. Андруцкая Ю. А., Койда В. А. Сравнительная характеристика фотополимерных смол для печати на 3-D принтере // Теоретические и практические аспекты современной медицины. 2023. С. 193-194.

## Микротетраподы оксида цинка для фотокаталитического разложения органических загрязнителей в водных растворах

*Краснова В.В.<sup>1</sup>, А.Э. Муслимов<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>*  
<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 541.145, 538.9

Благодаря возможности применения солнечной энергии фотокаталитические (ФК) процессы отличаются экологичностью, высокой чувствительностью и эффективностью. За счет добавления фотокатализатора в водный раствор можно добиться разложения трудноокисляемых органических веществ с низкой концентрацией до углекислого газа и воды за короткое время.

Одним из наиболее перспективных фотокатализаторов является оксида цинка (ZnO). Благодаря высокой подвижности электронов и высокому окислительному потенциалу генерируемых гидроксильных радикалов они обладают большой ФК эффективностью. Также для ZnO возможно усиление fotocувствительности в видимой области по причине низких энергий образования и ионизации собственных дефектов, с которыми связана высокая плотность состояний вблизи уровня Ферми. Кроме того, привлекательной является дешевизна как самого цинка, так и методов синтеза микроструктур (тетраподов) ZnO, демонстрирующих высокую ФК-активность [1].

В представленной работе изучены процессы синтеза микроструктур ZnO методом пиролитического карботермального синтеза и газофазного синтеза. Полученные образцы характеризуются псевдотрехмерной морфологией тетраподов.

Исследована их фотокаталитическая активность в процессах деградации метиленового синего (МС) с исходной концентрацией  $C_0 = 1,0$  мг/л при облучении солнечным светом (осветитель ОЛКс-150М с ксеноновой лампой с лампой ДКсШ-150, 50 мВт/см<sup>2</sup>). В результате работы были синтезированы микрочастицы ZnO по ФК активности, превосходящие в 1,5-2 раза традиционно применяемые наночастицы TiO<sub>2</sub>.

Оценку эффективности фотодегradации МС в присутствии фотокатализатора ZnO сравнивали с процессом фотолиза. В присутствии фотокатализатора ZnO глубина фотодегradации МС значительно увеличилась. За 20 мин в процессе фотолиза эффективность фотодегradации достигала всего 40 %, в то время как при добавлении микрочастиц ZnO, полученных газофазным методом за 20 минут наблюдалось полное разложение МС в водном растворе.

Наибольшая скорость фотодегradации МС была достигнута при добавлении микрочастиц, полученных газофазным синтезом (константа скорости  $k = 500 \times 10^{-3}$  мин<sup>-1</sup>). В качестве эталонного образца использовался традиционно применяемый фотокатализатор TiO<sub>2</sub> марки P25 (константа скорости  $k = 240 \times 10^{-3}$  мин<sup>-1</sup>). Обнаружена связь между люминесцентными свойствами и фотокаталитической активностью тетраподов, которая обусловлена интенсивной генерацией электрон-дырочных и, как следствием, наличием интенсивного спектра краевой люминесценции (КрЛ).

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00696 <https://rscf.ru/project/24-29-00696/>.*

1. Краснова В.В. Характеризация и фотокаталитические свойства тетраподов ZnO, синтезированных методом высокотемпературного пиролиза // Кристаллография. 2024. Т. 69, № 3. С. 549-556.

## Золь-гель синтез тонких пленок на основе допированного фтором SnO<sub>2</sub>

*А.И. Кушакова<sup>1,2</sup>, А.С. Коваленко<sup>1</sup>, А.М. Николаев<sup>1</sup>,*

*А.Г. Иванова<sup>1</sup>, О.А. Загребельный<sup>1</sup>, С.В. Мякин<sup>2</sup>, О.А. Шилова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

УДК: 539.232, 538.9

В последние годы перовскитовые солнечные элементы (PSC) привлекают все больше внимания благодаря своим высоким показателям эффективности и потенциалу для снижения стоимости производства [1]. Одним из ключевых компонентов таких батарей является оксид олова (SnO<sub>2</sub>), который используется в качестве прозрачного проводящего оксида (TCO) и электронно-транспортного слоя (ETL). SnO<sub>2</sub> обладает рядом преимуществ, включая высокую прозрачность, хорошую проводимость и химическую стабильность, что делает его идеальным материалом для применения в перовскитовых солнечных элементах.

Допирование фтором тонких пленок на основе SnO<sub>2</sub>, полученных золь-гель методом, оказывает значительное влияние на их свойства. В частности, фторирование улучшает прозрачность и электрические свойства пленок. Кроме того, фторированные пленки обладают меньшим поверхностным сопротивлением по сравнению с пленками без добавок, что связано с наличием ионов фтора, которые служат дополнительными источниками свободных носителей заряда [2].

Цель данной работы заключается в исследовании влияния условий синтеза тонких пленок SnO<sub>2</sub>, допированного фтором, золь-гель методом на их прозрачность, морфологию и электропроводность.

Тонкие пленки получали золь-гель методом. В качестве прекурсоров для приготовления золь использовали SnCl<sub>2</sub> и NH<sub>4</sub>F. В процессе синтеза варьировали следующие параметры: растворитель (этиловый, бутиловый или изопропиловый спирт); количество NH<sub>4</sub>F (5, 10 или 15 ат.%), количество слоев (10, 15, 20), что позволяет регулировать толщину и свойства пленок. Золь наносили на очищенную стеклянную подложку методом спин-коатинга, после чего высушивали при комнатной температуре. Термообработку осуществляли при 450°C. Этот процесс обеспечивает формирование кристаллической структуры и улучшение проводимости пленок [3].

Прозрачность полученных пленок исследовали с помощью УФ-спектрометрии. Результаты исследования показали, что полученные пленки являются достаточно прозрачными (пропускание ~ от 80 до 90 %). При этом на их прозрачность оказали влияние все из варьируемых в процессе синтеза параметров. Наибольшей прозрачностью отличались пленки, полученные с использованием этилового спирта с минимальными содержаниями фтора.

Кроме этого, была исследована морфология полученных пленок и их проводимость. В докладе будут представлены полученные данными методами результаты в зависимости от условий синтеза тонких пленок SnO<sub>2</sub>, допированных фтором, а также рекомендации по оптимизации условий синтеза для достижения наилучших характеристик.

1. Jiang L., Li Q., Li B., Guo S., Li S., Zhang X., Tang X. Efficient and stable perovskite solar cells via oxalic acid doped SnO<sub>2</sub> nanocrystals with surface-defect passivation // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2024. Vol. 702, P. 2, 135052.
2. Белоусов С. А., Носов А. А., Меньшикова Т. Г., Рембеза С. И. Электрофизические свойства металлооксидных пленок SnO<sub>2</sub>, изготовленных по золь-гель технологии // *Вестник ВГТУ*. 2016. №2.
3. Adamczyk A, Brylewski T, Szymczak P. The Influence of Ag Addition and Different SiO<sub>2</sub> Precursors on the Structure of Silica Thin Films Synthesized by the Sol–Gel Method // *Molecules*. 2024. Vol. 29. No. 19. 4592.

**Рентгеновское исследование магнитоэластического эффекта в алюминиевом сплаве В95пч, состаренном в импульсном магнитном поле**

***С.Р. Макеев, Ю. В. Осинская,***

*Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, Самара*

УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

Алюминиевый сплав В95пч (Al-Zn-Mg-Cu), известный повышенными значениями прочности и твердости, вызывает значительный интерес с точки зрения его дальнейшего совершенствования. Перспективным инструментом модификации физико-механических свойств выступает магнитное поле, активирующее перераспределение легирующих элементов и влияющее на кинетику формирования упрочняющих фаз в пересыщенном твердом растворе [1]. В результате этого достигается уникальное сочетание прочности и пластичности, недостижимое традиционными методами термической обработки. Разработанная технология на основе «магнитоэластичности» закладывает базу для создания металлических сплавов нового поколения, адаптированных для критически важных применений в аэрокосмической и авиационной промышленности [2].

В данной работе экспериментально выясняется влияние импульсного магнитного поля (ИМП) на знак и величину магнитоэластического эффекта (МЭЭ) и параметры тонкой структуры алюминиевого сплава В95пч. Старение закаленных образцов проводили в вакууме длительностью 4 ч и при температуре 140 °С в ИМП амплитудой напряженности 557 кА/м и частотой от 1 до 7 Гц. Величину и знак МЭЭ оценивали по изменению микротвердости, измеренной на микротвердомере HAUSER. Рентгеноструктурный анализ выполняли на дифрактометре ДРОН-2.

Обнаружено, что наложение ИМП в процессе старения сплава приводит к снижению его микротвердости до 37 %. Этот эффект известен как положительный магнитоэластический эффект (МЭЭ) [3] и, в нашем случае, связан с формированием более однородной структуры с меньшими внутренними искажениями, что подтверждается рентгеноструктурным анализом. Уменьшение дефектности сплава облегчает движение дислокаций, снижая сопротивление их перемещению со стороны фазовых выделений и границ зёрен, что и приводит к повышению пластичности. Интересно, что минимум микротвёрдости наблюдается при частотах 2 и 5 Гц, что может указывать на резонансное взаимодействие магнитного поля с дислокационной структурой сплава. Кроме этого выявлено, что в условиях ИМП средние размеры блоков когерентного рассеяния увеличиваются, тогда как относительные микродеформации и плотность дислокаций снижаются по сравнению с образцами, состаренными без поля. Это подтверждает формирование более однородной и менее дефектной структуры сплава под влиянием ИМП. Кроме того, обнаружена взаимосвязь между частотными характеристиками МЭЭ и изменениями параметров тонкой структуры: минимумы плотности дислокаций соответствуют также частотам 2 и 5 Гц.

1. Hu Y.; Zhao H.; Yu X.; Li J.; Zhang B.; Li T. Research Progress of Magnetic Field Regulated Mechanical Property of Solid Metal Materials. // Metals. 2022. V. 12. P. 1988.
2. Фридляндер И.Н., Сенаторова О.Г., Ткаченко Е.А., Молостова И.И. Развитие и применение высокопрочных сплавов системы Al – Zn – Mg – Cu для авиакосмической техники // 75 лет ВИАМ. Авиационные материалы: юбилейный науч.-техн. сб. / под общ. ред. Е. Н. Каблова. М.: ВИАМ, 2007. С. 155–163.
3. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. Влияние частоты импульсного магнитного поля на старение алюминиевого сплава Al–Si–Cu–Fe // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Т. 85. № 7. С. 1018–1023.

## Особенности структур возбуждения и приема спиновых волн в пленках железоиттриевого граната

Н.С. Максимов<sup>1,2</sup> С.И. Горбунов<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>АО «Всероссийский НИИ радиотехники», Москва

<sup>2</sup>Кафедра радиотехнических приборов и антенных систем ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ», Москва

<sup>3</sup>Кафедра формирования и обработки радиосигналов ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ», Москва  
УДК:538.975

Диэлектрические магнитные пленки и кристаллы, и особенно их доменная структура, в течение длительного времени являются предметом интенсивных исследований. Ферриты позволили создать устройства СВЧ, не удовлетворяющие принципу взаимности - имеющие существенно различные характеристики для разных направлений распространения энергии [1]. На сегодняшний день разработан и выпускается широкий ряд ферритовых приборов СВЧ диапазона, которые позволяют создавать современные системы, удовлетворяющих нынешним и перспективным требованиям радиоэлектроники. Свойства ферритов существенно зависят от их кристаллической структуры. Программные пакеты типа MuMAX3, OOMMF, Magrag позволяют пользователю смоделировать пространственно-временную эволюцию намагниченности в магнетиках, исходя из численного (приближенного) решения уравнения Ландау-Лифшица-Гилберта (ЛЛГ)[2]. В современных системах численного расчета электрической динамики существуют инструменты симуляции спин волновых резонансов, хотя производители не регламентируют эти функции.

В этой работе рассматриваются поверхностные магнитоэлектрические волны, распространяющиеся в монокристалле железоиттриевого граната (ЖИГ) с выделенной осью анизотропии по направлению плоскости к пленке, а также способы их возбуждения и приема с ЖИГ волновода при помощи микрополосковых структур, различные конструкции антенн и расположение пленки над топологией позволяют анализировать спиновые волны разной интенсивности. Авторы провели большую работу по оптимизации параметров модели для согласования с материальными константами реальной магнитной пленки ЖИГ и условиями эксперимента.

1. Mushenok F.B., Dost R., Davies C.S., Allwood D.A., Inkson B.J., Hrkac G., Kruglyak V.V. Broadband conversion of microwaves into propagating spin waves in patterned magnetic structures. Applied Physics Letters. 2017. V.111. P.042404.
2. Buchanan K.S. et al. Magnetic-field tunability of the vortex translational mode in micron-sized permalloy ellipses: Experiment and micromagnetic modeling. Physical Review B. 2006. V.74. №6. C.064404.

## **Вихретоковый контроль дефектов в монокристаллах ферритов граната, проблемы и методы диагностики в производстве резонаторов СВЧ электроники**

***А.А. Максимова<sup>1</sup> Н.С. Максимов<sup>2,3</sup>***

*<sup>1</sup>Кафедра диагностических информационных технологий ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ», Москва*

*<sup>2</sup>Кафедра радиотехнических приборов и антенных систем ФГБОУ ВО НИУ «МЭИ», Москва*

*<sup>3</sup>АО «Всероссийский НИИ радиотехники», Москва*

УДК:538.975

Вихретоковый контроль (ВТК) является эффективным методом неразрушающего контроля, особенно в исследованиях материалов, таких как железиттриевый гранат (ЖИГ), использующийся в СВЧ-технологиях и оптоэлектронике, как частотно задающий элемент синтезаторов частот и ЖИГ-генераторов. Одной из главных проблем, связанных с ЖИГ, является наличие дефектов, возникающих в процессе его изготовления, особенно при использовании методов осаждения из жидкой фазы. Эти дефекты могут существенно повлиять на электрические, оптические и магнитные свойства материала, что критично для его серийного применения в высококачественных устройствах СВЧ.

Методы изготовления ЖИГ из жидкой фазы приводят к неравномерности и кристаллическим аномалиям, что сказывается на качественных характеристиках конечного узла, и увеличивает время регулировки компонента СВЧ техники. В данном контексте ВТК становится важным инструментом для обнаружения таких дефектов. Используя вихретоковые методы, исследования могут выявлять изменения в токах, которые возникают из-за наличия дефектов, трещин, пор или неоднородности [1]. К ключевым аспектам вихретокового контроля можно отнести возможность оперативного анализа больших поверхностей, что позволяет снизить время инспекции. Однако, несмотря на преимущества, существуют и ограничения. Например, размеры дефектов, которые могут быть обнаружены с помощью ВТК, зависят от частоты используемого магнитного поля; малые дефекты могут оставаться незамеченными. Также необходимо учитывать влияние температурных изменений на характеристики вихревых токов, что может усложнить или исказить интерпретацию результатов.

Для повышения эффективности вихретокового контроля в исследовании ЖИГ авторы исследуют методы, позволяющие улучшить выявление дефектов на разных уровнях. Таким образом, вихретоковый контроль представляет собой ценную методику для диагностики дефектов в кристаллах ЖИГ, однако его применение требует комплексного подхода и учета специфики рассматриваемых материалов.

1. Маликов В., Катасонов А., Ишков А., Фадеев Д., Войнаш С., Ворначева И., Загидуллин Р., Шмыкова Р. Вихретоковый метод исследования неоднородностей и дефектов тонких металлических пленок // Eurasian Physical Technical Journal. 2024 (46). P. 116–124.

## Рентгеноструктурный анализ эпитаксиальных островковых наноансамблей висмута на $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$

А.П. Маленин<sup>1</sup>, Д.В. Минин<sup>1</sup>, А.К. Кавеев<sup>1,2</sup>, И.С. Мухин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>ФГАОУ ВО СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 539.231, 539.261

Висмут (Bi) представляет собой уникальный материал ввиду наличия сильного спин-орбитального взаимодействия, с которым связан ряд перспективных свойств. Например, спин-орбитальное взаимодействие приводит к возникновению в Bi поверхностных топологически защищенных состояний. Зонная структура объемных кристаллов висмута имеет расположение уровней, характерное для полуметалла. В наноструктурах висмута при определенной толщине из-за размерного квантования зон может наблюдаться переход полуметалл-полупроводник [1]. Висмут находит приборное применение, например, в области колориметрии, а также в широкополосных детекторах [2].

В данной работе методом молекулярно-лучевой эпитаксии была выращена серия наноструктур Bi на подложке Si(111) с использованием буферного слоя  $\text{CaF}_2$ . Эквивалентная толщина Bi составляла 80 нм при температурах роста от комнатной до 200°C. Наиболее подробно в настоящей работе был исследован случай 100°C. Показано, что морфология поверхности полученных наноструктур имеет островковый характер. Известно, что при эпитаксиальном выращивании на поверхности Si(111) висмут может формировать ромбоэдрическую фазу с ориентациями поверхности роста (001) и (012), а также простую кубическую фазу с ориентацией поверхности роста (010) [3]. Методом рентгеноструктурного анализа в нашей работе продемонстрировано формирование двенадцати структурных доменов, характеризующихся эквивалентными по интенсивности дифракционными рефлексами. Формирование этих доменов сопровождалось ориентацией (012) поверхности роста ромбоэдрической фазы. Показано, что структурные домены определяются путем трехкратного поворота на 60° вокруг оси, перпендикулярной плоскости роста (012), а также наличием двойникования в азимутальных направлениях  $[22\bar{1}]$  и  $[\bar{4}2\bar{1}]$  плоскости роста, что дает 6 возможных ориентаций доменов. Кроме того, ромбоэдрическая структура Bi не имеет симметрии относительно вращения на 180° вокруг оси, перпендикулярной плоскости (012), чем объясняется дополнительное удвоение указанной выше группы из шести структурных доменов.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки (грант № FSRM-2023-0007).*

1. E.I. Rogacheva, S.G. Lyubchenko, M.S. Dresselhaus. Semimetal-semiconductor transition in thin Bi films // Thin Solid Films. 2008. V. 516. No. 10. P. 3411-3415.
2. J.D. Yao, J.M. Shao, G.W. Yang. Ultra-broadband and high-responsive photodetectors based on bismuth film at room temperature // Scientific Reports. 2015. V.5. No.1. P.12320.
3. A. R. Jalil et al. Phase-Selective Epitaxy of Trigonal and Orthorhombic Bismuth Thin Films on Si (111) // Nanomaterials. 2023. V. 13. No. 14. P. 2143.

## Поиск нелинейных уединенных волн с помощью метода Уизема в конической фазе хирального гелимагнетика $\text{CrNb}_3\text{S}_6$

*М.С. Малютин<sup>1</sup>, А.С. Овчинников<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

УДК:538.9

Солитоном называется устойчивая уединенная волна, распространяющаяся без искажения формы с постоянной скоростью. Например, такие возбуждения наблюдались в периодических магнитных структурах на основе тонких пленок [1] и, возможно, могут возникать в экспериментах по распространению микроволн в различных магнитных фазах микрометровых кристаллов моноосиального хирального гелимагнетика  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  [2].

Нами была рассмотрена коническая фаза этого соединения, которая создается внешним магнитным полем, направленным вдоль геликоидальной оси, когда спины образуют конечный угол с геликоидальной осью и вращаются вокруг нее. С помощью метода усредненного лагранжиана [3], найден закон нелинейной дисперсии и получено решение в виде модулированного волнового пакета, огибающая функция которого описывается НУШ, причем коэффициенты этого уравнения полностью определяются нелинейным дисперсионным соотношением. Предполагая, что в экспериментах по возбуждению спиновых волн волновой вектор спиновой волны, излучаемой антенной-эмиттером, известен, получены сдвиги этого волнового вектора и частоты, которые необходимо учитывать для приема нелинейной волны антенной-детектором.

С помощью критерия Лайтхилла была найдена область устойчивости солитонных решений, которая критическим образом зависит от угла конической магнитной спирали. Численное решение нелинейного уравнения Шредингера показало, что в системе  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  могут возбуждаться только солитоны темного типа.

1. Chen N.-N., Slavin A. N., Cottam M. G. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 8667–8671.

2. Shimamoto Y., Goncalves F.J.T., Sogo T., Kousaka Y., Togawa Y. // Phys. Rev. B. 2022. V. 104. Id. 174420.

3. Whitham G. B. Linear and Nonlinear Waves // John Wiley & Sons. 2011. P. 660.

## Киральная аномалия при магнитном фазовом переходе в MnSi

*И.Д. Манько, А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицина*

*Уральский федеральный университет, Екатеринбург*

УДК: 538.9

Одним из наиболее изученных прототипов спинтронных материалов является слабый зонный ферромагнетик MnSi с взаимодействием Дзялошинского-Мория. При этом первопринципное DFT-моделирование его основного состояния обнаруживает на поверхности Ферми области протекторатов Берри [1] и дает расчетные значения амплитуды магнитного момента примерно на порядок большие наблюдаемых на эксперименте. Это объясняется значительными нулевыми спиновыми флуктуациями, возникающими в основном состоянии MnSi, которые становятся пренебрежимо малыми выше температуры Кюри-Нееля [2].

Однако природа наблюдаемого фазового перехода, сопровождаемого резким (на порядок) уменьшением интенсивности рассеяния нейтронов [3] и возникновением киральных спиновых фракций, окончательно не выяснена. В настоящей работе получено, что наблюдаемый скачок нейтронного рассеяния связан с кроссовером магнитного фазового перехода первого рода, описываемым функционалом Гинзбурга-Ландау, и топологического электронного перехода, приводящего к возникновению вырождения Берри. Рассмотрены наблюдаемые во флуктуационной области фазового перехода аномальные особенности рассеяния поляризованных нейтронов в MnSi, значительное влияние на формирование которых оказывают обусловленные кривизной Берри киральные спиновые корреляции. Сдвиг химического потенциала за пределы области вырождения Берри приводит не только к исчезновению спиновой киральности, но и к лямбда-подобным аномалиям теплоемкости и теплового расширения MnSi [4].

*Результаты получены в рамках задания Министерства Науки и Высшего Образования, контракт № FEUZ-2023-0015.*

1. Wilde M.A., Dodenhoft M., Niedermayr A., Bauer A., Hirschmann M.M., Alpin K., Schnyder A.P., Pfleiderer C. // Nature 2021. V. 594. P. 374–379.
2. Povzner A.A., Volkov A.G., Nogovitsyna T.A.// Physica B: Condens. Matter 2018. V. 536. 1, P. 408.
3. Janoschek M., Garst M., Bauer A., Krautscheid P., Georgii R., Boni P., Pfleiderer C. // Phys. Rev. B 2013. V. 87, P. 134407.
4. Pappas C. // Phys. Rev. B 2011. V. 83. P. 224405.

## **Влияние концентрации Gd на сверхпроводящие свойства в ВТСП лентах 2-го поколения**

***Б.И. Массалимов<sup>1</sup>, П.Н. Дегтяренко<sup>2</sup>, А.В. Садаков<sup>1</sup>, А.Ю. Левахова<sup>1</sup>, С.Ю. Гаврилкин<sup>1</sup>,  
О.А. Соболевский<sup>1</sup>, А.Ю. Цветков<sup>1</sup>***

*<sup>1</sup>Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга  
ФИАН, Москва, Россия*

*<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

УДК:538.9

В данной работе представлены результаты систематического исследования влияния избытка гадолиния (Gd) на сверхпроводящие свойства высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) лент 2-го поколения на основе  $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  [1]. Проведен микроструктурный анализ, изготовлены микромостики для измерения критического тока, а также изучены угловые зависимости критического тока в различных магнитных полях. Показано, что избыток Gd приводит к образованию нитевидных дефектов несверхпроводящей фазы  $\text{Gd}_2\text{CuO}_4$ , ориентированных вдоль плоскости ab, что изменяет механизм пиннинга вихревой структуры. Оптимальная концентрация Gd (+15%) способствует увеличению критического тока, однако дальнейшее увеличение содержания Gd до +30% вызывает его снижение. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации технологии производства ВТСП лент 2-го поколения с улучшенными транспортными характеристиками [1].

1. Degtyarenko, P. N. et al. Influence of the Gd Concentration on Superconducting Properties in Second-Generation High-Temperature Superconducting Wires // JETP Letters. 2016. V. 118. No. 8. P. 579-584.

## Трехосный спектрометр поляризованных нейтронов на РК ПИК

*А.Н. Матвеева, И.А. Зобкало*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.97

На РК ПИК (Гатчина) ведется разработка трехосного спектрометра поляризованных нейтронов IN3, который будет располагаться в нейтронном зале. Диапазон рабочих энергий спектрометра лежит в пределах от 15 до 100 мэВ, что соответствует длинам волн от 0.9 Å до 2.36 Å. Планируется использование двух типов монохроматоров – на основе пиролитического графита PG(002) и германия Ge(220). Основным монохроматором являются кристаллы пирографита, германий используется в случае работы с более высокими начальными энергиями. Кристаллы PG также будут использоваться и в качестве анализатора. В качестве поляризатора планируется использовать компактный «kink»-поляризатор, а в качестве анализатора поляризации – С-бендер.

Спектрометр поляризованных нейтронов IN3 ориентирован на разделение магнитных и кристаллических возбуждений при энергиях до 100 мэВ, что очень важно для исследований соединений со взаимодействующими параметрами порядка. Эффективное решение задач для сложных ситуаций, когда магнитные и решеточные возбуждения близки по энергии или импульсу. Проведение исследований соединений с малыми размерами и сложной схемой магнитных взаимодействий, спин-решеточных взаимодействий. Измерения на спектрометре поляризованных нейтронов IN3 позволят получить энергии магнитных взаимодействий в кристаллических веществах прямым методом. Использование магнитного рассеяния нейтронов позволит наиболее достоверно определить фундаментальные основы, позволяющие выработать новые подходы к получению функциональных материалов.

Спектрометрические исследования применяются в областях квантовых технологий, электроники и информационных технологий, энергоэффективности и энергосбережения. В частности, спектрометр IN3 позволит изучать возбуждения в сверхпроводящих материалах, в материалах, применяемых для электрических трансформаторов и в области спинтроники. Поляризованные нейтроны позволяют измерять направления прецессионного движения магнитного момента, то есть поляризацию магнонов. Применение разнообразного оборудования окружения образца (криостат, криомагнит, криопечь, камеры давления) позволит проводить исследования при вариациях температуры, давления, магнитных полей.

Основными задачами на данный момент является проектирование секторной защиты монохроматора и защиты детектора и анализатора поляризации, разработка документации на системы АСУ и пневматики, а также разработка документации на поляризатор и анализатор поляризации. Поляризатор для спектрометра IN3 является уникальным изобретением, поэтому его проектированию уделяется особое внимание.

## Исследование характеристик магнитоэлектрических элементов для реализации генератора

В.А. Мисилин<sup>1</sup>

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород  
УДК: 538.9

В этой статье исследуются характеристики магнитоэлектрических элементов для магнитоэлектрического синхронного генератора. Магнитоэлектрики — это мультиферроидные материалы, в которых электрическая поляризация возникает под воздействием переменного магнитного поля или намагничённость изменяется под воздействием переменного электрического поля [1]. В статье представлены модели генераторов с магнитоэлектрическими элементами, работающих в резонансном и нерезонансном режимах.

Магнитоэлектрические композитные структуры - это искусственно созданные структуры, обладающие как ферромагнитными, так и сегнетоэлектрическими свойствами, которые могут состоять из нескольких ферромагнитных и сегнетоэлектрических фаз и механически соединённых друг с другом через границу раздела. В данной работе рассмотрены характеристики магнитоэлектрических элементов на основе слоистых пьезоэлектрических магнитострикционных композитных структур для построения магнитоэлектрического синхронного генератора [2]. Материал магнитоэлектрического элемента состоит из пьезокерамики ЦТС и нескольких слоев аморфного магнитного сплава метглас.

Сегодня большой интерес представляют устройства, основанные на магнитоэлектрическом эффекте. Особый интерес представляют устройства для сбора энергии [2] и выработки энергии [3]. Наше исследование сосредоточено на новом устройстве, которое сочетает в себе известную конструкцию синхронного генератора и магнитоэлектрический эффект. Такой генератор может быть использован, например, в автомобильной промышленности, в ветряных электростанциях, гидрогенераторах, турбогенераторах и электрооборудовании, предназначенном для преобразования механической энергии первичных двигателей в электрическую энергию.

Предлагаемый магнитоэлектрический генератор не использует в своем составе обмотки из медной проволоки. Из-за отсутствия обмоток в магнитоэлектрическом генераторе не возникают вихревые токи, которые вызывают перегрев конструкции и снижают ее надёжность. Характеристики метаматериала магнитоэлектрического элемента, состоящего из пьезокерамики ЦТС размерами 70x12x0,5 мм и аморфного сплава метглас размерами 70x12x0,1 мм, достигают:

1. Выходное напряжение составляет около 0,116 В, а магнитоэлектрический коэффициент - около 2,32 В/(см·Э) при измерении вне резонанса на частоте 1 кГц.

2. Выходное напряжение достигает примерно 11,3 В, а магнитоэлектрический коэффициент составляет 226 В/(см·Э) при измерении на резонансной частоте около 22,1 кГц.

Для оптимальной работы генератора мы предполагаем использование магнитоэлектрического элемента в резонансном режиме работы. Были изучены параметры таких материалов, например, характеристики в диапазоне частот, включая магнитоэлектрический коэффициент. Вкладом этого исследования является разработка теоретических и экспериментальных моделей, позволяющих оптимизировать работу генераторов, а также создание прототипов новых генераторных систем.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20045, <https://rscf.ru/project/24-19-20045/>.

## Теоретический подход описания взаимодействия фазовых переходов на примере сплава семейства Гейслера $Ni_{51-x}Mn_{33,4}In_{15,6}V_x$ при $x = 0 \dots 1$

*Е.В. Морозов, Д.А. Карпухин*

*ИРЭ имени В.А. Котельникова РАН, Москва*

УДК: 537.9, 536-11, 538.9

В последние годы выходит очень большое количество публикаций, посвященных твердотельным фазовым переходам (ФП) в интерметаллических сплавах [1].

Проблема связана с особенностями протекания и кинетикой процессов в системах, где возможно взаимодействием между двумя и более ФП, происходящими в одном кристалле. Цель работы – поиск теоретических подходов к решению этих задач в рамках феноменологической теории. Для этого предлагается нахождение констант в написании свободной энергии по параметрам порядка, а также используя метод разложения Ландау и уравнение Ландау-Халатникова рассчитать уравнения состояния и скорости релаксации параметров порядка на примерах магнитоструктурного ФП 1-го рода и точки Кюри 2-го рода.

Для изучения термодинамических свойств образцов при ФП первого и второго рода, благодаря их близости, авторы использовали разложение функции свободной энергии Гельмгольца методом Ландау с параметрами порядка  $M$  – намагниченность и  $\epsilon$  – деформация.

Решение системы уравнений состояния возможно, если будут найдены все коэффициенты. Для нахождения коэффициентов авторами предложены оригинальные методики, прошедшие апробацию на других сплавах.

Поставленная задача по изучению кинетики ФП решается с помощью системы уравнений Ландау-Халатникова [2] по двум параметрам порядка.

*Исследование выполнено по государственному заданию «Вершина» ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН*

1. Ma S. et al. Toughening of Ni-Mn-Based Polycrystalline Ferromagnetic Shape Memory Alloys // Materials. 2023. Т. 16. №. 16. P. 5725.
2. Лившиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. 2-е изд // М.: Физматлит. 2002.

## Переход изолятор - квази-металл в никелатах $RNiO_3$ за пределами модели Хаббарда и теории функционала плотности

А.С. Москвин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

УДК: 537.9; 538.915

Переход изолятор–квази-металл (bad metal), наблюдаемый в ортоникелатах  $RNiO_3$  ( $R$  = редкая земля или иттрий  $Y$ ), считается каноническим примером перехода Мотта [1], традиционно описываемого в рамках  $U$ - $t$ -модели Хаббарда и теории функционала плотности (DFT). Однако ортоникелаты являются сильнокоррелированными ян-теллеровскими (JT) магнетиками, электронная структура которых не может быть адекватно описана в рамках модели Хаббарда и DFT-методов (LDA, LDA+U,...) [2,3]. Реальная диэлектрическая фаза никелатов является результатом зарядового диспропорционирования (CD) с образованием системы спин-триплетных ( $S=1$ ) электронных  $NiO_6^{10-}$  и бесспиновых ( $S=0$ ) дырочных  $NiO_6^{8-}$  кластерных центров, эквивалентной системе эффективных спин-триплетных композитных бозонов, движущихся в немагнитной решетке. Высокотемпературная квазиметаллическая NO фаза никелатов представляет собой неупорядоченную систему смешанной валентности, результат своеобразного «плавления» CD-фазы. Учитывая только зарядовую степень свободы, локальные ( $U$ ) и нелокальные ( $V$ ) корреляции, двухчастичный (бозонный) транспорт ( $t_b$ ) и используя модель зарядовых триплетов, псевдоспиновый формализм [2,3] и типичное для описания спиновых систем приближение эффективного поля [3], мы разрабатываем новую минимальную  $U$ - $V$ - $t_b$ -модель электронной структуры никелатов. Мы показываем существование двух типов CD-фаз, высокотемпературной классической парамагнитной CO-фазы с зарядовым упорядочением G-типа электронных и дырочных центров и низкотемпературной квантовой магнитоупорядоченной CDq-фазы с переносом зарядовой и спиновой плотности между электронными и дырочными центрами, "неопределенной валентностью" и значением спина для центров  $NiO_6$ . Фазовый переход изолятор–квази-металл в никелатах реализуется путем двух последовательных переходов первого рода  $CDq \rightarrow CO$  и  $CO \rightarrow NO$  с развитыми эффектами фазового расслоения. Модельная  $T_{cr}$ - $R$ -фазовая диаграмма воспроизводит основные черты экспериментальной фазовой диаграммы для ортоникелатов  $RNiO_3$  [4], что позволило дать надежную оценку параметров модели. Необычная магнитная структура ортоникелатов с  $\mathbf{k} = (1/4, 1/4, 1/4)$  определяется в рамках более сложной  $U$ - $V$ - $t_b$ - $J$ -модели как результат конкуренции сравнимых по величине ферромагнитного вклада бозонного двойного обмена и антиферромагнитного сверхобмена  $Ni^{2+}-Ni^{2+}$ . Развиваемая модель позволяет дать оптимальное описание влияния электрон-решеточного взаимодействия с активной в никелатах полносимметричной «дыхательной» (breathing) модой смещений ионов кислорода, а таким образом и эффектов давления, и изотоп-эффекта. Уникальной особенностью квантовой CDq-фазы никелатов является возможность формирования как волн спин-зарядовой плотности, так и необычной спин-триплетной сверхпроводимости.

*Работа выполнена при поддержке проекта FEUZ-2023-0017 Министерства Образования и Науки Российской Федерации.*

1. Imada M. et al. Metal-insulator transitions // Rev. Mod. Phys. 1998. V. 70. P. 1039.
2. Moskvin A. Jahn-Teller magnets // Magnetochemistry. 2023. V. 9. P. 224.
3. Moskvin A.S. Insulator – bad metal transition in  $RNiO_3$  nickelates beyond Hubbard model and density functional theory // JETPLett. 2025. (to be published).
4. Gawrylyuk D.J. et al. Distortion mode anomalies in bulk: Illustrating the potential of symmetry-adapted distortion mode analysis for the study of phase transitions // Phys. Rev. B. 2019. V. 100. P. 205137.

## **Валидация силовых полей в моделировании полимерных систем: применение к термостойким полиимидам на основе диамина ДАДФЭ**

***В.М. Назарычев, А.Ю. Добровский, Н.В. Лукашева***

*Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС, Санкт-Петербург*

*УДК:541.66, 541.68*

Полиимиды представляют собой гетероциклические полимеры, обладающие высокой термической и химической стойкостью, а также хорошими диэлектрическими свойствами. Однако их термические и механические свойства уступают свойствам материалов, созданных на основе металлов. Добавление наночастиц оксидов металлов ( $Al_2O_3$  и  $Fe_2O_3$ ) позволяет улучшить термические и механические свойства данных полимерных материалов путём создания полимерных нанокомпозитов. Однако молекулярные механизмы, ответственные за улучшение свойств полимерных нанокомпозитов при введении наночастиц оксидов металлов, до конца не изучены. Атомистическое компьютерное моделирование позволяет исследовать взаимодействие на границе раздела «полимер-нанонаполнитель» и предложить пути улучшения взаимодействия между поверхностью наночастиц оксидов металлов и полимерным связующим. Для проведения атомистического компьютерного моделирования необходимо корректно выбрать потенциалы внутри- и межмолекулярных взаимодействий как полиимидов, так и наночастиц оксидов металлов.

В данной работе представлены результаты валидации параметров атомистического компьютерного моделирования моделей трех термостойких полиимидов на основе диамина 4,4'-диаминодифенилоксида (ДАДФЭ) и трёх диангидридов бензол-1,2,4,5-тетракарбоновой кислоты (ПМ), бензол-1,2,4,5-тетракарбоновой кислоты (ДФО) и 1,3-бис-(3',4'-дикарбоксифеноксид)бензола (Р). Для этого были созданы модели на основе пяти наиболее распространенных классических силовых полей OPLS, Amber, Gromos, Charmm и UFF. Для каждого из полиимидов были созданы семь различных типов моделей:

1. Силовое поле OPLS-AA, метод расчета парциальных зарядов CM1A;
2. Силовое поле OPLS-AA, метод расчета парциальных зарядов HF/6-31G\* (RESP);
3. Силовое поле GAFF, метод расчета парциальных зарядов AM1-BCC;
4. Силовое поле GAFF, метод расчета парциальных зарядов HF/6-31G\* (RESP)
5. Силовое поле CgenFF;
6. Силовое поле Gromos54a7;
7. Силовое поле UFF, метод расчета парциальных зарядов QEq.

Основное компьютерное моделирование проводилось с использованием пакета молекулярной динамики Gromacs версии 2022.2. Для компьютерного моделирования были созданы молекулы полимеров со степенью полимеризации, равной 12. Начальная система представляла кубическую ячейку моделирования, в которую помещалось 27 полимерных цепей. После предварительного уравнивания данных полимеров было выполнено ступенчатое охлаждение полимеров от температур выше их температур стеклования до комнатной температуры. Далее образцы в стеклообразном состоянии были деформированы. В результате проведения расчетов были определены значения температур стеклования, коэффициентов объемного термического расширения, модуля упругости и предела текучести полимеров. Сравнительный анализ результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными позволил установить какие силовые поля наилучшим образом позволяют воспроизвести экспериментальные соотношения выбранных эксплуатационных характеристик полиимидов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (Соглашение № 24-73-10216, <https://rscf.ru/project/24-73-10216/>).*

## Динамика решетки квантового параэлектрика $\text{SrTiO}_3$ в широком диапазоне температур

*Д.П. Найдено, А.С. Константинов, А.С. Михейкин, Е.Д. Линник*

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

УДК: 538.913

Сегнетоэлектрические перовскиты представляют большой интерес благодаря их нелинейным оптическим и диэлектрическим свойствам в сочетании с выдающимися пьезоэлектрическими характеристиками. Понимание механизмов фазовых превращений, обеспечивающих эти функциональные свойства, является важной задачей физики конденсированного состояния. Одним из наиболее интересных перовскитных материалов является квантовый параэлектрик титанат стронция  $\text{SrTiO}_3$ . При понижении температуры в  $\text{SrTiO}_3$  возникает сегнетоэлектрическая неустойчивость, однако даже при температуре 0 К фазовый переход в полярное состояние не происходит. Предполагается, что отсутствие полярного перехода обусловлено беспорядочными квантовыми колебаниями полярных ионов, препятствующими их коллективному сегнетоэлектрическому смещению. Более того, при температуре  $\sim 105$  К,  $\text{SrTiO}_3$  претерпевает структурный сегнетоэластический переход из кубической фазы  $R\bar{3}m$  в неполярную тетрагональную фазу  $I4/mcm$ . Этот переход связан с антифазными вращениями кислородных октаэдров, приводящими к мультипликации элементарной ячейки. Важно отметить, что такие вращения конкурируют с сегнетоэлектрическим параметром порядка, влияя на свойства  $\text{SrTiO}_3$  и формируя сложную фазовую диаграмму. Однако точные механизмы полярных и неполярных превращений в  $\text{SrTiO}_3$  и родственных ему материалах остаются недостаточно изученными.

Целью данной работы является исследование роли полярных состояний в керамическом образце  $\text{SrTiO}_3$  в широком диапазоне температур. Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света исследована температурная зависимость полярных колебательных мод  $\text{TO}_2$  и  $\text{TO}_4$ , которые являются характеристическими признаками полярной фазы. Подробно изучены фазовые превращения вблизи структурного перехода из кубической в тетрагональную фазу. Показано, что зарождение сегнетоэлектрической фазы происходит в виде полярных нанокластеров, расширяющихся с изменением температуры.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-22-00478).*

**Дробовой шум в интерферометрах Ааронова-Бома**  
***Р.А. Ниязов<sup>1,2</sup>, И.В. Крайнов<sup>2</sup>, Д.Н. Аристов<sup>1,2</sup>, В.Ю. Качоровский<sup>2</sup>***

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

УДК: 538-915

В данной работе мы исследуем и сравниваем дробовой шум для двух типов интерферометров Ааронова-Бома: на основе «обычных» материалов и на основе 2D топологического изолятора. Дробовой шум связан с среднеквадратичным отклонением тока и является следствием дискретности электронов. Его измерение предоставляет информацию, недоступную из измерений кондактанса.

В «обычных» интерферометрах (ОИ) на основе «обычных» материалов электронные состояния моделируются одноканальными состояниями электрона. В геликоидальных интерферометрах (ГИ) на основе 2D топологического изолятора электронные состояния являются геликоидальными, что обеспечивает защиту от рассеяния на немагнитных примесях.

При относительно высоких температурах (температура много больше расстояния между уровнями энергии в кольце) была получена резонансная зависимость кондактанса и дробового шума от магнитного потока, пронизывающего интерферометр. Несмотря на большое количество работ, посвященных кондактансу интерферометров, новая физика дробового шума при высоких температурах, возникающего даже в простейшей модели одноканального интерферометра, осталась незамеченной научным сообществом. Необычное поведение кондактанса для интерферометров при высоких температурах было впервые предсказано в работе [1] и позднее подробно обсуждалось для «обычных» материалов. Однако обсуждение шума в этом случае отсутствует.

Наше исследование показывает, что влияние магнитного поля на дробовой шум в ОИ гораздо сильнее, чем в ГИ. При этом форма резонансов в дробовом шуме для ГИ зависит от параметров системы. Сравнение двух типов интерферометров показало, что зависимости фактора Фано (отношение дробового шума к полному току) от кондактанса совпадают при отсутствии внешнего магнитного поля и различаются при его наличии, что позволяет экспериментально отличить топологически нетривиальную систему [2].

В работе были рассмотрены случаи неравных плеч и неэквивалентных контактов для ОИ. Это важно для сравнения с экспериментом, так как практически невозможно изготовить интерферометр с равными плечами и идентичными контактами. Кроме того, с практической точки зрения случай высоких температур более интересен, так как расстояние между уровнями энергии в кольце имеет порядок 1 градуса Кельвина для реалистичных структур. В этом случае наблюдение интерференционных эффектов не требует чрезвычайно низких температур.

В ГИ интерференционные эффекты возникают только при наличии обратного рассеяния. Это может быть не только магнитный дефекта, но и любой тип рассеивателя, описываемого матрицей рассеяния общего вида. Одновременное измерение кондактанса и фактора Фано позволяет напрямую определить силу дефекта обратного рассеяния. Это может помочь идентифицировать неизвестные центры обратного рассеяния, которые экспериментально существуют в геликоидальных краевых состояниях.

1. Jagla E. A., Balseiro C. A.. Electron-electron correlations and the Aharonov-Bohm effect in mesoscopic rings // *Physical Review Letters*. 1993. V. 70. No. 5. P. 639–642.

2. Niyazov R.A., Krainov I.V., Aristrov D.N., Kachorovskii V.Yu.. Shot Noise in Helical Edge States in Presence of a Static Magnetic Defect // *JETP Letters*. 2024. V. 119. P. 372–379.

## **Влияние легирующих примесей и постоянного магнитного поля на формирование микроструктуры и свойств состаренного алюминиевого сплава В95пч**

***Д.Р. Нуретдинова, Ю.В. Осинская, С.Р. Макеев***

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королева, Самара*  
УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

Алюминий и сплавы на его основе занимают второе место по объемам производства и потребления после стали, что связано с их оптимальным сочетанием необходимых характеристик, таких как низкий удельный вес, высокая коррозионная стойкость и хорошие пластические свойства. С целью модификации данных свойств металлических сплавов используются различные методы термической обработки, внешние воздействия, такие как магнитное поле [1] и электрический ток [2], а также введение легирующих примесей [3].

В данной работе выясняется роль легирующих примесей и постоянного магнитного поля (ПМП) в формировании микроструктуры и изменение микротвёрдости технического алюминиевого сплава В95пч и модельных сплавов Al-Zn-Mg и Al-Zn при старении.

Старение закаленных образцов проводили при температуре 140 °С, времени старения 4 ч в ПМП напряженностью 557 кА/м и без него. Старение модельного алюминиевого сплава Al-Zn не проводили, так как комнатная растворимость Zn в Al составляет 4,4 вес. %, следовательно, при комнатной температуре весь Zn практически находится в  $\alpha$ -твёрдом растворе Al и пересыщение твёрдого раствора не происходит.

Метод металлографического анализа показал, что наложение ПМП на процесс старения исследуемых сплавов не приводит к изменению их размера зерна, при этом наблюдается разница в 1,1 раза между средним размером зерна технического и модельного сплавов, что приводит к значительному различию между значениями микротвёрдости этих сплавов.

Наложение ПМП на процесс старение алюминиевого сплава В95пч приводит к увеличению микротвёрдости до 21 %. Наблюдается, так называемый, отрицательный магнитоэластический эффект (МПЭ) [4]. Однако в модельном сплаве Al-Zn-Mg МПЭ практически не проявляется, все значения микротвёрдости лежат в пределах ошибки измерения. Установлено, что микротвёрдость модельного сплава в 1,5 раза меньше технического.

1. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. Влияние напряженности постоянного магнитного поля на процесс фазообразования в состаренном алюминиевом сплаве AlSi-Cu-Fe // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2022. № 2. С. 80-84.
2. Liu Y., Huang M., Ma Z., Zhan L. Influence of the low-density pulse current on the ageing behavior of AA2219 aluminum alloy // Journal of Alloys and Compounds. 2016. V. 673. P. 358-363.
3. Шуркин П.К., Белов Н.А., Мусин А.Ф., Аксенов А.А. Новый высокопрочный литейный алюминиевый сплав на основе системы Al-Zn-Mg-Ca-Fe, не требующий термообработки // Известия вузов. Цветная металлургия. 2020. № 1. С. 48-58.
4. Осинская Ю.В., Покоев А.В. Механизмы магнитоэластического эффекта в Cu-Be-сплавах // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2016. № Т. 21, № 3. С. 1207-1210.

## Исследование ортоферрита $\text{HoFeO}_3$ различными нейтронными методами

*А.К. Овсяников, О.В. Усманов, И.А. Зобкало*  
НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.911

Гольмиевый ортоферрит  $\text{HoFeO}_3$  упорядочивается в структуру искаженного перовскита с пространственной группой  $R\bar{3}m$  (№ 62), при этом орторомбическая структура  $R\bar{3}m$  образуется в результате противофазного наклона соседних октаэдров  $\text{FeO}_6$ . Магнитные свойства  $\text{HoFeO}_3$  обусловлены, главным образом, сочетанием обменного взаимодействия с антисимметричным взаимодействием Дзялошинского –Мория. Температура Нееля  $T_N = 660\text{K}$  [1]. Ниже этой температуры подсистема 3d-ионов упорядочивается в почти коллинеарную антиферромагнитную фазу  $\Gamma_4$  с небольшим скосом магнитных моментов подрешетки  $\text{Fe}^{3+}$ , что приводит к слабому ферромагнетизму в этой фазе. При дальнейшем понижении температуры в системе происходят два магнитных ориентационных перехода при температурах  $T_{\text{SR}1}=53\text{K}$  и  $T_{\text{SR}2}=35\text{K}$ .

Исследования методом дифракции нейтронов во внешнем магнитном поле показали наличие 8 различных магнитных фаз, которые были индуцированы или подавлены в зависимости от внешнего поля. С помощью измерений методом дифракции поляризованных нейтронов было обнаружено, что во время фазового перехода при  $T_{\text{SR}1}=53\text{K}$  во внешнем магнитном поле, приложенном вдоль оси  $b$  кристалла, упорядоченный магнитный момент подрешетки Fe вращается от кристаллографического направления  $c$  к  $a$  не только в плоскости  $ac$ , но и через ось  $b$ . Это означает, что приложенное поле нарушает орторомбическую симметрию, допуская некоторую намагниченность параллельно  $b$  в короткой температурной области [2].

При этом данные, полученные методом неупругого рассеяния нейтронов на монокристалле, демонстрируют, что спиновая динамика подсистемы Fe не изменяется при спин-переориентационных переходах. Наблюдаемый спектр магнитных возбуждений был проанализирован в рамках линейной спин-волновой теории. В рамках этого подхода были получены антиферромагнитные обменные взаимодействия ближайших соседей и следующих за ближайшими соседями для подсистемы Fe [3]. Температурная зависимость щели в спектре спиновых волн Fe указывает на температурную эволюцию параметров анизотропии. Также при магнитном фазовом переходе при  $T_{\text{SR}1}=53\text{K}$  изменяется энергия некоторых уровней кристаллического электрического поля иона  $\text{Ho}^{3+}$  [4].

1. А. К. Овсяников, О. В. Усманов, И. А. Зобкало. Обменные взаимодействия в подрешетки Fe в редкоземельных ортоферритах  $\text{RFeO}_3$  // ЖЭТФ. 2025. Т.167, В. 3, С. 379–384.
2. Ovsianikov A. et al. Breaking the Magnetic Symmetry by Reorientation Transition Near 50 K in Multiferroic Magnetocaloric  $\text{HoFeO}_3$  //IEEE Transactions on Magnetics. 2021. Т. 58. №. 2. С. 1-5.
3. Ovsyanikov A. K. et al. Neutron inelastic scattering study of rare-earth orthoferrite  $\text{HoFeO}_3$  //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2020. Т. 507. С. 166855.
4. Usmanov O. V. et al. Crystal Field Parameters and Magnetic Properties Correlations in Rare-earth Orthoferrite  $\text{HoFeO}_3$  //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. Т. 16. №. 6. С. 1041-1047.

## Моделирование эксперимента по малоугловому рассеянию на твёрдых наносферах на импульсных источниках нейтронов

К.А. Павлов<sup>1,2</sup>, Н.А. Коваленко<sup>1,2</sup>, А.И. Иванов<sup>3</sup>, А.И. Куклин<sup>3</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>3</sup> Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 538.9

Представлены результаты численного эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов на твердых наносферах размерами 8 нм и 80 нм на проектируемой установке, расположенной на компактном источнике нейтронов DARIA. Результаты эксперимента сравниваются с аналогичными результатами на установке ЮМО, расположенной на реакторе ИБР-2М в ОИЯИ (г. Дубна, Московская область, Россия). Для проведения численного эксперимента разработаны численные модели как проектируемой установки на компактном источнике нейтронов DARIA, так и действующей установки ЮМО на импульсном источнике ИБР-2М. В обоих случаях использован времяпролетный тип детектора нейтронов, в котором реализовано радиальное пространственное разрешение посредством концентрических колец, интегрирующих интенсивность рассеяния по азимутальному углу. В случае установки МУРЕНА@DARIA детектор представляет собой систему из 38 колец с переменным радиальным шагом и общим радиусом 50 см. В случае установки ЮМО@ИБР-2М детекторная система состоит из 2 детекторов, находящихся на расстоянии 4.5 м и 13 м от образца, состоящих из 8 колец каждый. Показано, что схема реализации метода МУРН, предложенная для реализации на источнике DARIA, имеет лучшее разрешение и такой же диапазон по переданному импульсу по сравнению с ЮМО@ИБР-2М, но проигрывает порядок по светосиле. Для реализации метода установка МУРЕНА@DARIA использует лишь часть спектра нейтронного излучения в диапазонах длин волн  $2 \div 8 \text{ \AA}$  или  $6 \div 12 \text{ \AA}$  с разрешением по длине волны  $\Delta\lambda \approx 0.14 \text{ \AA}$ . Такое решение является ключевым для маломощного источника, так как позволяет использовать максимальную возможную частоту повторения импульсов, и, таким образом, поднять среднюю по времени мощность/интенсивность источника. Показано, что метод может быть реализован со светосилой до  $10^6 \text{ н/(с}\cdot\text{см}^2)$  в диапазоне переданных импульсов  $3 \cdot 10^{-3} \div 0.5 \text{ \AA}^{-1}$  с разрешением  $3 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ .

## Атомноподобный базис: процедура оптимизации в пакете SIESTA

*А.Я. Переходюк, Е.В. Аникина*

*Южно-Уральский государственный университет, Челябинск*

УДК: 004.942-539.2

Исследования свойств материалов с помощью теории функционала электронной плотности могут быть достаточно быстрыми, если использовать программные решения, где имплементированы приближения, заметно снижающие требования к вычислительным ресурсам. Программный пакет SIESTA [1] – одно из таких решений. В нем процедура численного моделирования требует заметно меньших мощностей, в том числе за счет использования атомноподобного базиса. Но быстрота расчетов с таким базисом «компенсируется» необходимостью проведения подготовительных расчетов по определению оптимальных параметров базиса, обеспечивающих требуемую точность результатов.

При моделировании слабосвязанных систем важным будет еще и выбор приближения для обменно-корреляционного функционала. При этом не ясно, насколько сильно зависят оптимальные параметры базиса от выбранного функционала. С целью прояснить этот вопрос мы моделировали структуру монослоя  $C_2N$  в разных приближениях обменно-корреляционного функционала (GGA, LDA и vdW). В гексагональной ячейке с параметром трансляции  $8,32 \text{ \AA}$  содержалось 12 атомов углерода и 6 атомов азота. Разбиение обратного пространства на  $7 \times 7 \times 1$   $k$ -точек и разбиение прямого пространства с параметром MeshCutoff  $4,8 \text{ кэВ}$  позволили получить погрешность полной энергии системы менее  $10 \text{ мэВ}$ .

В процессе оптимизации всех валентных орбиталей системы ( $C^{2s}$ ,  $C^{2p}$ ,  $N^{2s}$ ,  $N^{2p}$ ) в DZP базисе выяснилось, что почти во всех использованных приближениях оптимальные параметры совпадают. Единственное отличие обнаружилось в радиусе модифицированной орбитали для  $N^{2p}$  в приближении локальной электронной плотности. Оно составило лишь  $0,11 \text{ \AA}$ .

*Работа выполнена в рамках грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее».*

1. Soler J.M. et al. The SIESTA method for *ab initio* order- $N$  materials simulation // J. Phys. Condens. Matter. 2002. V. 14. No. 11. P. 2745–2779.

## Зависимость фазового состава и свойств аморфных сплавов $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ и $\text{Fe}_{80,5}\text{P}_{18,4}\text{Nb}_{1,1}$ от режимов термической обработки

*Н.В. Пермяков<sup>1</sup>, М.А. Каширин<sup>2</sup>, Е.К. Белонозов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж

<sup>2</sup>Воронежский государственный технический университет, Воронеж

УДК: 539.213.27, 538.911, 54.03

Кристаллизация аморфных сплавов – эффективный подход к созданию сплавов с заданными свойствами. Цель работы – найти закономерности фазовых превращений в аморфных сплавах  $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$  и  $\text{Fe}_{80,5}\text{P}_{18,4}\text{Nb}_{1,1}$ . Ленты аморфных сплавов подвергали следующим вариантам термической обработки (ТО): 1) 523, 673, 773 и 873 К (10 мин) в вакууме (Anton Paar НТК-1200N); 2) на воздухе (печь SNOL); 3) при 523 и 673 К в токе кислорода. Фазовый состав контролировали методом РФА (Thermo ARL X'tra). По данным РФА до ТО сплавы имели аморфную структуру (гало в диапазоне  $2\theta = 38-52^\circ$ ).

Для системы  $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$  установлено: ТО при 673 К в токе кислорода приводит к образованию кристаллитов  $\alpha\text{-Fe}$ ,  $\text{Fe}_3\text{P}$  и  $\text{Fe}_2\text{P}$  (преимущественно) [1]; ТО в вакууме при 773 и 873 К приводит к преобладанию  $\text{Fe}_3\text{P}$ ; при 873 К дополнительно фиксировали кристаллиты  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ; ТО на воздухе при 773 и 873 К наблюдали преобладание  $\text{Fe}_2\text{P}$ . Образования фазы  $\text{Fe}_3\text{Si}$ , как при ТО в вакууме, не наблюдали.

В сплаве  $\text{Fe}_{80,5}\text{P}_{18,4}\text{Nb}_{1,1}$  кристаллические фазы  $\alpha\text{-Fe}$ ,  $\text{Fe}_3\text{P}$  и  $\text{Fe}_2\text{P}$  возникают при 523 К. ТО в вакууме при 673 К уменьшает долю  $\text{Fe}_2\text{P}$  и увеличивает  $\text{Fe}_3\text{P}$ . При 773 и 873 К происходит образование кристаллитов  $\text{Fe}_2\text{Nb}$ .

ТО  $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$  на воздухе и в токе кислорода инициирует синтез  $\text{Fe}_2\text{P}$ , в вакууме формируются  $\text{Fe}_3\text{P}$  и  $\text{Fe}_3\text{Si}$ , следовательно, кислород реагируя с железом сокращает его долю, вступающую в реакцию с P и Si, что открывает перспективы для управления фазовым составом сплавов систем Fe-P-Si. Кристаллизация сплава  $\text{Fe}_{80,5}\text{P}_{18,4}\text{Nb}_{1,1}$  возможна при 523 К и завершается при 700 К образованием  $\alpha\text{-Fe}$ ,  $\text{Fe}_3\text{P}$  и  $\text{Fe}_2\text{P}$ .

1. Микропластичность аморфного и кристаллизованного сплава  $\text{Fe}_{78}\text{P}_{20}\text{Si}_2$ . / В.М. Иевлев [и др.] // Физика твердого тела. 2019. Т 61. № 7. С. 1290–1297.

## **In situ** изменение электросопротивления кристаллов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ при воздействии рентгеновского излучения

***П.Л. Подкур<sup>1</sup>, Н.А. Башлыков<sup>1,2</sup>, И.С. Волчков<sup>1</sup>, Б.С. Роцин<sup>1</sup>, И.О. Кошелев<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва

УДК: 53.09, 544.22, 621.315.592.3

Известно, что внешние воздействия способны оказывать влияние на множество свойств материалов, таких как электрическое сопротивление, твердость, состояние поверхности. Происходящие в результате изменения делятся на *in situ*, необратимые изменения и изменения с длительной релаксацией. Учет и изучение происходящих изменений важны с точки зрения разработки методов постростового улучшения характеристик функциональных материалов, и с точки зрения прогнозирования стабильности работы изделий на основе этих материалов.

Объекты исследования – кристаллы  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ , где  $x < 0,04$ , выращенные модифицированным методом Обреимова-Шубникова в Институте Кристаллографии. Кристаллы отличаются примесным составом и величиной « $x$ ». Состав кристаллов был определен методами масс-спектрометрии и энергодисперсионной спектроскопии.

В работе измерялось электрическое сопротивление объектов кристаллов во время воздействия на них рентгеновского излучения, а также до и после этого. Перед проведением эксперимента на двух противоположных поверхностях кристаллов, образованных скалыванием по плоскостям спайности, были нанесены золотые контакты. В качестве источника рентгеновского излучения использовалась вольфрамовая рентгеновская трубка со следующими ускоряющими напряжениями и силами тока на ней: 45кВ – 30мА, 45 кВ – 15мА, 30 кВ – 30 мА, 30 кВ – 15 мА. Показано, что электросопротивление исследуемых кристаллов резко уменьшается при воздействии на них рентгеновского излучения. Эффект обуславливается генерацией фототока в кристаллах  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ . Эффект отличается в зависимости от величин ускоряющего напряжения и силы тока на рентгеновской трубке, а также в зависимости от состава исследуемых кристаллов. Показано, что наблюдаемый эффект происходит *in situ*. Динамика изменения электросопротивления при воздействии на кристаллы рентгеновского излучения, а так же релаксация наблюдаемого эффекта, зависит от состава образцов. Причины, а также вклад примесного состава образцов в наблюдаемый эффект обсуждаются.

Результаты данной работы полезны для постростового улучшения свойств кристаллов, что является важной задачей для микроэлектроники и производства сенсоров различного назначения, так как на данный момент выращивание кристаллов необходимого качества является сложным. Кроме того, работа расширяет представление о стабильности работы устройств на основе  $CdZnTe$ , перспективного материала для изготовления элементов высокоточных приборов, в условиях различных внешних воздействий.

*Работа выполнена при поддержке гос. задания НИЦ «Курчатовский Институт».*

## **Измерение электрического потенциала генерируемого частицами ниобата лития при изменении температуры**

***А.А. Подойницын, А.Н. Олейник, М.Э. Гилья***

*<sup>1</sup>Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород  
УДК:53.096, 537.39, 537.32, 538.9*

Пироэлектрический эффект, возникающий в некоторых диэлектриках (например, ниобат лития,  $\text{LiNbO}_3$ ) при изменении температуры, находит применение в фотонике. Однако, в данный момент мало данных о напряжении, генерируемом пироэлектрическими кристаллами, а также о параметрах, от которых оно зависит. Поэтому, изучение и накопление данных о зависимости напряжения от различных конфигураций, поможет повысить эффективность приборов на основе пироэлектрического эффекта и найти ему применение в таких областях науки, как биология и энергетика.

Были проведены эксперименты с отдельными частицами ниобата лития с характерным размером 200-1000 мкм, а также ансамблем частиц. В случае экспериментов с одной частицей, замечена корреляция между объемом частицы и продолжительностью наблюдаемого электрического импульса. Аналогично, наблюдается корреляция между полярностью напряжения и направлением изменения температур (нагрев, охлаждение), что доказывает пироэлектрическую природу наблюдаемого потенциала. Между амплитудами изменения температуры и генерируемого потенциала наблюдается корреляция близкая к линейной.

В случае экспериментов с ансамблем частиц, получены следующие наблюдения: с ростом напряжения возрастает интенсивность движения частиц. Также, ориентация частиц в поле происходит в определенном направлении (по часовой стрелке или против). При нарушении положения равновесия частицы, кратчайшим путем она уже не может вернуться и из-за большой неустойчивости происходит значительное перемещение частицы.

Для ускорения обработки данных, полученных при разных параметрах экспериментов, была разработана программа, которая ищет электрические импульсы, вычисляет параметры пика (такие как амплитуда и FWHM) и соотносит их с соответствующим изменением температуры в этот промежуток времени.

## Исследование температурной зависимости параметров контактов Ni к гетероструктурам SiC/Si

*Н.В. Полонский<sup>1,2</sup>, П.И. Гайдук<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет Институт ядерных проблем, Минск  
УДК:621.382.002, 538.9

Тонкие пленки карбида кремния на кремниевой подложке (SiC/Si) являются перспективными гетероструктурами для производства уникальных приборов микроэлектроники [1]. Важной частью таких приборов являются контакты Шоттки. Вместе с тем, различные структурные дефекты и промежуточные слои на границе раздела (ГР) Me/SiC могут приводить к неоднородности высоты барьера Шоттки (НВБ) ( $\Phi_b$ ) по ГР. В частности, НВБ может проявляться в виде зависимости барьера Шоттки ( $\Phi_b$ ) от температуры. В связи с чем исследования высоты барьера Шоттки при разных температурах представляются актуальными и важными для конструирования приборов на основе SiC/Si.

Гетероструктуры SiC/Si формировали методом молекулярно-лучевой эпитаксии на пластинах кремния (111) n-типа проводимости. Толщина слоев SiC составляла около 30 нм. Слои Ni толщиной 45 нм наносили методом электронно-лучевого испарения, после чего с помощью фотолитографии изготавливали контакты площадью 0,0027 см<sup>2</sup>. Омические контакты формировали путем втирания галлий-алюминиевой пасты на обратную сторону образцов. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) измеряли в диапазоне температур 286–448К на приборе ИППП-1.

Значения  $\Phi_b$  рассчитывали из ВАХ структур Ni/SiC/Si с применением метода Чонга. Установлено, что при повышении температуры с 286 до 448К высота барьера Шоттки увеличивается с 0,67 эВ до 0,73 эВ. Учитывалось, что значения  $\Phi_b$  подчиняются гауссовскому распределению со средней величиной барьера ( $\Phi_{bm}$ ) и средноквадратичным отклонением ( $\sigma$ ) [2]. Из зависимости  $\Phi_b$  от  $1/(2kT)$  получены значения  $\Phi_{bm}$  и  $\sigma$  равные соответственно 0,82 эВ и 86 мВ. Значение постоянной Ричардсона определялось из зависимости  $\ln(I_0/T^2)$  от  $0,5\sigma^2q^2/(kT)^2$  [2] и составляло величину 43,21 А/(см<sup>2</sup>К<sup>2</sup>), что очень близко к теоретическому значению (37,92 А/(см<sup>2</sup>К<sup>2</sup>)). Из анализа полученных результатов, можно сделать вывод, что увеличение  $\Phi_b$  с ростом температуры в структурах Ni/SiC/Si является следствием гауссовского распределения высоты барьера.

*Исследования выполнены в рамках проекта 3.1.2 ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» (№ ГР 20212702).*

1. Ferro, G. 3C-SiC Heteroepitaxial Growth on Silicon: The Quest for Holy Grail // Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. 2015. №76. P. 40-56.
2. Chung G.S. et al. Electrical characterization of Au/3C-SiC/n-Si/Al Schottky junction // Journal of Alloys and Compounds.2014. V. 507. P. 508-512.

## Анализ фазового состава и электрических свойств пленок Cu-Si, полученных методом ионно-лучевого распыления

И.В. Польшин<sup>1</sup>, Е.С. Керсновский<sup>1</sup>, С.А. Ивков<sup>1</sup>, А.И. Чукавин<sup>1,2</sup>, А.Е. Никонов<sup>3</sup>, А.В. Ситников<sup>3</sup>,  
К.А. Барков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж

<sup>2</sup>УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

<sup>3</sup>Воронежский государственный технический университет, Воронеж

УДК:538.9

Система медь-кремний имеет широкий спектр технологических применений, в том числе, в микроэлектронике [1] и катализе [2]. Помимо этого, наноккомпозит Cu-Si представляет интерес в производстве нового типа литий-ионных аккумуляторов, так как встраивание наночастиц меди в аморфную матрицу Si способствует повышению структурной стабильности электрода [3, 4]. Однако, для получения такого рода материалов используются высокоэнергетические методы, из-за чего могут образовываться различные метастабильные фазы. Именно поэтому исследования фазового состава пленок медь-кремний важны и актуальны.

В данной работе проведены исследования фазового состава пленок Cu-Si, полученных методом ионно-лучевого распыления составной мишени. Элементный состав определялся методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, энергодисперсионной спектроскопии, а также обратного Резерфордского рассеяния. Фазовый состав определялся методами ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской дифракции.

Анализ формирования кристаллических фаз в пленках Cu-Si показал, что в пленках с низким содержанием Cu (~9 ат.%) начинает образовываться фаза  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si, что видно по наличию рефлексов (2 -1 0) и (1 0 3) на дифрактограмме. Увеличение содержания меди до ~32 ат.% приводит к росту интенсивности этих рефлексов и появлению новых отражений от плоскостей (3 0 0) и (3 -1 3) фазы  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si. Помимо этого, на дифрактограммах начинают появляться отражения от плоскостей (2 0 0) Cu<sub>2</sub>O. Дальнейшее увеличение содержания меди в пленке приводит к росту интенсивности рефлексов фазы  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si.

Для анализа размеров кристаллитов фазы  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si были отдельно сняты дифрактограммы самых интенсивных рефлексов (2 -1 0) и (1 0 3) в области углов  $2\theta$  43-47°, и по формулам Дебая-Шеррера и Уильямсона-Холла были произведены расчеты. Для пленок Cu-Si с содержанием Cu ~20 ат.% размер кристаллитов составил ~30 – 35 нм. В то же время, по данным УМРЭС в пленках Cu-Si наряду с фазой Cu<sub>3</sub>Si обнаруживается аморфный кремний и субоксиды кремния. При этом содержание субоксидов кремния увеличивается с ростом содержания меди в составе пленки, что приводит к росту удельного сопротивления на два порядка.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.*

1. Liu Y. et al. Diffusion barrier performance of reactively sputtered Ta-W-N between Cu and Si //Microelectronic engineering. – 2004. – V. 75. – №. 3. – P. 309-315
2. Selamoglu N. et al. Copper-catalyzed etching of silicon by F2: Kinetics and feature morphology //Journal of applied physics. – 1988. – Т. 64. – №. 3. – С. 1494-1498.
3. Ahn H. J. et al. Formation and characterization of Cu-Si nanocomposite electrodes for rechargeable Li batteries //Journal of power sources. – 2006. – V. 163. – №. 1. – P. 211-214.
4. Li H. et al. The crystal structural evolution of nano-Si anode caused by lithium insertion and extraction at room temperature //Solid State Ionics. – 2000. – V. 135. – №. 1-4. – P. 181-191.

**Теоретическое моделирование взаимодействия полиамфолитных нанокolloидных частиц с рН-чувствительными полиэлектролитными щетками: приближение самосогласованного поля**

***Т.О. Попова<sup>1,2</sup>, М.Ю. Лактионов<sup>2</sup>, Е.Б. Жулина<sup>1</sup>, О.В. Борисов<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург

УДК: 50.501, 538.9

Взаимодействие полиэлектролитных (ПЭ) щеток с глобулярными белками играют важную роль во многих биологических процессах, а также находят практическое применение для адресной доставки лекарств, создания бионанореакторов. Особый интерес представляет абсорбция белков на одноименно заряженных ПЭ щетках [1]. Рассмотрено взаимодействие плоской щетки слабого анионного ПЭ и модельного белка с заданным соотношением катионных/анионных групп и их рК. Исследование проводится в рамках приближения самосогласованного поля Пуассона – Больцмана. Анализируются зависимости абсорбции белка от: (1) рН, (2) ионной силы, (3) параметров щетки и белка. Движущей силой абсорбции является перераспределение заряда катионных и анионных групп на поверхности белка под действием электростатического поля, создаваемого щеткой. Профили свободной энергии ионизации для щеток сильных и слабых ПЭ качественно различаются, что приводит к различным эффектам абсорбции. Особый интерес представляет случай, когда рК щетки  $\approx$  рI белка. В этом диапазоне и белок, и щетка наиболее чувствительны к изменению рН, что вызывает заметные изменения их зарядов и силы абсорбции. В зависимости от рН выделяют случаи: (1) рН > рI  $\approx$  рК — белок и щетка заряжены одноименно, абсорбция схожа для сильных и слабых ПЭ щеток. (2) рН < рI  $\approx$  рК — белок и щетка имеют противоположные заряды, щетка слабого ПЭ частично разряжается, что приводит к специфическим особенностям абсорбции. В результате разработана модель для предсказания абсорбции белков рН-чувствительными щетками.

*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 23–13–00174.*

1. Popova T.O., Borisov O.V., Zhulina E.B. Polyelectrolyte Brushes with Protein-Like Nanocolloids // *Langmuir*. 2024. V. 40. No. 2. P. 1232–1246.

## Рентгенографическое исследование структуры целлюлозных гидрогелей, синтезированных на основе бумажной макулатуры

А.И. Прусский<sup>1</sup>, В.В. Киселев<sup>1,2</sup>, О.В. Токко<sup>1</sup>, А.В. Кадетова<sup>1</sup>, Н.Е. Котельникова<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

<sup>2</sup> Карельский научный центр РАН, Петрозаводск

<sup>3</sup> Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург

УДК: 538.9

В настоящее время к числу актуальных экологических проблем относится утилизация отходов промышленности и жизнедеятельности человека. В ряде публикаций было показано, что бумажная макулатура, которая является целлюлозосодержащим материалом, может быть эффективно использована для получения функциональных материалов, в том числе гидрогелей, свойства которых сопоставимы со свойствами материалов, синтезированных на основе растительных целлюлоз [1,2]. Гидрогели — это трехмерные структуры, способные поглощать и удерживать большое количество воды, что делает их востребованными в биомедицине, фармации и других областях. Структура и морфология гидрогелей играют определяющую роль в их применении. Данное исследование посвящено изучению структуры и морфологии гидрогелей, выделенных из бумажной макулатуры, рентгенографическим методом, и их сравнению с образцами нативной и модифицированной целлюлозы.

В работе исследовали образцы гидрогелей в разном структурном состоянии, полученные из порошковой целлюлозы: образец №1, характеризующийся аморфной картиной рассеяния, и образец №2, кривая распределения которого коррелирует с рентгенограммой нативной целлюлозы. Образцы были синтезированы в лаборатории физической химии полимеров Филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС (Санкт-Петербург). Регистрацию рентгенограмм осуществляли на дифрактометре типа ДРОН, используя  $\text{CuK}\alpha$  и  $\text{MoK}\alpha$  излучения в геометрии на отражение и прохождение.

Для характеристики надмолекулярной структуры образцов рассчитали степень кристалличности (СК), размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) и площадь поперечного сечения (ПС) элементарных фибрилл в плоскости  $ab$ . СК была рассчитана модифицированным методом Руланда [3] и составила для образца №1 32%, для образца №2 – 48%.

Для характеристики формы ПС элементарных фибрилл использовали схемы, позволяющие рассчитать площадь образцов  $S$ ,  $\text{Å}^2$ . Для образца №1  $S$  составила  $351 \text{ Å}^2$ , что соответствует  $5 \times S_{ab}$ , для образца №2  $S = 2776 \text{ Å}^2$ , что соответствует  $43 \times S_{ab}$ , где  $S_{ab}$  – площадь ПС элементарной ячейки целлюлозы  $1\beta$  в плоскости  $ab$ , которая равна  $64.5 \text{ Å}^2$  [3].

Анализ надмолекулярной структуры гидрогелей в разном структурном состоянии показал, что значения СК и ОКР образцов ниже по сравнению с образцами немодифицированной природной целлюлозы I и мерсеризованной целлюлозы II [3]. Такие значения могут быть связаны с разупорядочением структуры целлюлозы в процессе модификации и формирования гидрогеля, что приводит к увеличению аморфной составляющей.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00475, <https://rscf.ru/project/25-22-00475/>*

1. Kaur P. et al. Waste to high-value products: The performance and potential of carboxymethylcellulose hydrogels via the circular economy // Cellulose. 2023. T. 30. №. 5. С. 2713-2730.
2. Saurov S. K., Svedström K., Kotelnikova N. Comparative study of powder celluloses and cellulose hydrogels by WAXS method. Impact of measurement technique and computation on variability of results // Cellulose Chem. Technol. 2019. Vol. 53, No. 9-10. P. 885-896.
3. Прусский А. И., Котельникова Н. Е. Использование модифицированного метода Руланда для расчета степени кристалличности образцов целлюлозы // BIOAsia-Altai. 2024. Т. 4. №. 1. С. 173-177.

**Измерение спинволновой динамики в геликоидальных магнетиках методом  
малоуглового рассеяния нейтронов**

***К.А. Пшеничный, С.В. Григорьев***  
НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.9

Соединения  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  и  $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$  являются твердыми растворами с кристаллической структурой B20. Эти соединения магнитно упорядочиваются ниже  $T_C$  в спиновую спиральную структуру с малым вектором распространения  $k$  [1]. По аналогии с магнитной структурой  $\text{MnSi}$  и  $\text{FeGe}$  спиновая спираль индуцируется антисимметричным обменным взаимодействием Дзялошинского-Мория (ДМ), обусловленным отсутствием центра симметрии в расположении магнитных атомов марганца, железа и кобальта (модель Бака-Йенсена). Согласно этой модели спиральный порядок стабилизируется за счёт обычного обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория, при этом волновой вектор определяется как  $k = SD/A$ , где  $A$  — жёсткость спиновых волн,  $D$  — коэффициент взаимодействия Дзялошинского-Мория. С приложением магнитного поля формируется однодоменная коническая структура, которая остается стабильной вплоть до критического поля  $H_{c2}$ , когда происходит переход из конического состояния в ферромагнитное, при этом  $\mu_0 H_{c2} = Ak^2$  [2].

Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов нами были экспериментально измерены такие параметры магнитной системы как волновой вектор спирали  $k$ , критическое поле  $H_{c2}$ , и жесткость спиновых волн в широком температурном диапазоне в соединениях  $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$  с  $x = 0.0, 0.03, 0.06, 0.09$  [3],  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  с  $x = 0.25, 0.30, 0.50$  [4], и соединении  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$ . Эксперименты показали, что модель Бака-Йенсена на количественном уровне хорошо описывает характерные параметры системы во всем температурном диапазоне от 0 до критической температуры  $T_C$ .

1. С. Григорьев и др. // Физика твердого тела. 2010. Т. 52, No 5. С. 852.
2. Maleyev, S. V. // Phys. Rev. B. 2006. No. 73. P. 174402.
3. Grigoriev S.V., Sukhanov A. S., Altynbaev E. V., Siegfried S.-A., Heinemann A., Kizhe P., and Maleyev S.V. // Phys. Rev. B 2015. V. 92. P. 220415.
4. Grigoriev S.V., Pschenichnyi K.A., Altynbaev E.V., Siegfried S.-A., Heinemann A., Honnecker D., Menzel D. // Phys. Rev. B 2019. V.100. P. 094409.

## Получение тонких пленок CdZnTe комплексом термических методов.

П.В. Резникова<sup>1,2</sup>, И.О. Кошелев<sup>1</sup>, И.С. Волчков<sup>1</sup>, В.М. Каневский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>МИРЭА – Российский технологический университет, Москва

УДК: 539.216.2; 548.522; 548.527; 538.9

Теллурид кадмия используется в качестве элементов солнечных панелей за счет ширины запрещенной зоны (~1.45 эВ), а также в качестве материалов для детекторов, за счет электрических свойств в широком диапазоне (~1– 1\*10<sup>9</sup> Ом\*см) [1].

Применение тонких пленок CdTe, легированных Zn, позволяет получить материал, CdZnTe, с увеличенной запрещенной зоной (от 1.50 до 1.65 эВ) и повышенным удельным сопротивлением (10<sup>11</sup> Ом\*см), с дальнейшим возможным применением в качестве материала для создания элементов детекторов ионизирующего излучения, способных эффективно работать при комнатной температуре.

В данной работе тонкие пленки CdTe были получены методом высоковакуумного термического распыления из газовой фазы на сапфировых подложках с-ориентации, Zn был нанесен методом магнетронного распыления на пленку CdTe, в дальнейшем проводилась термическая обработка в вакууме.

Напыление Zn на пленки CdTe магнетронным методом происходило при следующих условиях: давление Ar 0,5 Па, расстояние между мишенью и подложкой 12 см, мощность распыления 100 Вт, напряжение 350 В, сила тока 0,3 А, время напыления 30 сек, чистота Zn 99,99%.

Характеристики процесса вакуумного термического испарения: вакуум 10<sup>-8</sup>-10<sup>-7</sup> мбар, температура источника от 672°C до 690°C, температура подложки 250 °C, время напыления составляло от 60 до 180 минут.

Полученные образцы были изучены методами рентгенофазового анализа, атомно-силовой микроскопии, растровой электронной микроскопии и энерго-дисперсионной спектроскопии. Электрические свойства были исследованы двухконтактным и четырехконтактным методами, а оптические свойства (пропускание) - методом оптической спектроскопии.

По результатам исследования пленок комплексом методов было определено, что образуется фаза CdZnTe, среднее соотношение распределения Cd и Te по длине образцов 52 и 48 ат.%. В зависимости от условий напыления тонких пленок изменялась толщина образцов от 50 до 205 нм, а также среднеквадратичное значение шероховатости от 7 до 175 нм, а также были исследованы фотоэлектрические и электрические свойства образцов.

Результаты работы позволяют оптимизировать методику получения тонких пленок CdZnTe, перспективным для применения в качестве элементов детекторов ионизирующего излучения.

*Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Иванов А. Технология напыления тонких пленок // Современная светотехника. 2010., С.45-48.

**Синтез сложных алюминиевых сплавов с использованием лазерного излучения**  
***С.О. Рогачев, Е.А. Наумова, С.В. Чернышихин, Л.В. Федоренко, В.Е. Баженов, Н.Ю. Табачкова***  
*НИТУ МИСИС, Москва*

УДК: 621.375.826: 669.715

Сегодня алюминий и его сплавы являются наиболее технологичным сырьем для вторичной переработки [1, 2]. В последнее время наблюдается тенденция роста потребления вторичных алюминиевых сплавов и внутри РФ [3]. Крупнейшие потребители алюминия активно внедряют в свое производство вторичные сплавы, заменяя ими более дорогостоящие первичные. Значительная доля вторичного металлического сырья имеет вид стружки или порошка. Однако переработка смешанного алюминиевого лома связана со значительными трудностями из-за вхождения в его состав разных химических элементов в количествах, обычно считающихся вредными в алюминиевых сплавах, что не позволяет использовать традиционные методы переработки. Одно из новых многообещающих направлений в переработке – использование вторичных порошков для аддитивных технологий [4]. В данной работе изучена возможность использования для этой цели гетерогенных порошков алюминиевых сплавов.

Смесь вторичных порошков алюминиевых сплавов, содержащих Mg, Co, Fe, Ce, Si, Zn и Ni с суммарным количеством около 6 мас. %, была консолидирована с помощью технологии селективного лазерного плавления (СЛП). Установлен оптимальный режим печати, обеспечивающий минимальную пористость синтезированного материала: мощность лазера 350 Вт, скорость сканирования 1800 мм/с, шаг штриховки 80 мкм и толщина слоя 30 мкм. Синтезированный материал характеризуется наличием высоких внутренних напряжений, что приводит к его пониженной пластичности. Последующий отжиг в интервале температур от 200 до 400 °С эффективно снижает внутренние напряжения, позволяя достичь превосходного сочетания механических свойств сплава: предел прочности от 266 до 324 МПа и относительное удлинение от 19 до 22 %. Такие свойства обеспечиваются формированием ультрадисперсной ячеистой микроструктуры, образованной цепочками наноразмерных частиц алюминидов и иных фаз. Полученные результаты открывают новые возможности для переработки смешанного алюминиевого лома с использованием аддитивных технологий.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-79-30025, <https://rscf.ru/en/project/19-79-30025/>*

1. R. Khanna, Y.V. Konyukhov, M. Ikram-ul-haq, I. Burmistrov, R. Cayumil, V.A. Belov, S.O. Rogachev, D.V. Lebyo, P.S. Mukherjee // An innovative route for valorising iron and aluminium oxide rich industrial wastes: Recovery of multiple metals // Journal of Environmental Management. 2021. V. 295 P. 113035.
2. B. Sun, L. Guo, Z. Wang, X. Lan, Z. Guo. Sustainable recycling of pure aluminum from waste chips under supergravity-enhanced separation: A cleaning process // Sustainable Materials and Technologies. 2024. V. 42. P. e01148.
3. K.V. Nikitin, A.V. Sokolov, V.I. Nikitin, V.N. D'yachkov. Application of Recycling Products of Aluminum Slags in Investment Casting Technology // Russian Journal of Non-ferrous Metals. 2019. V. 60. P. 41–51.
4. V. Yakubov, H. Ostergaard, S. Bhagavath, C. Lun, A. Leung, J. Hughes, E. Yasa, M. Khezri, S.K. Loschke, Q. Li, A.M. Paradowska. Recycled aluminium feedstock in metal additive manufacturing: A state of the art review // Heliyon. 2024. V. 10. P. e27243.

## Магнитные и сверхпроводящие свойства $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$

*Н.А. Сафина, А.Ю. Левахова, А.В. Садаков*

*Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов  
им. В.Л. Гинзбурга ФИАН, Москва*

УДК:538.9

Долгое время считалось, что магнетизм должен подавлять сверхпроводимость, так как магнитные атомы обладают большим магнитным моментом. Динамичному формированию куперовских пар должно противостоять статистическое упорядочение электронных спинов. На практике же в магнитных соединениях мы видим не антагонизм, а сосуществование сверхпроводимости и магнетизма. Среди нового класса железосодержащих сверхпроводников этим уникальным свойством обладает  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ , который был впервые получен в 2016 году группой японских ученых [1]. Чтобы лучше понять природу этого явления, необходимо экспериментально описать как можно больше соединений, обладающих данным свойством. Именно поэтому мы исследуем железосодержащий пниктид  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ . В частности, его магнитные и сверхпроводящие свойства. Кристаллическая структура  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  представляет собой надстройку из двух блоков:  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{RbFe}_2\text{As}_2$ , чередующихся вдоль кристаллографической оси  $c$ . При этом соединение  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  является несверхпроводящим, а  $\text{RbFe}_2\text{As}_2$  имеет температуру сверхпроводящего перехода  $\sim 2,6$  К. Атомы  $\text{Eu}$  имеет ферромагнитное упорядочение внутри слоя и антиферромагнитное между слоями. Угол поворота между слоями был получен численно и составляет  $90^\circ$  [2,3].

Монокристаллы  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  были получены из расплава собственного компонента  $\text{RbAs}$  (“self-flux”) [4]. Синтез соединения со стехиометрическим составом 1144 достаточно сложен, так как фаза 1144 конкурирует с фазой 122. Малейшие флуктуации при синтезе приводят к структурным нестабильностям. В рамках исследования была измерена магнитная восприимчивость двух образцов в диапазоне от 40 до 5 К. На первой полученной зависимости магнитной восприимчивости от температуры наблюдается сверхпроводящий переход при  $T_c \approx 36$  К и магнитное упорядочение атомов  $\text{Eu}^{2+}$  в плоскости  $ab$  при  $T_m \approx 15$  К. Других особенностей на полученной зависимости не наблюдается. На второй такой зависимости помимо особенности в 15 К присутствует дополнительный пик в 19 К, что указывает на наличие примеси  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ . Такие включения могут служить центрами пиннинга вихрей Абрикосова [4]. На данный момент проводятся исследования первого критического поля  $H_{c1}(T)$  для двух ориентаций ( $H//ab, c$ ).

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 23-12-00307).*

1. Iyo A. et al. New-structure-type Fe-based superconductors:  $\text{CaAFe}_4\text{As}_4$  ( $A = \text{K, Rb, Cs}$ ) and  $\text{SrAFe}_4\text{As}_4$  ( $A = \text{Rb, Cs}$ ) // Journal of the American Chemical Society. 2016. V. 138. No. 10. P. 3410–3415.
2. Kim T. K. et al. Electronic structure and coexistence of superconductivity with magnetism in  $\text{RbEuFe}_4\text{As}_4$  // Physical Review B. 2021. V. 103. No. 17. P. 174517.
3. Kim T.K. et al. Novel magnetic stoichiometric superconductor compound  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  // Uspekhi Fizicheskikh Nauk Journal. 2021. V. 65. No. 7. P. 740-747.
4. Degtyarenko A. Y. et al. Synthesis and HRTEM Investigation of  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  Superconductor // Nanomaterials. V. 12. No. 21. P. 3801.

## Влияние облучения потоком электронов на лантансодержащее фосфатное стекло

*Т.Ю. Седегова, В.А. Клинков*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург*

*УДК: 539.2:666.11.01:537.533.2*

Воздействие ионизирующего излучения приводит к изменениям характеристик материалов. Это важно для оптических материалов, в которых облучение приводит к появлению полос наведённого поглощения. Актуальной задачей является разработка оптических материалов, устойчивых к облучению.

Общепринятым оптическим материалом для использования в условиях радиационной нагрузки является силикатное стекло К-208. Но высокая температура его получения и требования к чистоте сырья приводят к высокой стоимости изделий на его основе. Альтернативной матрицей может служить фосфатное стекло, используемое в оптике благодаря своим термооптическим характеристикам, устойчивости к кристаллизации и технологичности получения [1].

За радиационную окраску стёкол в видимом спектре отвечают формируемые в результате разрыва химических связей зарядовые центры окраски. Эффективной протекторной добавкой, минимизирующей их появление, является церий, ионы которого перехватывают возникающие в материале свободные заряды за счет изменения собственного зарядового состояния [2]. Роль других многозарядовых ионов в несиликатных системах исследована слабо несмотря на иные особенности их поведения.

Объектом данного исследования были стёкла на основе системы  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O-La}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5\text{+CeO}_2$  с добавками Nd, Eu, Sb, Sn. В работе проведены исследования воздействия электронного облучения и времени релаксации на спектральные свойства стёкол.

1. Heng X. et al. Reduced radiation damage in a multicomponent phosphate glass by Nb<sup>5+</sup> or Sb<sup>3+</sup> doping // *Optical Materials Express*. 2015. Т. 5. №. 10. С. 2272-2280.
2. Xinjie F. U., Lixin S., Jiacheng L. I. Radiation induced color centers in cerium-doped and cerium-free multicomponent silicate glasses // *Journal of Rare Earths*. 2014. Т. 32. №. 11. С. 1037-1042.

## Развитие стенда рефлектометрии поляризованных нейтронов на ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт»

Е.О. Серов<sup>1</sup>, П.С. Савченков<sup>1,2</sup>, А.В. Рогачев<sup>1</sup>, А.И. Калюканов<sup>1</sup>, В.И. Боднарчук<sup>1,3,4</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

<sup>3</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>4</sup>Государственный университет «Дубна», Дубна

УДК: 543.444, 538.9

В Курчатовском институте на базе реактора ИР-8 был создан и введён в эксплуатацию стенд рефлектометрии поляризованных нейтронов «НЕПТУН». Нейтронная рефлектометрия — это метод исследования тонких плёнок, основанный на отражении нейтронов от поверхностей и границ раздела сред. Благодаря взаимодействию нейтронов с ядрами атомов и наличию у нейтронов магнитного момента, этот метод позволяет одновременно получать информацию о ядерной и магнитной структуре образцов. Анализ экспериментальных данных даёт возможность определять толщину слоёв, шероховатость границ раздела, химический и изотопный состав, а также магнитные свойства исследуемых материалов.

На стенде реализована оптическая схема нейтронного рефлектометра с горизонтальной плоскостью отражения и возможностью работы с поляризованными нейтронами. Для монохроматизации пучка нейтронов используется монокристалл меди с ориентацией (111), который отражает нейтроны с длиной волны  $\lambda = 1,524 \text{ \AA}$ . После монохроматора установлен коллиматор, формирующий пучок нейтронов с размерами  $1 \times 40 \text{ мм}^2$  и угловой расходимостью  $0,25^\circ$ . Поляризация пучка обеспечивается суперзеркалом Fe/Si ( $m=3,6$ ), установленным в магнитном поле на подвижном основании. Управление направлением поляризации осуществляется с помощью спин-флиппера Мезея, который позволяет изменять направление спина нейтронов на  $180^\circ$ . Образец размещается в магнитном поле 400 Гс на узле с тремя степенями подвижности. Для регистрации нейтронов используется одномерный многопроволочный позиционно-чувствительный детектор заполненный газом гелий-3.

Стенд «НЕПТУН» позволяет исследовать многослойные тонкоплёночные структуры с толщиной отдельных слоёв от 10 до 200 нм. Размеры исследуемых образцов могут варьироваться от  $30 \times 30 \text{ мм}^2$  до  $90 \times 200 \text{ мм}^2$ . Основные задачи, решаемые с помощью стенда включают: исследование тонких плёнок, содержащих лёгкие элементы; изучение образцов с использованием изотопического контраста; определение толщины слоёв и шероховатости границ раздела; измерение направления и величины вектора намагниченности в магнитных слоях.

В докладе будут рассмотрены оптическая схема стенда, особенности реализации метода на реакторе ИР-8, а также представлены результаты первых экспериментов.

**Структура кристаллов  $\text{Cs}_{1.19}\text{K}_{8.81}\text{H}_8(\text{SO}_4)_9 \cdot \text{H}_2\text{O}$**   
***Е.В. Сидорова, Е.С. Смирнова, И.С. Тимаков, В.В. Гребенев***  
*КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

УДК: 548.3, 538.9

Кислые соли  $M_m\text{H}_n(\text{AO}_4)_{(m+n)/2} \cdot y\text{H}_2\text{O}$  ( $M = \text{K, Rb, Cs, NH}_4$ ;  $\text{AO}_4 = \text{SO}_4, \text{SeO}_4, \text{HPO}_4, \text{HAsO}_4$ ) с высокой протонной проводимостью интересны для исследования фундаментальных основ протонного беспорядка и как материалы для создания электрохимических устройств, в частности, топливных элементов. Высокая протонная проводимость в них структурно обусловлена и возникает в результате разупорядочения протонной подсистемы за счет фазовых переходов [1].

Основной проблемой использования кислых солей является реакция дегидратации, которая приводит к резкому уменьшению протонной проводимости за счет потери молекул воды. Поэтому активно исследуется влияние структуры и ее модификаций на стабилизацию фаз с высокой протонной проводимостью [2].

В данной работе были исследованы кристаллы, полученные в системе  $\text{Cs}_2\text{SO}_4 - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$  методом снижения температуры.

Рентгенофазовый анализ выращенных кристаллов выполнен на порошковом рентгеновском дифрактометре Tongda TDM-20. Анализ рентгеновских дифрактограмм с использованием порошковой базы данных ICDD PDF-2 не позволил однозначно определить фазовый состав образцов.

Рентгеноструктурный анализ отобранных монокристаллов выполнен с использованием дифрактометра Rigaku XtaLAB Synergy-DW HyPix-Arc 150°. Была определена структура новых кристаллов  $\text{Cs}_{1.19}\text{K}_{8.81}\text{H}_8(\text{SO}_4)_9 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Установлено, что монокристаллы принадлежат моноклинной сингонии, пространственная группа  $P2_1/c$ ,  $Z = 4$ ,  $a = 7.1179(1)$ ,  $b = 15.0036(1)$ ,  $c = 35.6025(2)$ ,  $\beta = 92.5880(3)$ .

Катионы в структуре находятся в десяти кристаллографически независимых позициях. В семи позициях присутствуют только атомы калия, в трех смешанных позициях содержатся атомы калия и цезия в разном соотношении. Молекулы воды в структуре расположены в полости, вблизи смешанных позиций К/Сs. В структуре присутствуют девять кристаллографических позиций атомов серы. Все атомы серы находятся в тетраэдрах из атомов кислорода. Между тетраэдрами существуют водородные связи. В тетраэдре  $\text{S}(7)\text{O}_4$  выявлено расщепление позиций атомов кислорода, говорящее о разупорядочении тетраэдра.

1. Chisholm C.R.I., Haile S.M. High-temperature phase transition in  $\text{K}_3\text{H}(\text{SO}_4)_2$  // Solid State Ionics. 2001. 145. 179-184.
2. Gainutdinov R.V. et al Conductivity and Real Structure of Cesium Hydrogen Sulfate–Phosphate Crystals // Crystallography Reports. 2024. V. 69. I. 3. P. 359-364

## Особенности кристаллизации аморфно-кристаллических лент из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ при электроимпульсной термообработке

*Н.Н. Ситников*

*АО ГНЦ «Центр Келдыша», Москва*

*УДК: 538.911*

В работе исследовались аморфно-кристаллические ленты из сплава  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$  (ат. %), полученные методом сверхбыстрой закалки расплава на вращающемся диске (метод планарного литья), толщиной около 40 мкм. В зависимости от параметров закалки возможно получение ленты, в которой с неконтактной (свободной) стороны формируется сплошной тонкий слой кристаллической фазы на аморфной основной части ленты, образующейся с контактной по отношению к закалочному диску стороны ленты. При этом формируется аморфно-кристаллический композит с четкой границей, разделяющей аморфный и кристаллический слои. Применяя метод планарного литья с варьированием скорости охлаждения расплава в диапазоне  $10^5$ - $10^6$  К/с, возможно получение образцов слоистых аморфно-кристаллических лент из сплава  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$  с различным толщинами кристаллического слоя от 2 до 10 мкм. В полученных образцах быстрозакалённых слоистых аморфно-кристаллических лент наблюдается эффект обратимый памяти формы с деформацией изгибом без какой-либо дополнительной термомеханической обработки.

Быстрозакалённые слоистые аморфно-кристаллические ленты могут быть дополнительно подвергнуты различным обработкам для получения новых свойств и модификации уже имеющихся эффектов памяти формы. Одним из перспективных вариантов термообработки без температурной выдержки является электроимпульсная обработка (ЭИО), которая заключается в пропускании через образец (ленту) единичного или серии коротких импульсов электрического тока. Электрический ток позволяет разогревать тонкомерные образцы за короткие времена и проводить кристаллизацию практически без изотермической выдержки. ЭИО осуществлялась на лабораторной установке, в которой реализовано пропускание через обрабатываемый образец ленты одиночного импульса электрического тока с заданной амплитудой и длительностью. Применяемый метод обработки и изготовленная лабораторная установка позволяют дозированно разогревать обрабатываемый образец ленты за времена от 0,1 до 1000 мс.

При воздействии на исходный образец импульсом электрического тока менее 1 с наблюдаются существенные изменения кристаллообразования по сравнению со стандартной изотермической обработкой. Главное из них заключается в том, что в динамически кристаллизованных сплавах присутствует неоднородное распределение кристаллов по толщине ленты: вблизи поверхностей ленты наблюдается столбчатая структура кристаллов, в то время как в объеме ленты присутствуют единичные или сгруппированные более крупные кристаллы. При ЭИО длительностью 0,01 с и менее доля столбчатых кристаллов увеличивается, а большие кристаллы укрупняются и становятся более однородными по размеру. Увеличение плотности тока при ЭИО с одинаковой длительностью обработки и перегрева после кристаллизации аморфного состояния приводит к формированию более однородной кристаллической структуры, характеризующейся преимущественно столбчатыми кристаллами. Отмечается, что формирование столбчатых кристаллов с неконтактной стороны происходит из исходного кристаллического слоя, при котором сохраняется его кристаллографическая ориентация. Кристаллографические рефлексы с неконтактной поверхности ленты имеют нестандартное расположение основных рефлексов структуры типа В19 в области 58-65 градусов, а пики с меньшей интенсивностью располагаются в области 28-32 градусов. Кристаллографические рефлексы с контактной стороны ленты после ЭИО располагаются в области 38-46 градусов (основные), а менее интенсивные рефлексы в области 58-65 градусов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 24-22-00035).*

**Экспериментальное и теоретическое исследование спиновых состояний  
в  $Mn_{1-x}Rh_xSi$  при  $x < 0.05$**

***Д.О. Сканченко<sup>1,2,3</sup>, Е.В. Алтынбаев<sup>1,2,3</sup>, И.В. Альферев<sup>2</sup>, В.Н. Краснорусский<sup>3</sup>, А.В. Боков<sup>3</sup>,  
Д.А. Саламатин<sup>3</sup>, З.Н. Волкова<sup>3,4</sup>, А.П. Геращенко<sup>3,4</sup>, Н.М. Челкатчев<sup>3</sup>, М.В. Магницкая<sup>3</sup>,  
В.А. Сидоров<sup>3</sup>, А.В. Семенов<sup>3,5</sup>, В.В. Бражский<sup>3</sup>, А.В. Цвященко<sup>3</sup>***

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>Институт физики высоких давлений им. В. М. Верецагина РАН, Москва

<sup>4</sup>Институт физики металлов им. М. Н. Михеева РАН, Екатеринбург

<sup>5</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва

УДК: 537.9, 538.9

Соединение MnSi является каноническим представителем слабых зонных магнетиков, обладающим низкой температурой магнитного упорядочения ( $T_C \approx 29,5$  К), малым спонтанным магнитным моментом Mn ( $\mu_S = 0.4 \mu_B$ ) и высокой чувствительностью магнитных свойств к внешним воздействиям.

В данной работе исследуется влияние замещения Mn атомами Rh на магнитные свойства MnSi в поликристаллических образцах  $Mn_{1-x}Rh_xSi$  ( $x \leq 0.05$ ), полученных методом высокobarного и высокотемпературного синтеза [1]. Рентгеноструктурный анализ подтвердил сохранение B20-структуры (группа P2<sub>1</sub>3), характерной для MnSi. В таких системах реализуется взаимодействие Дзялошинского-Мории (ДМ), ответственное за формирование геликоидальной магнитной структуры при  $T < T_C$ , а также образование А-фазы – упорядоченной скирмионной решетки при температурах вблизи  $T_C$  [2,3].

В работе представлены результаты исследований измерений намагниченности ( $2 \leq T \leq 400$  К,  $H \leq 90$  кЭ), ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах  $^{55}Mn$  и  $^{29}Si$ , малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) (для  $x = 0.02$ ) и расчетов на основе теории функционала плотности (DFT).

Анализ полевых зависимостей  $dM/dH$  позволил восстановить фазовые диаграммы для образцов с  $x = 0.0125, 0.02, 0.025, 0.05$ . Для состава  $x = 0.02$  фазовая диаграмма, полученная по данным  $dM/dH$ , была сопоставлена с результатами МУРН. При этом наблюдается существенное увеличение области стабильности А-фазы для всех исследуемых составов.

Для  $x \geq 0.025$  впервые обнаружена дополнительная магнитная фаза с высокотемпературным обменом ( $T \approx 200$  К). Данная фаза характеризуется высокочастотным ЯМР-сигналом  $^{55}Mn$  (180 и 310 МГц), соответствующим магнитному моменту  $\sim 1.3$  и  $2.2 \mu_B/Mn$ . Этот высокочастотный сигнал является дополнительным к основному низкочастотному, характерному для геликоидальной структуры и наблюдавшемуся прежде [4] на чистом MnSi. Для  $x = 0.0125$  он виден при  $\sim 50$  МГц, что соответствует  $\sim 0.31 \mu_B / Mn$ . Расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT) показывают, что Rh занимает не только позиции Mn, но и Si, что приводит к нестандартному распределению магнитных состояний в системе.

Результаты исследования способствуют пониманию квантовых фазовых переходов и могут быть полезны для разработки спинтронных и квантовых вычислительных устройств на основе MnSi

*Работа выполнена при поддержке проекта РНФ 22-12-00008.*

1. Khvostantsev L. G., Vereshchagin L. F., Novikov A. P. Device of toroid type for high pressure generation // High Temperature - High Pressures. 1977. Vol. 9. P. 637.
2. Dzyaloshinskii I. E., et al. Theory of helicoidal structures in antiferromagnets // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1964. Vol. 19, No. 4. P. 1420–1437.
3. Bak P., Jensen M. H., et al. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1980. Vol. 13, No. 31. P. L881–L885.
4. Motoya K., Yasuoka H., Nakamura Y., Wernick J. H. Nuclear magnetic resonance study of magnetic properties of MnSi // Solid State Communications. 1976. Vol. 19. P. 529.

**Поляризованная люминесценция и малоугловое рентгеновское рассеяние в исследовании интерполимерных комплексов с водородными связями**

***Р.Ю. Смыслов<sup>1</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>2,3</sup>, Некрасова Т.Н.<sup>1</sup>***

***Д. Махаева<sup>4</sup>, Г.С. Ирмухаметова<sup>4</sup>, В.В. Хуторянский<sup>5</sup>***

<sup>1</sup>НИИ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИВС, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>3</sup>Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

<sup>4</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Алматы

<sup>5</sup>Reading School of Pharmacy, University of Reading, Реддинг

УДК:538.95, 54

С помощью релаксационного метода – поляризованной люминесценции (ПЛ) – и структурного метода – малоуглового рассеяния рентгеновского излучения (МУРР) [1] – исследовано образование интерполимерных комплексов (ИПК), стабилизированных водородными связями между полиалкилоксазолинами (ПАОЗ) и полиметакриловой кислотой (ПМАК), в растворе. Варьирование длины алкильного радикала в ПАОЗ влияет на связывающую способность макромолекул последнего с цепями ПМАК как в воде, так и в метаноле. Метод поляризованной люминесценции – это подход, позволяющий исследовать релаксационные процессы на мономолекулярном уровне в наносекундном диапазоне в растворе. Эти процессы связаны с сегментальной подвижностью полимерных цепей. Таким образом, внутримолекулярная подвижность является мерой динамики взаимодействия сегментов макромолекул [2]. Время релаксации, количественно характеризующее внутримолекулярную подвижность люминесцентно-меченого компонента (ПМАК\*), увеличивается с 80 до 680 нс, что свидетельствует об образовании ИПК между ПМАК\* и ПАОЗ. Соотнесение структурных данных, полученных с помощью МУРР в широком диапазоне переданного импульса, с данными ПЛ о релаксации позволяет глубже понять связь динамики взаимодействия компонент и структуры возникающего в растворе ИПК. Так МУРР для водных растворов ИПК {ПАОЗ/ПМАК} указывает на наличие по крайней мере одного иерархического уровня надмолекулярной структуры. Последнюю можно интерпретировать как структуру наногидрогеля. На первом иерархическом уровне формируются компактные структуры с характерным размером от 40 до 10,7 нм. Для подтверждения роли гидрофобно-лиофобных взаимодействий необходимо провести дальнейшее изучение взаимодействия между ПАОЗ с варьируемой длиной алкильного радикала и полиакриловой кислотой (ПАА), в мономерном звене которой отсутствуют α-метильные группы. Компактность надмолекулярной структуры наногидрогеля может регулироваться сетью водородных связей со вторым компонентом ИПК – ПАОЗ. В дополнении использование метода неупругого рассеяния нейтронов как релаксационного подхода позволило бы получить дополнительную информацию о динамике в растворе. ИПК с участием ПАОЗ перспективны в качестве вектора для лекарственных форм с целью доставки труднорастворимых низкомолекулярных соединений медицинского назначения [3].

*Работа частично выполнена в рамках научного проекта 04-4-1149-2-2021/2028 при финансовой поддержке программы сотрудничества ОИЯИ – Республика Казахстан в 2024 г. (Пр. № 448 от 06.06.2024, п. б).*

1. Lezov, A.A., et al. Temperature-responsive star-shaped poly(2-ethyl-2-oxazoline) and poly(2-isopropyl-2-oxazoline) with central thiacalix[4]arene fragments: structure and properties in solutions // *Colloid Polym Sci.* 2019. V. 297. P. 285–296.
2. Anufrieva, E. V.; Krakovyak, M. G.; Nekrasova, T. N.; Smyslov, R. Y. Polarized luminescence and nanosecond dynamics in the studies of interpolymer complexes // Chapter in Book (Eds. Khutoryanskiy, Vitaliy V., and Georgios Staikos): *Hydrogen Bonded Interpolymer Complexes: Formation, Structure and Applications.* 2009. 69–83.
3. Shan X., Aspinall S., Kaldybekov D.B., Buang F., Williams A.C., Khutoryansky V.V. Synthesis and evaluation of methacrylated poly (2-ethyl-2-oxazoline) as a mucoadhesive polymer for nasal drug delivery // *ACS Applied Polymer Materials.* 2021. V. 3, №. 11. P. 5882–5892.

## Влияние щелочной среды на готовые изделия из фотополимерных смол

М.В. Солонинкина<sup>1,2</sup>, В.В. Кошкин<sup>1</sup>, Д.В. Логинов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

<sup>2</sup>Карельский научный центр РАН, Петрозаводск

УДК: 620.193.423, 538.9

В XXI веке 3D-печать широко применяется в различных областях, особенно в промышленности [1]. Технология SLA позволяет создавать детализированные конструкции и сокращать время производства [2]. В качестве материала используется фотополимерная смола, обеспечивающая высокую прочность и стабильность готовых изделий. На рынке представлено множество фотополимерных смол с различными свойствами, что позволяет выбрать подходящий материал для конкретной задачи. Однако характеристики, заявленные производителем, могут не соответствовать требованиям к конечному изделию. Свойства фотополимеров могут меняться под воздействием внешних факторов, например, щелочной среды. Растворы с гидроксидом натрия (NaOH) и калия (KOH) могут вступать в химические реакции с компонентами фотополимерных смол. Щелочная среда разрушает связи в полимерной цепи, что приводит к снижению прочности изделий, а на поверхности возникают дефекты, уменьшающие срок службы продуктов [3].

Исследованы инженерные фотополимерные смолы марок SUNLU ABS-Like (Китай) и HARZ Labs Industrial Rigid (Россия), используемые для создания конечных изделий с целью определения их устойчивости к щелочной среде с pH = 13. Эксперимент проводился методом моделирования процесса контакта образцов с щелочной средой. Образцы кубической формы осматривали каждые 12 часов. Через 36 часов изделия промыли водой и высушили при комнатной температуре в течение 30 минут. Поверхность образца фотополимера SUNLU ABS-Like после воздействия щёлочи стала гладкой, что говорит об изменении поверхностного слоя и удалении с него воздушных пор. Видимые повреждения отсутствовали, как и деформированные участки, коробление, провисания и другие отклонения от первоначального состояния. Это подтверждает заявленную производителем химическую стойкость материала. После воздействия щёлочи на образец HARZ Labs Industrial Rigid чёрного цвета наблюдались глубокие трещины и частичное растворение краев. Пигмент фотополимерной смолы частично растворился, из-за чего на образце появились прозрачные участки, ориентированные по граням куба. Через 36 часов выявлены явные повреждения: щелочная среда с pH = 13 способствовала расслоению вдоль ребер и углов куба, а также формоизменению элементов образца и выпучиванию плоских частей конструкции. Образец стал мягким и легко деформировался под воздействием силы. В ходе эксперимента было установлено, что образец из фотополимерной смолы HARZ Labs Industrial Rigid не устойчив к воздействию щёлочи.

Результаты исследования свидетельствуют о том, что щелочная среда значительно влияет на готовые изделия из фотополимерных смол. Характеристики, заявленные производителем, могут не соответствовать конечным результатам из-за внешних факторов в процессе производства. При интенсивном использовании фотополимерных материалов важно проводить дополнительные исследования для разработки рецептур, повышающих их устойчивость к агрессивным химическим веществам вне зависимости от внешних факторов.

*Исследование выполнено в рамках реализации Программы поддержки НИОКР студентов, аспирантов и лиц, имеющих ученую степень, финансируемой Правительством Республики Карелия.*

1. Абдукаримова Ф. А. и др. Использование аддитивных технологий в производстве. Перспективы развития и актуальные проблемы //Proceedings of International Conference on Scientific Research in Natural and Social Sciences. 2023. Т. 2. №. 6. С. 71-78.
2. Гранина К. Е., Рагозина М. А. 3D-принтер - технология будущего //Молодые ученые в решении актуальных проблем науки. 2023. С. 1111-1113.

3. Ефремова А. Я., Пивовар М. Л., Сабодина М. Н. Изменение эксплуатационных свойств фотополимерных материалов для 3D-печати под воздействием химических факторов //Вестник фармации. 2022. №. 4 (98). С. 75-82.

## Топологические дефекты в пленках нематических жидких кристаллов

*Н.А. Спириденко, П.В. Долганов, В.К. Долганов*

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка*

*УДК: 538.91, 539.22*

Изучение топологических дефектов составляет важный раздел физики конденсированного состояния [1]. Топологические дефекты в жидких кристаллах с ориентационным упорядочением [1-4] представляют особый интерес для исследований, поскольку такие дефекты могут быть визуализированы в поляризованном свете и их поведение и динамику можно изучать на удобном для экспериментов пространственном и временном масштабе.

В докладе представлены результаты исследований топологических дефектов на межфазной границе раздела нематический жидкий кристалл – изотропная жидкость. Топологические дефекты находятся на поверхности капель изотропной жидкости в жидком кристалле. Капли получены в плоских оптических ячейках в двухфазной области жидкий кристалл – изотропная жидкость. Изучены сферические капли размером меньше толщины ячейки и квазидвумерные капли, поперечный размер которых больше толщины ячейки. Исследования проведены с использованием высокоразрешающей поляризованной оптической микроскопии и высокоскоростной видеорегистрации.

Наклонные граничные условия для директора жидкого кристалла на границе раздела нематик – изотропная жидкость приводят к образованию на поверхности капель дефектов двух типов: точечных топологических дефектов и линейных дефектов [2,3]. Прослежена трансформация линейных дефектов при увеличении размера капель. На поверхности капель малого размера находится один линейный дефект, в квазидвумерных каплях он распадается на два локализованных дефекта. При слиянии капель происходит образование новых дефектов, являющихся антиподами существующих дефектов. Показано, что наблюдаемое поведение согласуется с топологическими требованиями. Изучена динамика аннигиляции топологических дефектов противоположного знака в ячейках различных толщин, результаты сопоставлены с существующей теорией. При изменении температуры наблюдались переходы с изменением топологии и суммарного топологического заряда системы, включающие в себя образование тороидальной капли изотропной жидкости без топологических дефектов.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-12-00200.*

1. Клеман М., Лаврентович О.Д. Основы физики частично упорядоченных сред. Пер. с англ. М.: Физматлит. 2007.
2. Dolganov P.V., Spiridenko N.A. Birth and annihilation of topological defects on the nematic–isotropic interface during droplet coalescence // *Liquid Crystals*. 2022. V. 49. No. 14. P. 1933–1941
3. Dolganov P.V. et al. Statics and dynamics of point boojums, line and modified Saturn ring topological defects in nematic confined geometry // *The European Physical Journal E*. 2023. V. 46. No. 12. P. 121.3.
4. Dolganov P.V. et al. Ordered structures formed by nematic topological defects and their transformation with changing the Euler characteristics // *Phys. Rev. E*. 2024. V. 110. No. 2. P. 024703.

**Поляритонная конденсация в планарных полупроводниковых  
микрорезонаторах: от технологии к эксперименту**  
***В.А. Столяров<sup>1</sup>, А.С. Курдюбов<sup>1</sup>, М.С. Ложкин<sup>2</sup>, Ю.П. Ефимов<sup>2</sup>, С.А. Елисеев<sup>2</sup>,  
В.А. Ловцюс<sup>2</sup>, И.В. Игнатьев<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>Лаборатория Оптики Спины, СПбГУ, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>РЦ «Нанофотоника», СПбГУ, Санкт-Петербург

УДК: 583.9, 538.958, 538.911

В последние годы исследования поляритонных конденсатов в различных полупроводниковых системах привлекают значительное внимание, открывая дорогу к разработке нового поколения оптоэлектронных устройств, таких как квантовые вычислители и симуляторы, нейроморфные сети и поляритонные лазеры [1]. Одной из наиболее перспективных систем для изучения поляритонов являются планарные полупроводниковые GaAs/AlGaAs микрорезонаторы с брэгговскими зеркалами и встроенными квантовыми ямами. Однако для наблюдения поляритонных конденсатов в таких системах требуется вырастить микрорезонаторы с высоким значением добротности, что до сих пор удавалось реализовать лишь в небольшом числе лабораторий по всему миру и ни в одной в России.

Начиная с 2022 года в СПбГУ ведутся активные работы, направленные на изготовление высокодобротных микрорезонаторов. Работы включают разработку дизайна гетероструктур с помощью созданной программы для моделирования спектров их отражения методом матриц переноса, рост структур методом молекулярно-пучковой эпитаксии и оптическую характеристику методами спектроскопии отражения и фотолюминесценции. Разработанная методика позволяет оценивать влияние технологических параметров на оптические свойства микрорезонаторов и их пригодность для дальнейших исследований поляритонных конденсатов.

В результате работы нами были получены несколько высокодобротных образцов, в которых удалось сформировать поляритонные конденсаты. Были проведены эксперименты по наблюдению эффекта поляритонного лазера и конденсации поляритонов в оптических ловушках различных типов, которые позволили заключить, что выращенные образцы могут быть использованы в качестве материальной основы для разработки оптоэлектронных устройств на поляритонной платформе. В настоящее время в нашей лаборатории ведутся исследования по использованию поляритонных конденсатов в квантовых вычислителях, нейроморфных системах и источниках когерентного излучения нового типа.

*Авторы благодарят сотрудников РЦ «Нанофотоника» Научного парка СПбГУ. Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 19-72-20039).*

1. Kavokin A. et al. Polariton condensates for classical and quantum computing // Nature Reviews Physics. 2022. V. 4. P. 435–451.

## Особенности изменения локальной атомной структуры $\alpha$ -Ti в ходе больших пластических деформаций

Р.В. Сундеев<sup>1,2</sup>, Н.А. Шурыгина<sup>1</sup>, А.В. Шалимова<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>3</sup>, Е.Н. Блинова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГУП «ЦНИИЧермет им. И.П.Бардина», Москва

<sup>2</sup>РТУ МИРЭА, Москва

<sup>3</sup>НИИ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 539.26, 538.9

Титан и его сплавы применяются как перспективные конструкционные материалы в аэрокосмической технике, химическом машиностроении, медицине и ядерной энергетике. Для повышения физико-механических характеристик титана в широкой области температур в настоящее время используются различные методы больших пластических (мегапластических) деформаций. Получение необходимого комплекса свойств обеспечивается за счет существенного измельчения структуры, изменения плотности и конфигурации дефектов и других элементов структуры. При этом в литературе остается не ясным какие моды деформации приводят к конкретным фазовым превращениям в  $\alpha$ -Ti. В связи с этим, в рамках работы проведены систематические структурные исследования фазовых превращений в  $\alpha$ -Ti в ходе двух различных способов деформации: осадка под высоким давлением и кручением под высоким давлением (КВД)

В качестве материала для исследования был выбран технически чистый титан BT1-0 ( $\alpha$ -фаза), полученный методом вакуумной выплавки и последующей прокатки полос до толщины 50 мкм. Готовые образцы отжигали при 800 °С в течении 3 часов. После отжига сплав имел равноосную структуру зерен  $\alpha$ -фазы со средним размером ~150 мкм. КВД проводили в камере Бриджмена при комнатной температуре. Использовали два вида деформации образцов в камере Бриджмена: 1) к образцам было приложено только высокое квазигидростатическое давление ( $P = 6$  ГПа) без кручения, выдержка 10 мин; 2) другая часть образцов была продеформирована КВД при той же величине давления ( $P = 6$  ГПа), скорость вращения подвижного бойка – 1 об/мин, число полных оборотов подвижной наковальни (N) было равно 1 и 4. Локальную атомную структуру как исходных образцов, так и образцов после деформации исследовали методом спектроскопии поглощения рентгеновских лучей (EXAFS-спектроскопии) с использованием синхротронного излучения на экспериментальной станции СТМ источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» вблизи K-края поглощения титана ( $E_0 = 4966$  эВ). Для монохроматизации синхротронного излучения использовали кремниевый монокристалл с ориентацией (111) в виде моноблока с вырезом («Бабочка»), установленный на гониометрической головке, обеспечивающий энергетическое разрешение  $\Delta E/E = 2 \cdot 10^{-4}$ . Экспериментальные спектры измеряли в диапазоне 4700-5500 эВ поточечным сканированием по энергии и обрабатывали с применением стандартных процедур выделения фона, нормирования на величину скачка K-края и выделения атомного поглощения.

В ходе исследования локальной структуры сплава методом EXAFS-спектроскопии, после КВД при комнатной температуре (при 1 и 4 оборотах) в области 3-4 Å происходят значимые изменения локальной структуры титана, связанные с изменением фазового состава сплава. В этой области проявляется вторая координационная сфера высокотемпературной  $\beta$ -фазы титана ( $R = 3.3$  Å). Вероятнее всего, в этом случае,  $\beta$ -фаза формируется в нанокристаллическом виде с размерами кристаллитов ~1-2 нм. Таким образом, показана возможность осуществления в ходе КВД (при комнатной температуре) превращения  $\alpha \rightarrow \beta$ , связанного с аномально высокой скоростью диффузии и локальным повышением температуры в полосах скольжения.

## Изучение особенностей магнетизма $\text{SmCrTiO}_5$ методом нейтронной порошковой дифракции

*А.Е. Суслопарова, А.И. Курбаков*

*НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

*УДК: 537.9, 538.911, 538.955*

$\text{SmCrTiO}_5$  принадлежит семейству  $\text{RMO}_5$ , где R представляет собой лантаноид, а M – переходный металл. В нашем случае M это смесь двух переходных металлов  $\text{Cr}^{3+}$  и  $\text{Ti}^{4+}$ . Изучение таких образцов актуально из-за демонстрируемых ими целого набора нетривиальных магнитных эффектов, таких как магнитоэлектричество, сегнетоэлектричество, мультиферроичность, магнитокалорические эффекты, и т.д. [1]. Несмотря на это, в основном изучены аналоги соединений из этого же семейства, в которых на месте лантаноида используется Nd или Gd. Например, в  $\text{NdCrTiO}_5$  нарушается дальнейшее магнитное упорядочение, что снижает температуру магнитного перехода, вызывая заметное уменьшение электрической поляризации [2].

Для изучения кристаллической и магнитной структур проводились исследования в диапазоне температур от 2K до 450K с использованием синхротронной (ALBA Synchrotron, Испания) и нейтронной (ILL, Франция) порошковой дифракции. Дополняют картину магнитных свойств макромагнитные измерения.

Кристаллическая структура  $\text{SmCrTiO}_5$  описывается в орторомбической пространственной группе  $Pbam$ . Параметры решетки  $a = 7.50414(2) \text{ \AA}$ ;  $b = 8.61579(3) \text{ \AA}$ ;  $c = 5.78412(2) \text{ \AA}$  [3]. Ионы Cr и Ti занимают неэквивалентные позиции, образуя две подрешетки. Магнитные ионы  $\text{Cr}^{3+}$  находятся в кислородных октаэдрах, которые имеют общие ребра вдоль оси c, а немагнитные ионы  $\text{Ti}^{4+}$  находятся в пирамидах  $\text{TiO}_5$ , образуя пары через два общих кислорода  $\text{O}_4$ , где каждая пирамида связана с двумя цепочками  $\text{CrO}_6$ .

Кривые магнитной восприимчивости демонстрируют широкий сигнал ниже 195 K с максимумом около 100 K, характерный для низкоразмерного антиферромагнетизма, дальний магнитный порядок появляется при температуре ниже 12 K, что также подтверждает нейтронная порошковая дифракция.

В результате обработки данных нейтронной дифракции была предложена коллинеарная магнитная структура с волновым вектором  $k = (0,0,0)$ , где рассматривается магнитное взаимодействие между ионами  $\text{Cr}^{3+}$  в соседних октаэдрах, что приводит к низкоразмерной одномерной магнитной системе. Чередование коротких и длинных расстояний Cr-Cr вдоль c, характерное для чередующейся цепочки Гейзенберга, связано с чередованием слоев  $\text{Sm}^{3+}$  и  $\text{Ti}^{4+}$ , перпендикулярных  $\text{CrO}_6$ .

Полученные результаты вносят вклад в понимание магнитных свойств семейства  $\text{RMO}_5$  и открывают перспективы для поиска новых мультифункциональных материалов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, грант №24-12-00217*

1. Das M. et al. Giant magnetocaloric effect in an exchange-frustrated  $\text{GdCrTiO}_5$  antiferromagnet // Physical Review B. 2018. V. 98. No. 10. P. 104420.
2. Gautam K., et al. Deciphering role of the Fe substitution in modulating the structural, magnetic and magnetocaloric properties of  $\text{NdCrTiO}_5$  // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2019. V. 478. P. 260.
3. Susloparova A. E. et al. Structural and magnetic properties of  $\text{SmCrTiO}_5$  // Physical Review B. 2024. V. 110. No. 22. P. 224429.

## Теоретическая модель диффузии гантельных междоузлий в бинарном ГЦК сплаве

*И.И. Сухарев, В.А. Бородин*

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

УДК: 620.194.22, 538.9

Физические представления о переносе точечных дефектов в сплавах играют ключевую роль в понимании процессов радиационно-индуцированной сегрегации. Диффузионный перенос в упомянутых процессах происходит путем двух механизмов - диффузии вакансий и диффузии межузельных атомов. Теоретическое описание диффузии по межузельному механизму в сплавах представляет значительную сложность ввиду того, что во многих металлах междоузлия имеют гантельные конфигурации, то есть состоят из пары атомов на одном узле решетки [1], причем типы атомов в гантели могут меняться при каждом диффузионном скачке межузельного атома.

В ряде исследований были предприняты попытки вывести систему уравнений, описывающих диффузию гантельных межузельных атомов в бинарных сплавах с учетом специфики диффузионных скачков, сопровождающихся как сменой направления оси гантели, так и возможным изменением типов атомов, составляющих гантель [2,3]. Однако эти модели имеют определенные ограничения. Так, авторы модели [2] существенно использовали предположение о независимости направления диффузионного скачка гантели от ее ориентации, что справедливо только при условии легкого вращения гантели на узле кристаллической решетки, а также ограничились упрощенным заданием диффузионного потока только в одном направлении, что в итоге привело к некорректному виду диффузионных уравнений. Модель, представленная в работе [3], не использует упрощающих предположений о легком повороте гантели на узле, но принципиально ограничена одномерным описанием процесса диффузии, обобщение которого на трехмерный случай является неочевидным.

В данной работе в рамках модели, основанной на учета локального баланса переходов межузельных атомов на произвольном узле кристаллической решетки [4] предложена система диффузионных уравнений в бинарном ГЦК сплаве замещения, явным образом учитывающая все характерные переходы между узлами решетки с участием междоузлий различных ориентаций. Продемонстрирована возможность существенного упрощения описания диффузии межузельных атомов в случае выполнимости приближение легкого вращения межузельной гантели на узле решетки и проведено прямое сравнение такого упрощенного описания с моделью работы [2], что позволило выявить некорректные детали предложенной там системы диффузионных уравнений. Было также проведено сопоставление с моделью работы [3] для выявления всех упрощений, необходимых для ее выполнимости.

1. Dederichs P.H. et al. Lattice theory of point defects // *J. Nucl. Mater.* 1978. V. 69–70. P. 176–199.
2. Hashimoto T., Isobe Y., and Shigenaka N. A model for radiation-induced segregation in fcc binary alloys // *J. Nucl. Mater.* 1995. V. 225. P. 108–116.
3. Murphy S.M. Contribution of interstitial migration to segregation in concentrated alloys // *J. Nucl. Mater.* 1991. V. 182. P. 73–86.
4. Borodin V.A., Ryazanov A.I., and Abromeit C. Void bias factors due to the anisotropy of the point defect diffusion // *J. Nucl. Mater.* 1993. V. 207, P. 242–254.

## Квантово-химический расчет спиновых состояний одноионных молекулярных магнетиков на основе $3d$ переходных металлов

*А.В. Сюракшин<sup>1</sup>, В.Ю. Юшанхай<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, Самара

<sup>2</sup>ЛТФ им. Н.Н.Боголюбова, ОИЯИ, Дубна

УДК: 541.139 + 541.49, 538.9

Работа направлена на изучение магнитных свойств молекул, включающих в свой состав ионы переходных металлов с незаполненной электронной  $3d$  оболочкой. Данные молекулы демонстрируют суперпарамагнитное поведение с характерной медленной релаксацией намагниченности при температурах ниже температуры блокировки, а также магнитный гистерезис - свойства, необходимые для хранения информации высокой плотности [1].

Методами вычислительной квантовой химии [2] исследованы равновесные спиновые состояния семейства четырех молекул трис- ацетилацетоната  $\text{Me}(\text{C}_5\text{O}_2\text{H}_7)_3$ , где центральный магнитный ион представлен одним из  $3d$  переходных элементов,  $\text{Me}=\text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$ . На первом этапе вычислений на уровне Хартри-Фока обоснован выбор базиса атомных орбиталей путем проведения полного цикла расчетов для референтной молекулы  $\text{Me}(\text{C}_5\text{O}_2\text{H}_7)_3$ , а также определены оптимальные геометрические положения ядер молекул в выбранном базисе. Далее, в приближении Борна-Оппенгеймера для оптимальной геометрии каждой молекулы проведен расчет значений электронной энергии для их различных спиновых состояний. Самосогласованный расчет электронной энергии на уровне однодетерминантного решения Хартри-Фока дополнен учетом электронных корреляций в рамках многоконфигурационного метода. В результате расчета выявлено, что магнитными являются молекулы на основе марганца, железа и хрома, для которых реализуются высокоспиновые состояния,  $S=2$  для Mn,  $S=5/2$  для Fe и  $S=3/2$  для Cr. Молекула на основе кобальта немагнитна. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментом [3].

1. Frost J.M., Harriman K.L.M., Murugesu M. The rise of 3-d single-ion magnets in molecular magnetism: towards materials from molecules? // Chem. Sci. 2016. V. 7. P. 2470–291.
2. Helgaker T., Jorgensen P., Olsen J. Molecular electronic-structure theory. Publisher, Wiley. 2014. P.1-944.
3. Strassner N.M. et al. Electronic Structure and Magnetic Properties of a High-Spin MnIII Complex:  $[\text{Mn}(\text{mesacac})_3]$  (mesacac=1,3-Bis(2,4,6-trimethylphenyl)-propane-1,3-dionato). ChemPhysChem. 2023. V. 24(2). P. e202200652 (1-8).

**Нейтронные рефлектометры SONATA и HARMONY на реакторе ПИК: проект**  
***Е.Ю. Тарачева, Н.К. Плешанов, В.Г. Сыромятников, В.А. Матвеев***  
*НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

УДК:538.9

Рефлектометр SONATA — это высокопоточный инструмент (расчетная плотность потока на выходе транспортного нейтронновода  $9 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ), оптимизированный для исследования вертикальных образцов с площадью поверхности  $\sim 10 \times 10 \text{ мм}^2$  методами зеркального отражения, незеркального рассеяния и малоуглового рассеяния при скользющем падении. В концепцию рефлектометра заложена возможность измерений в режимах времяпролетной и монохроматической методик с использованием как поляризованных, так и неполяризованных нейтронов.

Основным режимом работы рефлектометра будет времяпролетный режим с доступным диапазоном длин волн 2-30 Å. Четырехдисковый прерыватель пучка оригинальной конструкции позволит менять разрешение (8-15%) и диапазон рабочих длин волн, а также отсекал нежелательные нейтроны с большой длиной волны. Пучковый комбинатор включает набор отражателей (суперзеркал и зеркальных монохроматоров) с неполяризуемыми и поляризуемыми покрытиями, которые позволят монохроматизировать/поляризовать нейтронный пучок. В режиме измерений с монохроматическим пучком будет возможность выбора длины волны и разрешения по длине волны. Верный анализатор позволит проводить анализ поляризации в широком диапазоне углов рассеяния.

Объектами исследования на рефлектометре являются тонкие и атомарно тонкие пленки, слоистые и латерально упорядоченные структуры, магнетизм в таких структурах и процессы на границах с быстрой кинетикой, в том числе процессы на границе раздела твердая/жидкая фазы. Измерение зеркального отражения дает возможность восстановления глубинного профиля плотности длины рассеяния (SLD), который информативен о химическом и изотопном составе, а также магнетизме отражающих слоев. При измерении незеркального рассеяния будут доступны исследования структурных и магнитных неоднородностей с размерами порядка  $10^2$ – $10^4$  нм в плоскости зеркального отражения, при измерении малоуглового рассеяния при скользющем падении — латеральных неоднородностей порядка 1-  $10^2$  нм в плоскости, перпендикулярной плоскости зеркального отражения.

Рефлектометр HARMONY предназначен для исследований в области физики мягкой материи (жидкостей, жидких кристаллов, мембран, полимеров, сложных растворов и т. д.), физических, химических и биологических процессов на границах разделов жидкости с газом или твердым телом, материаловедения, разработки технологии наноструктур и наноматериалов, исследований процессов доставки лекарств в клетках и биологических мембранах. Прибор оснащен двухдисковым прерывателем Ван Велла, шестиканальным нейтронно-оптическим формирователем и системой отклонителя нейтронного пучка на суперзеркалах  $m = 5$ , что позволит проводить исследования с поляризованными и неполяризованными нейтронами с выбором разрешения. Суперзеркальный отклонитель пучка представляет собой систему из немагнитных суперзеркал, расположенных вдоль пучка. Последовательное отражение от этих суперзеркал позволяет реализовать измерения на трех углах скольжения для образцов с горизонтальной поверхностью, с отражением нейтронов как сверху, так и снизу образца. Наличие нескольких режимов работы и возможности выбора разрешения позволит охватить широкий диапазон исследовательских задач.

Диапазон рабочих длин волн от 2 до 20 Å, разрешение по длине волны  $2 \div 15\%$ ; диапазон переданных импульсов  $Q = 0.005 \div 0.35 \text{ Å}^{-1}$ . Сечение пучка нейтронов на позиции образца:  $0.1 \times 0.1 \text{ мм}^2 \div 4 \times 50 \text{ мм}^2$ .

**Исследование прочностных характеристик композитных материалов с борсодержащим наполнителем для нейтронной защиты под воздействием радиационного излучения**

**В.В. Тарнавич<sup>1</sup>, Ю.О. Четвериков<sup>1</sup>, Е.В. Дергачева<sup>1</sup>, А.В. Кротов<sup>2</sup>, М.М. Мурашев<sup>3</sup>,  
И.В. Смирнов<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>ООО «РАД», Всеволожск

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>4</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 621.039-78, 538.9

Исследована радиационная стойкость пластиковых композитных материалов с борсодержащим наполнителем 25 % по массе для печати методом послойного наплавления нитей. Полимерная матрица представляла собой акрилонитрилбутадиенстирольные и полиэтилентерефталатгликолевые пластики. Введение бора обеспечивает уменьшает глубину проникновения тепловых нейтронов на 56 – 78 % с 3 до 0,65 мм. Образцы композитных и матричных материалов экспонировались на нейтронном плутоний-бериллиевом источнике в течение 130 сут. Механические испытания показали увеличение прочности и пластичности у пластика на величину ~ 20% при облучении полиэтилентерефталатгликоля с аморфным бором. У образцов матричных пластиков, как и пластика акрилонитрилбутадиенстирола с нитридом бора, значительных изменений механических свойств после облучения не установлено.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-79-10063 «Разработка и создание систем регистрации нейтронов и компактной нейтронной защиты для данных систем, предназначенных для работы в условиях высоких пучковых нагрузок и повышенного радиационного фона»).*

**Влияние химического замещения в редкоземельной подрешетке на термодинамические свойства двухслойных манганитов  $(La_{1-z}Nd_z)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$**

***К.Ю. Терентьев<sup>1</sup>, А.Н. Матвеева<sup>1</sup>, В.А. Орлова<sup>2</sup>, А.А. Быков<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>*«Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

<sup>2</sup>*Акционерное общество «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург*

*УДК: 537.9, 538.9*

Монокристаллы соединений  $(La_{1-z}Nd_z)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$  были синтезированы методом оптической зонной плавки в четырехзеркальной печи FZ-4000-H (Crystal System Corp., Япония) в Лаборатории сильных магнитных полей, физического института им. Киренского РАН. На первом этапе синтеза из исходных оксидов синтезировали порошок номинального состава и отжигали при температуре 800°C в течение 20 ч с тремя промежуточными измельчениями. Затем полученный порошок прессовали в цилиндр длиной ~10 см и диаметром 5-8 мм, который окончательно отжигали в трубчатой печи при температуре 1500°C в течение 8 ч и охлаждали в печи. После этого полученный поликристаллический образец помещали в печь для оптической зонной плавки, где выращивали монокристалл путем перекристаллизации расплава в атмосфере кислорода со скоростью 5 мм/ч и скоростью вращения стержня 30 об/мин. Удельная теплоемкость была измерена с использованием метода релаксации на PPMS (Quantum Design) на кусочках монокристаллов массой 5-10 мг.

Эффект появления индуцированного магнитного поля на Nd-подрешетке за счет взаимодействия Nd-Mn можно наблюдать при измерении удельной теплоемкости, поскольку эффективное магнитное поле в месте нахождения Nd расщепляет основной дублет  $Nd^{3+}$ , что приводит к возникновению аномалии Шоттки. Таким образом, взаимодействие Nd-Mn проявляется в увеличении удельной теплоемкости при низких температурах с ростом концентрации Nd.

Низкотемпературные зависимости теплоемкости были измерены, чтобы разделить вклады от подрешетки РЗМ и октаэдров марганца. Теплоемкость, измеренная для соединений  $(La_{1-z}Nd_z)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$  с низкой концентрацией Nd ( $z = 0, 0.1$ ), плавно спадает с понижением температуры. Теплоемкость, измеренная для соединений  $(La_{1-z}Nd_z)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$  с ( $z = 0.3, 0.5$ ), ведет себя по-другому. До 10 К плавно спадает, а при более низких температурах присутствует небольшой рост. Таким образом, видно, что амплитуда аномалии Шоттки увеличивается пропорционально увеличению содержания неодима в соединении.

Для оценки вкладов кривые теплоемкости были аппроксимированы в соответствии с полиномом  $C(T) = \alpha T^3/2 + \beta T^3 + \gamma T$ , где  $\beta$  - вклад фононов решетки. При этом учитывались  $C_{lat} = \beta T^3$  удельная теплоемкость решетки; удельная теплоемкость электронов  $C_{el} = \gamma T$ ; удельная магнитная теплоемкость  $C_{mag} = \alpha T^3/2$  или  $C_{mag} = \alpha T^3$ , в зависимости от типа магнитного упорядочения.

По полученным при аппроксимации значения  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  для каждого образца видно, что коэффициент  $\beta$  изменяется незначительно, в то время как значение  $\gamma$  увеличивается с увеличением концентрации неодима.

В соответствии с аппроксимацией зависимостей  $C(T)/T$  в состояниях FM и AFM, вклад электронов в удельную теплоемкость  $\gamma$  изменяется при фазовом переходе, что может быть связано с изменением и перераспределением электронов марганца по орбиталиям. Стоит отметить, что аппроксимация  $C(T)/T$  для соединений с  $z=0.3$  и  $z=0.5$  не имеет физических решений для коэффициентов  $\alpha$ , что, по-видимому связано с наличием доменного FM и AFM упорядочения.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда №24-22-00236*

*Авторы благодарят Шайхутдинова К.А. (Институт физики имени Л. В. Киренского СО РАН) за содействие в написании тезисов.*

## Монитор тепловых нейтронов с конвертером В<sub>4</sub>С для спин-эхо спектрометра SEM

Терентьев К.Ю., Ильин Д.С., Пшеничный К.А., Тарнавич В.В.

НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.9

Для строящегося спин-эхо спектрометра SEM (реактор ПИК) разработан монитор тепловых нейтронов с В<sub>4</sub>С конвертером (рисунок 1). Монитор прошел успешные испытания на источнике нейтронов <sup>252</sup>Cf, получены характерные амплитудные спектры. С использованием β-источника <sup>90</sup>Sr продемонстрирована возможность надежного подавления низкоамплитудных событий. Амплитудный спектр β-частиц лежит в области низких амплитуд и может быть режектирован без заметной потери счета нейтронов.

Для оптимизации толщины конвертера, параметров электроники, изучения работы монитора в реальных фоновых условиях реактора дальнейшая работа будет направлена на тестирование мониторов на интенсивных монохроматических пучках тепловых нейтронов на ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна).

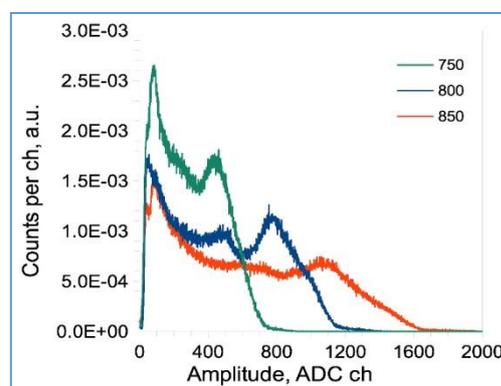


Рисунок 1. Фотография монитора (слева). Размер входного окна 60\*60 мм. Разъем RJ-45: 1) аналоговый выход, 2) TTL-сигнал (RS485), 3) LV-питание +/-5В, 4) уровень дискриминатора. Амплитудные спектры (справа) (нормировка на число событий) от источника нейтронов <sup>252</sup>Cf, измеренные при различных напряжениях на аноде HV<sub>а</sub>: (зеленая линия) 750 В, скорость счета 7.9 Гц, набор 17.5 ч; (синяя линия) 800 В, скорость счета 10.4 Гц, набор 18.7 ч; (красная линия) 850 В, скорость счета 10.9 Гц, набор 25.3 ч. Порог АЦП - 30 кан., 1 кан = 1 мВ. Газовая смесь 90%Ar + CO<sub>2</sub>

*Работа поддержана грантом РНФ (Project No 24-79-10063 «Разработка и создание систем регистрации нейтронов и компактной нейтронной защиты для данных систем, предназначенных для работы в условиях высоких пучковых загрузок и повышенного радиационного фона», рук. В.В. Тарнавич).*

## Поиск новых сульфатов суперпротонников и определение критериев суперпротонных фазовых переходов

*И.С. Тимаков<sup>1</sup>, В.А. Коморников<sup>1</sup>, В.В. Гребенев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 548, 538.9

Твёрдые электролиты, обладающие высокой протонной проводимостью при относительно низких температурах, без сомнения представляют большой интерес как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. В настоящее же время данный класс твердых протонных проводников является весьма разнообразным.

Перспективным объектом для исследований являются соединения со структурно-разупорядоченными фазами, характеризующиеся высоким значением протонной проводимости при средних и низких температурах. К ним можно отнести и кристаллы-суперпротонники, представленные семейством с общей формулой  $M_m H_n (AO_4)_{(m+n)/2} \cdot n H_2O$  (где  $M = K, Rb, Cs, NH_4$ ;  $AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, HAsO_4$ ).

Одним из уникальных свойств кристаллов данного семейства является аномально высокая протонная проводимость при повышенной температуре. Само состояние с высокой протонной проводимостью в кристаллах-суперпротонниках возникает, как правило, в результате структурного фазового перехода. Стоит отметить, что аномально высокая протонная проводимость в данном семействе кристаллов в большей степени связана именно со структурными особенностями и не зависит от влажности или дефектов реальной структуры.

В настоящее время крайне актуальной технологической задачей является получение материалов, пригодных для использования в качестве тонких мембран водородных топливных элементов. В связи с этим, идет непрерывный процесс усовершенствования уже известных составов твердых электролитов, в том числе и на основе кристаллов-суперпротонников. Для поиска новых соединений данного семейства нами был исследован ряд четырёхкомпонентных водно-солевых систем:  $K_2SO_4 - Rb_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$ ,  $K_2SO_4 - (NH_4)_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$ ,  $Rb_2SO_4 - (NH_4)_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$  и др. (рис. 1)

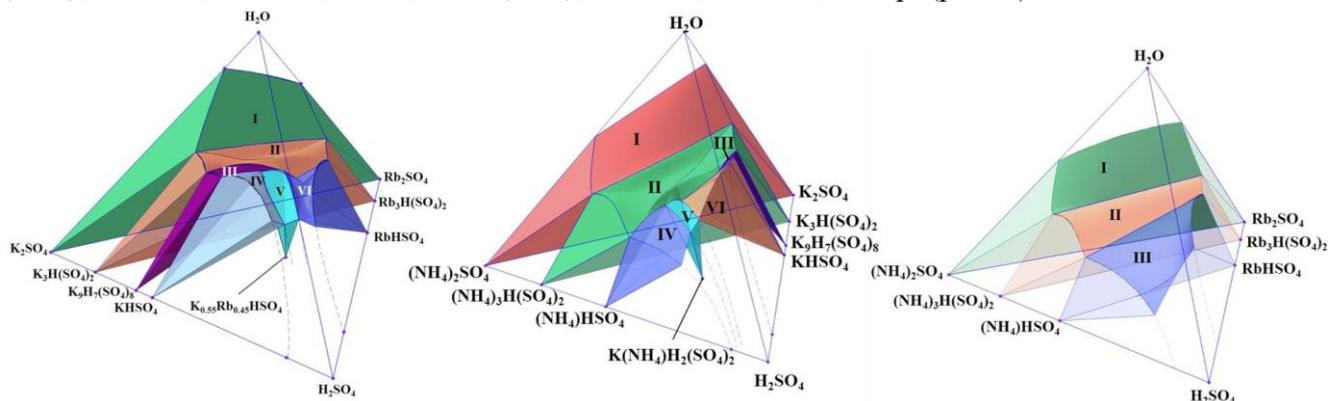


Рисунок. 1. Изометрическая проекция фазовых диаграмм  $K_2SO_4 - Rb_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$ ,  $K_2SO_4 - (NH_4)_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$  и  $Rb_2SO_4 - (NH_4)_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$ .

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники в рамках выполнения работ по Государственному заданию НИЦ «Курчатовский институт».

## Краевые состояния магнонов скирмионных кристаллов в неоднородном магнитном поле

***В.Е. Тимофеев<sup>1,2</sup>, Д.Н. Аристов<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 538.91, 538.955

Магнитные скирмионы – топологически нетривиальные вихри локальной намагниченности. В ферромагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мории скирмионы упорядочиваются в решётки, т.н. скирмионные кристаллы (СкК). В объёмных соединениях СкК наблюдаются в т.н. А-фазе, вблизи перехода в парамагнитную область, однако, в тонких плёнках область стабильности решёток магнитных скирмионов существенно расширяется в область низких температур [1].

Нетривиальное основное состояние приводит к особенностям динамики локальной намагниченности. Все возбуждения могут быть классифицированы в терминах волн деформации формы отдельных скирмионов: эллиптическая мода, дыхательная мода и др. Некоторые зоны обладают нетривиальной кривизной Берри и отличными от нуля числами Черна, при этом зонная структура чувствительная к изменению внешнего магнитного поля [2]. Ранее нами было показано, что в зонной структуре происходит топологический переход: с ростом внешнего магнитного поля энергетическая щель между дыхательной модой и модой «вращения против часовой стрелки» закрывается, что сопровождается изменением числа Черна каждой из зон [3].

С теоретической точки зрения исследуются локализованные возбуждения локальной намагниченности, возникающие в неоднородном магнитном поле: в одной половине пространства магнитное поле ниже критического, а в другой выше. Мы показываем, что в такой системе возникают киральные локализованные состояния, распространяющиеся вдоль границы, при это экспоненциально затухающие внутри областей. Степень локализации зависит от разности полей в разных областях.

Анализ проводится в формализме стереографической проекции, когда компоненты локальной намагниченности переписываются через функцию комплексного переменного. В рамках пробного анзаца минимизируется классическая энергия, после чего исследуются нормальные моды инфинитезимальных динамических флуктуаций стереографического образа [2]. Подобный подход позволяет проквантовать операторы локальной намагниченности и вычислить тензор однородной динамической восприимчивости [4].

1. Nagaosa N., Tokura Y. // Nature Nanotechnology. 2013. V. 8. P. 899.
2. Timofeev V. E., Aristov D. N. // Phys. Rev. B. 2022. V. 105. P. 024422.
3. Timofeev V. E., Baramygina Yu. V., Aristov D. N. // JETP Letters. 2023. V. 118. N. 12. P. 911-916.
4. Timofeev V. E., Aristov D. N. // JETP Letters. 2023. V. 117. N. 9. P. 676-680.

**Фазовые превращения в магнитной структуре  $TmFeO_3$  по результатам исследования методом дифракции нейтронов во внешнем магнитном поле**

***К.Ю. Ткаченко, А.К. Овсяников, О.В. Усманов***  
*НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.911

Перспективным в области материаловедения стало изучение магнитных свойств семейства соединений оксида железа  $Fe_2O_3$  с оксидами других металлов, которые принято объединять общим термином ферриты. В данной работе изучается соединение, имеющее общую формулу  $RFeO_3$ , где  $R$  – редкоземельный элемент. Такие ферриты обладают орторомбической кристаллической решёткой [1] и, в связи с этим, их принято называть ортоферритами. Одним из примечательных явлений, наблюдаемых в ортоферритах, является магнитокалорический эффект [2]. Он характеризует изменение температуры магнитного материала при изменении внешнего магнитного поля  $B$  в адиабатических условиях. Также было обнаружено, что редкоземельные ортоферриты обладают сегнетоэлектрической поляризацией при определённых температурах магнитного упорядочивания [3]. Все эти явления, наблюдаемые в ортоферритах, делают их перспективным материалом для создания устройств хранения информации со сверхвысокой плотностью записи и в целом для передовых технических устройств. В качестве исследуемого соединения был выбран тулиевый ортоферрит  $TmFeO_3$ , поскольку при исследовании магнитокалорического эффекта в этом соединении была обнаружена анизотропия изменения магнитной энтропии для разных направлений внешнего магнитного поля, что косвенно говорит о наличии новых магнитных фаз [4].

Для исследования предложенного соединения использовались методы рентгеновской дифракции и нейтронной дифракции во внешнем магнитном поле. Рентгеновские измерения проводились в Петербургском институте ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab. Нейтронные эксперименты были выполнены на дифрактометре D23 в Institut Laue-Langevin (ILL).

В результате обработки данных рентгеновского эксперимента были уточнены параметры кристаллической решётки и координаты атомов, на основе которых определено направление электрического дипольного момента. Кроме того, построены карты электронной плотности связей Fe-O-Fe и Tm-O-Fe, позволяющие косвенно продемонстрировать пути суперобменного взаимодействия.

В результате обработки нейтронных данных была построена магнитная фазовая диаграмма тулиевого ортоферрита при воздействии внешнего магнитного поля, направленного вдоль осей  $b$  и  $c$ .

1. Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озёров Р.П., Нейтронография магнетиков // Нейтроны и твёрдое тело. 1981. Т. 2. С. 97.
2. Дружинин В.В., Пономарев Б.К., Запасский С.П., Теоретическое и экспериментальное исследование характеристик тербия и диспрозия в сильных магнитных полях // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 47.
3. Tang G., Li Z., Ma L. et al, Three models of magnetic ordering in typical magnetic // Physics Reports. 2018. V. 758. P. 1-56.
4. Ke, YJ., Zhang, XQ., Ma, Y. et al. , Anisotropic magnetic entropy change in  $RFeO_3$  single crystals ( $R = Tb, Tm, \text{ or } Y$ ) // Scientific Reports. 2016. Sci Rep 6, 19775.

## Влияние отжига на размер гранул нанокompозита $\text{CoFeZr-MgF}_2$ с разным содержанием металлической фазы

*Т.В. Трезубова, А.В. Костюченко, О.В. Стогней*

*Воронежский государственный технический университет, Воронеж*

УДК:544.015.4, 538.9

Наногранулированные тонкопленочные композиты  $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени с неравномерным расположением навесок  $\text{MgF}_2$  на поверхности основания из металлического сплава  $\text{CoFeZr}$  в атмосфере аргона. Это позволило получить за один цикл синтеза композиты  $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  с содержанием металлической фазы от 10 ат. % до 47 ат. %. В качестве подложек для исследования физических свойств использовали пластины ситалла СТ-50, для рентгенодифракционных исследований – стеклянные подложки, для исследования микроструктуры с помощью электронографического исследования – подложки из монокристалла  $\text{NaCl}$ . Толщина полученных пленок составила  $0,8 \div 2,5$  мкм.

Исследован фазовый состав до и после отжига. Рентгенодифракционный анализ (РДА) показал кристаллизацию фаз  $\text{CoFe}$  с кубической решеткой и  $\beta\text{-MgF}_2$  с тетрагональной решеткой ( $a = 4,621 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,052 \text{ \AA}$ ). Размеры зерен фаз в композите  $(\text{CoFeZr})_{18}(\text{MgF}_2)_{82}$  3 нм и 5 нм соответственно. Тонкие пленки состава  $(\text{CoFeZr})_{41}(\text{MgF}_2)_{59}$  отличаются увеличенными размерами кристаллитов фазы  $\text{CoFeZr}$  (до 10 нм). Отжиг пленок композита с высоким содержанием  $\text{MgF}_2$  при  $450^\circ\text{C}$  приводит к увеличению размеров кристаллитов  $\text{MgF}_2$  в 1,5-2 раза при неизменном размере металлических гранул.

Результаты РД подтверждаются данными просвечивающей электронной микроскопии: структура композитной пленки  $(\text{CoFeZr})_{22}(\text{MgF}_2)_{78}$  в результате ТО ( $350^\circ\text{C}$ ) наногранулированная, с размерами наногранул диэлектрической и металлической фаз – 5-8 нм, соответственно. Полученные результаты обсуждаются в рамках структуры и ключевой роли диэлектрической фазы  $\text{MgF}_2$  и компонентов фазы металла.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект № FZGM-2023-0006).*

## Формирование кремниевых нанонитей методами МСХТ

*С.А. Турченик, С.А. Нефедов, Г.В. Пузырная*

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королева, Самара  
УДК: 539.232, 538.9*

В многочисленных технических приложениях широко используется кремний с развитой поверхностью. Наряду с пористым кремнием такая поверхность может содержать нанонити с характерной длиной в единицы и десятки нанометров. Метод МСХТ [1] позволяет получить нанонити с помощью химического травления поверхности в присутствии маски из благородных металлов.

Целью работы было получение нанонитей на поверхности кремния по технологии [2] с использованием маски из частиц  $\text{AgNO}_3$  в растворе плавиковой кислоты.

Кремниевые пластины с ориентацией  $\{100\}$  и  $\{111\}$  марок электронного КЭФ-7,5 и дырочного КДБ-3,5 помещались в водный раствор нитрата серебра для осаждения частиц маски. Затем пластины травились в растворе  $\text{HF}$  и  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Варьировалось время обработки пластин от 30 минут до 2 часов. Остатки маски удалялись азотной кислотой.

Исследование поверхности и поперечных сколов пластин методом оптической и растровой электронной микроскопии показало наличие структур, сходных с нанонитями, полученными авторами [2]. При этом была зафиксирована зависимость параметров нанонитей от времени обработки пластин и кристаллографической ориентации исходных пластин.

1. Бондаренко А.В., Невзоров К.А.. Формирование кремниевых нанонитей методом металл-стимулированного химического травления и исследование их оптических свойств // Доклады БГУИР. 2016. № 2. С. 128.
2. Gonchsr K.A. Golovan L.A. Photoluminescence and Raman Scattering in Wet Chemically Etched Silicon Nanowires // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. Т. 5. №4.

## **Рентгеновское исследование влияния легирующих примесей и постоянного магнитного поля на старение алюминиевого сплава В95пч**

***Р.Р. Уразов, Ю. В. Осинская, С.Р. Макеев***

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королева, Самара*  
УДК: 538.9, 621.785.78:537.636

Алюминиевый сплав В95пч и его аналоги широко применяются в авиации и космонавтике для создания универсальных легких конструкций [1]. Это достигается благодаря высокому соотношению прочности и веса, и способности выдерживать значительные нагрузки без разрушения. Перспективным инструментом улучшения эксплуатационных свойств сплава может выступать магнитное поле, которое влияет на формирования и концентрацию упрочняющих фаз [2].

В данной работе выясняется роль легирующих примесей и постоянного магнитного поля (ПМП) в формировании физико-механических свойств, фазового состава и параметров тонкой структуры технического алюминиевого сплава В95пч и модельного сплава Al-Zn-Mg при старении. Старение закаленных образцов проводили в вакууме при температуре 140 °С, времени старения от 2 до 8 ч в ПМП напряженностью 557 кА/м и без него.

Микротвердость измеряли с помощью микротвердомера HAUSER. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ выполняли на рентгеновском дифрактометре ДРОН-2.

Установлено, что старение в ПМП технического алюминиевого сплава В95пч всегда приводит к увеличению микротвердости до 21 %. Наблюдается, так называемый, отрицательный магнитопластический эффект (МПЭ) [3]. В свою очередь наложение ПМП на процесс старения модельного сплава Al-Zn-Mg не оказывает существенного воздействия на микротвердость сплава. Установлено, что микротвердость модельного сплава в среднем в 1,5-2 раза меньше технического. Метод рентгенофазового анализа показал, что старение обоих сплавов в ПМП приводит к увеличению полуширины дифракционных линий, соответствующих  $\alpha$ -твердому раствору на основе алюминия, что свидетельствует об искаженности кристаллической решетки по сравнению со случаем старения без ПМП. Причем, в техническом сплаве полуширина дифракционных линий меньше на  $0,2^\circ$  по сравнению с модельным сплавом. Данный факт свидетельствует о значимой роли легирующей примеси меди в формировании более совершенной и однородной структуры алюминиевого сплава В95пч. Кроме этого, обнаружено что при старении сплавов в ПМП средний размер блоков когерентного рассеяния становится всегда меньше, а плотность дислокаций и величина относительной микродеформации больше, чем в его отсутствие, что свидетельствует о большей искаженности кристаллической решетки. Причем в процессе старения в ПМП величина микродеформаций кристаллической решетки в техническом сплаве в 4 раза больше чем в модельном.

1. Фридляндер, И. Н. Алюминиевые сплавы в летательных аппаратах в периоды 1970–2000 и 2001–2015 гг. // Технология легких сплавов. 2002. № 4. С. 12.
2. Jun L., Hongyun L., Chu L., Tianshu Z., Runze W., Yue M. Effect of magnetic field on precipitation kinetics of an ultrafine grained Al–Zn–Mg–Cu alloy // Materials Science and Engineering. A. 2020. V. 798.
3. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Дивинский С.В., Магамедова С.Г. Магнитные свойства бериллиевой бронзы БрБ-2, состаренной в постоянном магнитном поле // Известия РАН. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 11. С. 1545-1552.

## Параметры метода электрохимического получения пористого кремния

*Д.А. Услин, С.А. Нефедов*

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королева, Самара  
УДК: 539.217.1, 538.9*

Пористый кремний (ПК) представляет собой перспективный материал для различных областей применения в оптоэлектронике [1,2]. Пористая поверхность имеет низкий коэффициент отражения, поэтому слой пористого кремния может быть использован как покрытие для солнечных элементов [3].

Целью работы являлось определение оптимальных параметров для травления кремния с ориентацией {111} в электролитическом растворе плавиковой кислоты (HF) и этилового спирта (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH) в соотношении 1:1. Был проведен эксперимент с различными параметрами плотности тока и времени травления. Травление проводилось при плотностях токов 16, 20, 31, 61 и 76 мА/см<sup>2</sup> в течении 5, 10, 20 и 30 минут. Всего было получено 20 образцов с различными параметрами травления.

С помощью гравиметрического метода определения пористости (отношение убыли массы кремния к остаточной массе) было установлено, что максимальной пористостью обладают образцы, которые травились в течение 20 минут при плотностях токов 76 и 20 мА/см<sup>2</sup>. Пористость таких образцов оказалась в диапазоне 0.4-0.45%.

С помощью оптического микроскопа Neophot 21 было установлено, что глубина полученных пор имеет величину порядка 90 мкм.

Был проведен анализ методом рентгеновской дифрактометрии, который показал, что в результате травления отражение смещается в сторону меньших углов на ~0.1° по шкале 2θ и претерпевает уширение ПШПВ (полная ширина на половине высоты) 0.65° по 2θ.

1. Latukhina N.V., et al. Multilayer nanostructures based on porous silicon for optoelectronics // *Photonics*. 2018. V. 12 No. 5(73). P. 508–513.
2. Хамзин Э.Х., Нестеров Д.А., Латухина Н.В. и др. Пористый кремний допированный эрбием для оптоэлектрических приложений. // *Физика.СПб: тезисы докладов международной конференции, 23–27 октября 2023 г.* С. 160–161.
3. Hyukyong Kwon et al. Investigation of Antireflective Porous Silicon Coating for Solar Cells // *International Scholarly Research Network ISRN Nanotechnology*. 2011.

## Методика расчета параметров кристаллического поля в редкоземельных ортоферритах $RFeO_3$

*О.В. Усманов, А.К. Овсяников, И.А. Зобкало  
НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.913

На основе данных рентгеноструктурного анализа, изотермической намагниченности и спектров неупругого рассеяния нейтронов для соединений  $RFeO_3$  ( $R = Dy, Ho, Tm$ ) в рамках модели точечного заряда были получены наборы параметров кристаллического электрического поля (КЭП) для соответствующих ионов редкоземельных металлов  $R^{3+}$  [1, 2].

Рассмотрены оптимальные алгоритмы определения параметров КЭП с использованием программных пакетов PyCrystalField и CrysFieldExplorer [3, 4]. Из наборов расчетных параметров были выполнены оценки расщепления энергетических уровней мультиплета основного состояния редкоземельного иона  $R^{3+}$ , а также температурных зависимостей спектров расщепления.

1. Hutchings M.T., Point-charge calculations of energy levels of magnetic ions in crystalline electric fields // Solid State Physics. 1964. V. 16. P. 227–273.
2. Ovsianikov A.K. et al. Magnetic phase diagram of  $HoFeO_3$  by neutron diffraction // J. Magn. Magn. Mater. 2022. V. 557. P. 169431.
3. Scheie A. PyCrystalField: software for calculation, analysis and fitting of crystal electric field Hamiltonians // J. Appl. Cryst. 2021. V. 54. P. 356–362.
4. Ma Q. et al. CrysFieldExplorer: rapid optimization of the crystal field Hamiltonian // J. Appl. Cryst. 2023. V. 56. P. 1229–1241.

## Магнитные состояния в многослойных нанопленках

*В.В. Филиппова, З.В. Гареева*

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа*

УДК: 537.622.4:537.63:537.624, 538.9

В последнее время наблюдается большой интерес к изучению материалов и наноструктур, в которых наблюдается несколько типов упорядоченности. Во многом это связано с вниманием, уделяемым корреляции двух или более параметров упорядоченности. Такие материалы вызывают к себе большой интерес в связи с их практическим применением в устройствах магнитной памяти с более высокой плотностью записи [1-3].

В данной работе рассматривалась четырехслойная ферромагнитная структура, состоящая из двух обменно-связанных би-слоев с различным типом магнитной анизотропии («легкая ось»-«легкая плоскость») (ЛО-ЛП)). Проведено исследование процессов намагничивания и перемагничивания в данной структуре при воздействии внешнего магнитного поля и наличии взаимодействия Дзялошинского-Мории (вДМ), исследовано влияние величины константы вДМ на магнитные состояния в системе.

Расчеты проводились с использованием пакета микромагнитного моделирования Object Oriented Micro Magnetic Framework (OOMMF) [4]. Для расчетов использованы следующие значения материальных параметров, которые соответствуют параметрам феррит-гранатовых пленок:  $M_i=50$  kA/m,  $A_{1,4} = 2.9 \cdot 10^{-12}$  J/m,  $A_{2,3} = 4 \cdot 10^{-12}$  J/m,  $K_{1,4} = -7 \cdot 10^5$  J/m<sup>3</sup>,  $K_2 = 2 \cdot 10^5$  J/m<sup>3</sup>,  $K_3 = 2 \cdot 10^3$  J/m<sup>3</sup>,  $J_{12,34} = 3.5 \cdot 10^{-12}$  J/m,  $J_{23} = 0.2 \cdot 10^{-12}$  J/m,  $D_3 = (1 - 9) \cdot 10^{-4}$  Дж/м<sup>2</sup>,  $a = 200$  нм,  $h = 24$  нм (для одного слоя) или 96 нм (для всей пленки), где  $A_i$  – константа неоднородного обменного взаимодействия  $i$ -ого слоя;  $K_i$  – константа магнитной анизотропии в  $i$ -ом слое,  $K_{1,4} > 0$ ,  $K_{2,3} < 0$ ,  $M_s$  – намагниченность насыщения,  $J_k$  – константа межслойного обменного взаимодействия, обозначение  $k=12, 23, 34$  введено с учетом номеров обменно-связанных слоев,  $a$  – длина/ширина пленки,  $h$  – высота,  $D_i$  – константа взаимодействия Дзялошинского-Мории.

Исследование продемонстрировало значительное влияние константы вДМ на процессы намагничивания и формирование топологических структур в многослойных ферромагнитных системах. В ходе намагничивания и перемагничивания этих систем, помимо ранее известных состояний в виде «точек Блоха», возникают новые трёхмерные топологические состояния «магнитные фужеры», обладающие формой конусных скирмионов. Внешний вид и структура этих топологических объектов зависят от величины и знака константы вДМ ( $D$ ). При малых значениях константы вДМ наблюдаются состояния в виде «точек Блоха» и конусных скирмионов. Однако, при увеличении значений константы вДМ состояние «точки Блоха» исчезает, что приводит к увеличению области существования состояния конусного скирмиона. При положительных значениях  $D > 0$  «магнитный фужер» принимает форму неелевского скирмиона, в то время как при отрицательных значениях  $D < 0$  в этом состоянии проявляется структура блоховского скирмиона.

1. Guo Z., Yin J. et al. Spintronics for Energy- Efficient Computing: An Overview and Outlook // Proceedings of the IEEE. 2021. V. 109. P. 1398.
2. He Q. L., Hughes T. L. et al. Topological Spintronics and Magnetoelectronics // Nat. Mater. 2022. V. 21. No. 1.
3. Мелтов К.Л. Топологическая память на многосвязных планарных магнитных нанозементах // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. № 2. С 85-101.
4. Donahue M. J. and Porter D. G. OOMMF User's Guide, Version 1.0, No. NIST IR 6376 // National Institute of Standards and Technology, 1999.

## Кристаллическая структура и магнитный порядок в слоистом теллурате $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$

*Н. С. Фокин, А. Е. Сулопарова, А. И. Курбаков*  
*НИИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина*

УДК:538.955

Соединения с общей формулой  $\text{A}_2\text{M}_2\text{TeO}_6$  (где А- ион одновалентного металла; М – магнитный ион), относятся к классу слоистых оксидов, характеризующихся рядом уникальных кристаллических и магнитных свойств, имеют широкий спектр перспектив в применении в области электрохимии, аккумуляторных материалов, катализа [1-2] и многих других.

В настоящей работе, методом нейтронной порошковой дифракции изучены кристаллическая структура и особенности магнитного упорядочения в двух квазидвумерных оксидах стехиометрического состава  $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ , полученных путём ионообменного синтеза из разных прекурсоров:  $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$  и  $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ .

Серия экспериментов проводилась на нейтронном порошковом дифрактометре G4.1 (LLB, Сакле, Франция) в диапазоне температур 1.5-35 К. Длина волны излучения составила 2.4283Å. Обработка полученных экспериментальных данных осуществлялась с применением полнопрофильного анализа методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

Оба образца, вне зависимости от прекурсора кристаллизуются в орторомбическую пространственную группу *Smca*, которая относится к типу T2 (где Т-тетраэдрическая координация щелочного иона, 2 - период повторяемости слоев при данной упаковке). Данная кристаллическая конфигурация характеризуется попеременным чередованием магнитоактивных слоев, состоящих из ионов  $\text{Ni}^{2+}$  и  $\text{Te}^{6+}$  с немагнитоактивными слоями, содержащими ионы  $\text{Li}^+$ .

Особенностью магнитоактивных слоев является гексагональное (сотобразное) расположение магнитных ионов никеля, окруженных шестью ионами теллура. У образца, полученного из  $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$  была обнаружена дополнительная фаза (16 вес. %) того же стехиометрического состава, имеющая моноклинные искажения и кристаллизующаяся в пространственную группу *C2/m*.

В программе *BASIREPS* с использованием подхода базисных векторов неприводимых представлений предложены решения магнитных структур на основании экспериментальных нейтронограмм, измеренных при самой низкой температуре  $T = 1.5$  К. Модели представляют собой сотовую слоистую структуру, внутри которой реализуется упорядочение типа «страйп», где присутствуют выделенные полосы антиферромагнитно упорядоченных магнитных моментов ионов никеля, лежащих в одной плоскости с волновым вектором  $k = (0.47; 0.47; 0.40)$  для соединения, полученного из  $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$  и  $k = (0.49; 0.47; 0.41)$  для соединения, полученного из  $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ . Величина магнитного момента для образца, полученного из  $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$  составила  $M = 3.34(6)\mu_B/\text{Ni}^{2+}$  и  $M = 2.48(6)\mu_B/\text{Ni}^{2+}$  для соединения, полученного из  $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ .

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, грант №24-12-00217.*

1. Evstigneeva M.A., Nalbandyan V.B., Petrenko A.A. et al. // Chem. Mater. 2011. V. 23. P. 1174.
2. Pu Y., Liu Y., Liu D. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2018. V. 43, P. 17271.

**Спиралеобразные олигомеры нанометрового размера как бистабильные динамические системы: компьютерный дизайн и характеристика методами полноатомной молекулярной динамики**

*М.А. Фролкина*

*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва*

*Центр проектирования молекулярных машин, Москва*

УДК: 538.91:539.2

Исследование наномасштабных молекулярных структур, способных переключаться между стабильными состояниями, играет важную роль в развитии нанотехнологий. Такие устройства, функционирующие в качестве триггеров, переключателей, сенсоров и преобразователей энергии, используют уникальные свойства бистабильных систем, которые важны не только для практических приложений, но и для развития теоретических концепций, таких как статистическая термодинамика.

В докладе будут представлены результаты исследования методами полноатомного молекулярно-динамического моделирования бистабильной динамики коротких пиридин-фурановых и пиридин-пиррольных олигомеров спиралеобразной формы в воде и тетрагидрофуране, которые, будучи размером всего в несколько нанометров, являются молекулярными аналогами нелинейных бистабильных систем, известных как осцилляторы Дуффинга [1, 2, 3]. Будут показаны режимы спонтанных вибраций и стохастического резонанса, характерные для нелинейных бистабильных систем. Примечательно, что из-за малых размеров нанопружин для активации спонтанных вибраций и стохастического резонанса достаточно тепловых флуктуаций окружающей среды.

Отдельный интерес представляет явление спонтанной синхронизации спонтанных вибраций связанных бистабильных систем, которое наблюдается в различных физических, химических и биологических системах в широком диапазоне пространственных и временных масштабов. Для наноразмерных устройств синхронизация также важна в контексте экспериментальной реализации моделируемых систем, так как она усиливает слабый выходной сигнал от индивидуального функционального элемента, сохраняя при этом чувствительность устройства к слабым воздействиям. Теоретически это явление описано моделями функционально связанных систем уравнений Ланжевена с бистабильным потенциалом, в которых функцию связи между бистабильными системами можно задать, например, через гармонический потенциал. Однако конкретное воплощение синхронизирующего взаимодействия на практике остается нетривиальной задачей. В докладе будут представлены оригинальные конструкции связанных пиридин-фурановых нанопружин, в которых удастся достичь достаточно высокой синхронизации их спонтанных вибраций [4].

1. Avetisov V.A., Frolkina M.A., Markina A.A., Muratov A.D., Petrovskii V.S. Short Pyridine-Furan Springs Exhibit Bistable Dynamics of Duffing Oscillators // *Nanomaterials*. 2021. V. 11. I. 12. Art. No. 3264.

2. Аветисов В.А., Астахов А.М., Валов А.Ф., Маркина А.А., Муратов А.Д., Петровский В.С., Фролкина М.А. Арки Эйлера и пружины Дуффинга размером в несколько // *Химическая физика*. 2023. Т. 42. № 6. С. 21–39; Avetisov V.A., Astakhov A.M., Valov A.F., Markina A.A., Muratov A.D., Petrovsky V.S., Frolkina M.A. Euler Arches and Duffing Springs of a Few Nanometers in Size // *Russian Journal of Physical Chemistry* 2023. V. 17. I. 3, P. 533-549.

3. Astahov A.M., Petrovskii V.S., Frolkina M.A., Markina A.A., Muratov A.D., Valov A.F., Avetisov V.A. Spontaneous Vibrations and Stochastic Resonance of Short Oligomeric Springs // *Nanomaterials*. 2024. V. 14. I. 1. Art. No. 41.

4. Frolkina M.A., Markina A.A., Petrovskii V.S., Astahov A.M., Muratov A.D., Valov A.F., Avetisov V.A. Collective bistability of pyridine-furan nanosprings coupled by a graphene plate // Preprint <https://arxiv.org/abs/2408.13371>.

## Получение и исследование магнитных свойств слоевых нанопроволок FeCoCu/Cu

Д.Р. Хайретдинова<sup>1,2</sup>, И.М. Долуденко<sup>2</sup>, Д.А. Улыбышев<sup>1</sup>, Л.В. Панина<sup>1</sup>, Д.Л. Загорский<sup>2</sup>,  
В.М. Каневский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва

<sup>2</sup>КККиФ НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

УДК: 537.622.4, 537.624.8, 669, 620.3, 538.9

Слоевые нанопроволоки (НП), состоящие из слоев ферромагнитного материала и диамагнитного спейсера могут представлять интерес в качестве функционального материала в электронике, нанoeлектронике, спинтронике, сенсорике, в биологических применениях и т.д. Данные структуры можно получать методами электрохимического осаждения. К таким методам относится метод матричного синтеза, который контролируемо изменять толщину и количество слоев как ферромагнитных материалов, так и спейсера.

В работе рассмотрено получение и исследование магнитных свойств слоевых НП FeCoCu/Cu, полученных методом матричного синтеза в порах полимерных трековых мембран с диаметром пор 100 нм.

НП были получены с использованием электролита, разработанного ранее в работе [1], при этом использовался импульсный режим осаждения: для получения слоев Cu напряжение осаждения составляло 0,6 В, для получения слоев FeCoCu – 1,8 В. Толщина слоев контролировалась количеством протекшего заряда в ходе осаждения слоя, а длина полученных НП составляла около 6 мкм. Далее, полученные НП исследовались методами растровой электронной микроскопии (РЭМ), энергодисперсионного анализа (ЭДС) и вибрационной магнитометрии.

Результаты РЭМ показали, что толщины слоев получаемых НП соответствуют расчетным значениям. При этом слои Cu и FeCoCu имеют четкие границы раздела и сохраняют свои толщины на всем протяжении роста. Ферромагнитные слои по данным ЭДС содержали 36 ат.% Fe, 59 ат.% Co и 5 ат.% Cu, в то время как в медных слоях Fe и Co отсутствовали.

Результаты магнитометрии показали, что как коэрцитивная сила, так и остаточная намагниченность образцов с фиксированной толщиной Cu 100 нм и разными толщинами слоев FeCoCu нелинейно убывают по мере увеличения толщины ферромагнитных слоев, что, вероятно, связано с сильными магнитодипольными взаимодействиями как между ферромагнитными слоями внутри НП, так и с ферромагнитными слоями соседних НП.

Полученные результаты говорят о возможности применения FeCoCu/Cu НП в качестве магнитных функциональных материалов для применений в нанoeлектронике, магнитных жидкостях, а также в качестве наполнителей для композитных материалов для применений в сенсорике.

*Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт», а также на базе НИТУ МИСИС.*

1. Хайретдинова Д.Р. и др. Нанопроволоки из тройных сплавов – особенности синтеза и магнитные свойства// Кристаллография. 2024. Т. 69. № 5. С. 866–875.

## Исследование флексодиелектрического эффекта в монокристаллах SrTiO<sub>3</sub>

*А.В. Халипов, Е.Д. Обозова, К.В. Дьяконов, В.Г. Залесский*

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*

УДК: 538.956

Флексоэлектрический эффект представляет собой взаимную связь между диэлектрической поляризацией и градиентом деформации [1]. Этот эффект привлекает к себе внимание как электромеханическое явление, которое наиболее ярко проявляется в диэлектрических и полупроводниковых кристаллах и пленках микронного и наноскопического масштаба с большими величинами диэлектрической восприимчивости, например, в сегнетоэлектриках.

Для описания флексоэлектрического эффекта разработана феноменологическая теория, согласно которой одно из электромеханических уравнений показывает линейную связь между индуцированной поляризацией и градиентом деформации [1]. Согласно этой теории, поляризующее действие неоднородной деформации аналогично приложению внешнего электрического поля. При этом, известно, что сегнетоэлектрические материалы обладают значительным нелинейным диэлектрическим откликом на внешнее воздействие.

Целью настоящей работы является исследование зависимости диэлектрического отклика на неоднородную деформацию и, следовательно, проверка линейного характера прямого флексоэлектрического эффекта в активных диэлектриках. Кристаллы SrTiO<sub>3</sub> (в дальнейшем - ST) удобны для изучения флексоэлектричества по ряду причин. Во-первых, обладают большой диэлектрической восприимчивостью, во-вторых, имеют centrosymmetric кубическую симметрию в широком температурном диапазоне, которая не маскирует флексоэлектрический эффект пьезоэлектричеством и, наконец, кристаллическая структура перовскита достаточно удобна для теоретических расчётов.

В настоящей работе экспериментально показано, что в тонких пластинах ST выше фазового перехода зависимость полярного отклика от градиента деформации (прямой флексоэлектрический эффект) достаточно хорошо описывается в линейном приближении. Нелинейность этого эффекта, связанная с зависимостью диэлектрической восприимчивости от неоднородной деформации, достаточно мала. Изменение восприимчивости составляет 0.04% при градиенте деформации  $0.5 \text{ m}^{-1}$  при комнатной температуре и возрастает до величины порядка одного процента при 120 К. Показано, что для того, чтобы вызвать такое же изменение диэлектрической проницаемости необходимо приложить поле  $E = 2.5 \text{ kV/cm}$ , которое на два порядка больше, чем поле, созданное флексоэлектрическим взаимодействием. Таким образом, изменение величины диэлектрической восприимчивости непосредственно связано с действием неоднородной деформации кристалла и существенно отличается от действия электрического поля. Для этого явления, по аналогии с флексокалорическим, флексомагнитным и др. эффектами, можно предложить название флексодиелектрического эффекта.

*Работа финансировалась за счет средств госзадания Минобрнауки РФ (тема FFUG-2024-0042).*

1. Tagantsev A. K., Yudin P. V. Flexoelectricity in solids: From theory to applications. Singapore : World Scientific Publishing Co., 2016. 412 p.

## Метод анализа EXAFS-спектров, содержащих перекрывающиеся сигналы

Э.Ф. Хаметова<sup>1</sup>, О.Р. Бакиева<sup>1</sup>, В.В. Кривенцов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский ФИЦ УрО РАН, Ижевск

<sup>2</sup>ЦКП «СКИФ», Кольцово

УДК: 543.427

Необходимые функциональные свойства сложных наноразмерных материалов зависят от строго определенной локализации атомов в структуре. Поэтому информация о локальном атомном строении материалов важна. Одним из методов исследования локальной атомной структуры является EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) спектроскопия. На исследуемое вещество воздействуют рентгеновским излучением, возбуждая при этом внутренний уровень атома, и регистрируют спектральную зависимость поглощения. EXAFS область содержит информацию о параметрах локальной атомной структуры: межатомные расстояния, координационные числа, параметры тепловой дисперсии атомов. Классическим методом анализа EXAFS-спектров является метод Фурье-преобразования.

Однако при исследовании сложных систем, в составе которых содержатся химические элементы с близкими значениями атомного номера, возникают трудности. На EXAFS-спектрах таких материалов будет наблюдаться область перекрытия нескольких краев поглощения. В данном случае спектр будет содержать сумму нескольких волновых чисел. Применение в данном случае метода Фурье-преобразования невозможно. Целью настоящей работы является разработать метод, позволяющий проводить анализ перекрывающихся EXAFS сигналов.

В данной работе рассматривается решение проблемы на примере систем Au-Pt. Для этих объектов наблюдается перекрытие более 70% от всего диапазона экспериментальных данных.

*Данная работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351. Исследования проводились с использованием средств совместного исследовательского центра "Поверхность и новые материалы" УдмФИЦ УрО РАН.*

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП "СКИФ" Института катализа СО РАН им. Борескова. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4-ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.*

## **Оборудование окружения образа и канала пучка для нейтронных применений**

*М. Д. Ходаков*

*Группа компаний «Научное Оборудование», Новосибирск*

УДК: 538.9

Нейтронные исследования являются мощным инструментом для изучения структуры и динамики материалов на атомном и молекулярном уровнях. В докладе рассматривается оборудование, используемое на восьми основных типах пользовательских станций для нейтронных применений: нейтронная дифракция, рефлектометрия, спектрометрия неупругого рассеяния, томография, малоугловое рассеяние (SANS), радиография, активация и интерферометрия. Для каждого метода подробно описаны ключевые компоненты, такие как монохроматоры, коллиматоры, детекторы, криостаты, вакуумные системы и программное обеспечение для анализа данных. Этот обзор даёт всестороннее представление о технологических решениях, благодаря которым проведение нейтронных исследований становится возможным, а также подчеркивает их роль в междисциплинарных научных исследованиях.

## Электропроводность композитных материалов на основе углеродных нанотрубок

*Д.В. Чалин, А.Д. Назаров*

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

УДК:538.9

Углеродные нанотрубки (УНТ) – уникальный материал, который сочетает в себе великолепные электрические, тепловые и механические характеристики [1], и благодаря этому является идеальным кандидатом для создания композитных материалов с улучшенными физическими свойствами. Простейший композит можно представить как некоторую полимерную матрицу, в которую погружены нанотрубки. Поскольку последние обладают экстремально высокой электропроводностью (достигая порядка  $10^6$  S/m, в зависимости от хиральности, длины и диаметра нанотрубок) и очень высоким аспектным соотношением, это позволяет образовывать перколяционные сети и значительным образом улучшать проводимость полимерных материалов даже при очень маленьких концентрациях УНТ, сохраняя гибкость итогового материала.

В настоящей работе строится аналитическая теория электропроводности композитов на основе одностенных УНТ. Как известно, бездефектные нанотрубки даже при комнатной температуре можно рассматривать как идеальные проводники, в которых электроны рассеиваются лишь на концах трубки [2]. В виду этого для описания электронной проводимости нанотрубок различной хиральности этого мы адаптируем приближение баллистической проводимости Ландауэра [3]. А затем на основе этого подхода, рассматривая материал, в котором приблизительно однородно распределены УНТ, мы строим простейшую модель электропроводности УНТ-композита.

Полученная теория была применена для анализа проводимости и подбора оптимальных характеристик синтезированных нами образцов, состоящих из силиконового компаунда АМЕФЛЕХ 1801 и одностенных УНТ. Полученный материал, будучи гибким и хорошо проводящим, является идеальной основой для создания нейроинтерфейсов нового поколения.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант №24-72-00075.*

1. Dresselhaus M. S. et al. Carbon nanotubes. – Springer Netherlands, 2000. P. 331-379.
2. Poncharal P. et al. Room temperature ballistic conduction in carbon nanotubes //The Journal of Physical Chemistry B. 2002. V. 106. No. 47. P. 12104-12118.
3. Chalin D. V., Avramenko M. V., Rochal S. B. Simple theory of low-temperature thermal conductivity in single-and double-walled carbon nanotubes //Physical Review B. 2017. N. 96. №. 15. P. 155413.

## **Влияние постоянного и импульсного магнитных полей на фазообразование при старении алюминиевого сплава АК9**

*А.А. Четверкин, С.Г. Магамедова, Ю.В. Осинская*

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королёва, Самара*  
УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

В настоящей работе представлены экспериментальные данные, подтверждающие влияние постоянного и импульсного магнитных полей (МП) на процесс фазообразования в алюминиевом сплаве АК9.

Образцы после выдержки 2 ч и последующей закалки от 535 °С в воду старили при температурах 140 и 175 °С длительностью 4 ч в постоянном МП напряженностью 2,5 и 7 кЭ, импульсном МП амплитудой напряженности 2,5 и 7 кЭ и частотой 2 и 5 Гц и без наложения МП.

В результате проведенного рентгенофазового анализа были получены дифрактограммы исследованных образцов, содержащие данные об угловых положениях, интенсивностях линий и межплоскостных расстояниях каждого образца. По полученным данным был идентифицирован фазовый состав, сформировавшийся в процессе старения в МП и без наложения поля.

При анализе экспериментальных данных было установлено следующее:

- рост напряженности постоянного МП при обеих температурах старения приводит к увеличению интенсивности дифракционных линий, соответствующих  $\alpha$ -твердому раствору на основе алюминия, до 5 раз и их смещению в сторону меньших углов до 0.19°;

- повышение амплитуды напряженности импульсного МП приводит к увеличению интенсивности дифракционных линий, соответствующих  $\alpha$ -твердому раствору на основе алюминия, до 16 раз, смещению их в сторону меньших углов до 0.14°, а также незначительному увеличению полуширины до 0.1°;

- увеличение частоты импульсного МП с 2 Гц до 5 Гц приводит к уменьшению полуширины дифракционных линий до 0.24° и смещению их в сторону меньших углов до 0.09°, а также увеличению интенсивности дифракционных линий до 13 раз, что свидетельствует о формировании более однородной структуры сплава;

- рост температуры старения при всех режимах термомагнитной обработки приводит к смещению всех наблюдаемых дифракционных линий в сторону меньших углов до 0.15°, увеличению их интенсивности до 21 раза, а так же уменьшению их полуширины до 0.28°.

- при всех режимах термомагнитной обработки наблюдается наличие фаз  $Mg_2Si$  и  $Si$ .

Данные результаты позволяют сделать вывод о том, что наложение постоянного и импульсного МП на старение алюминиевого сплава АК9 приводит к формированию совершенной и однородной структуры сплава.

**Синтез, исследование структурных и термических свойств молибдата уранила-натрия  $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{MoO}_4)_2$  и моделирование *ab initio***

**Г.Д. Чичеватов<sup>1</sup>, С.А. Артоболевский<sup>2</sup>, Л.Н. Подрезова<sup>2</sup>, В.В. Стегайлов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

<sup>2</sup>АО «ВНИИНМ им. Академика А. А. Бочвара», Москва

УДК: 546.791.6-381, 538.9

Интерес к системе  $\text{Na}_2\text{O}-\text{UO}_3-\text{MoO}_3$  связан с технологией пирохимической регенерации отработанного ядерного топлива в расплавах  $\text{Na}_2\text{MoO}_4-\text{MoO}_3$  [1]. Повышение выхода и чистоты продукта перекристаллизации — обширная задача для радиохимической технологии.

В настоящей работе методом твердофазного спекания синтезированы две модификации оксида  $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{MoO}_4)_2$ , индивидуальность которых подтверждалась посредством РФА и методом сканирующей электронной микроскопии с детектированием отраженных электронов. Высокотемпературная  $\beta$ -структура аналогична описанной в [2]. Низкотемпературная ( $\alpha$ ) не может быть однозначно отнесена к известным структурам. Согласно данным дифференциального термического анализа,  $\beta$ -модификация при 547 °С испытывает полиморфный переход в  $\beta$ -фазу.

В рамках метода DFT+U стандартные энтальпии образования 12 оксидов системы  $\text{Na}_2\text{O}-\text{UO}_3-\text{MoO}_3$  воспроизведены с точностью 0.048 эВ/ат., параметры ячеек  $\text{UO}_2\text{MoO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{MoO}_4)_2$ ,  $\text{Na}_6\text{UO}_2(\text{MoO}_4)_4$ ,  $\text{Na}_6(\text{UO}_2)_2\text{O}(\text{MoO}_4)_4$  — в основном 1-2%. В качестве возможных структур  $\alpha$ - $\text{Na}_2\text{UO}_2(\text{MoO}_4)_2$  рассмотрены оксиды аналогичного состава в системах K-U-Mo-O, Na-U-W-O, K-U-W-O, но смоделированные картины порошковой дифракции не объясняют наблюдаемой для  $\alpha$ -фазы. Полученная  $\beta$ -модификация может быть новой стабильной фазой.

1. Устинов О.А. Физико-химическое обоснование регенерации отработавшего оксидного уран-плутониевого топлива перекристаллизацией в молибдатных расплавах // Атомная энергия. 1997. Т. 82. № 2. С. 100–104.
2. Krivovichev S.V. et al. Crystal chemistry of uranyl molybdates. V. Topologically distinct uranyl dimolybdate sheets in the structures of  $\text{Na}_2[(\text{UO}_2)(\text{MoO}_4)_2]$  and  $\text{K}_2[(\text{UO}_2)(\text{MoO}_4)_2](\text{H}_2\text{O})$  // The Canadian mineralogist. 2002. V. 40. No. 1. P. 193–200.

**Структура пленки органического полупроводника – производного ди-тиофен-бензотиадиазола по данным рентгеновской рефлектометрии и рассеяния**

***Ю.С. Шаблов<sup>1</sup>, Ю.О. Волков<sup>1</sup>, Б.С. Роцин<sup>1</sup>, В.А. Постников<sup>1</sup>,  
Г.А. Юрасик<sup>1</sup>, О.В. Борцев<sup>2</sup>, В.В. Попова<sup>2</sup>, В.Е. Асадчиков<sup>1</sup>, А.Д. Нуждин<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>*НИЦ Курчатовский институт, Москва.*

<sup>2</sup>*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва  
УДК:548.73*

При исследовании тонких пленок и границ раздела широко применяются различные методы, основанные на взаимодействии рентгеновского излучения с веществом. Однако, когда подложки и наносимые на них покрытия не имеют выраженной кристаллической структуры, традиционные методы рентгеновской кристаллографии неприменимы [1]. В таких случаях эффективно использовать методику, основанную на эффекте полного внешнего отражения рентгеновских лучей. Используя это явление, метод рентгеновской рефлектометрии с учетом рассеяния излучения позволяет определить толщину пленки и её плотность.

В работе представлены результаты исследования тонкой пленки органического полупроводника, производного ди-тиофен-бензотиадиазола (Ost-T-BTD). Плёнка была получена методом вакуумного термического осаждения. В результате проведенных рентгеновских экспериментов было установлено, что исследованная плёнка состоит из 25 слоёв молекул вещества. При этом общая толщина покрытия составила 85 нм.

Изученный материал перспективен для создания изделий органической электроники, включая тонкопленочные транзисторы и фотоэлектрические устройства, а проведенные эксперименты полезны для оптимизации условий создания соответствующих покрытий.

*Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Иванов И.И.. Анализ результатов исследования // Ядерная физика. 1969. Т. 9. № 2. С. 283–291.
2. Saraswati T.E. et al. The Study of the Optical Properties of C<sub>60</sub> Fullerene in Different Organic Solvents // Open Chemistry. 2019. V. 17. No. 1. P. 1198–1212.

## Спектральный анализ кругового дихроизма некоторых белков после воздействия электроимпульса

*В.И. Шалгуев<sup>1</sup>, Обухова И. А.<sup>2</sup>, Соболева Н.Г.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет им. С.М. Кирова,  
Санкт-Петербург

УДК: 57.033, 538.9

Спектроскопия кругового дихроизма - это метод, основанный на оптической анизотропии, проявляющейся в различии коэффициентов поглощения света, поляризованного по правому и левому кругу. Данный эффект был открыт Э. Коттоном в 1911. Круговой дихроизм, измеряемый в молярной эллиптичности, может наблюдаться в оптически активных молекулах с хиральными центрами [1, 2]. Метод спектроскопии КД позволяет получать информацию о структурной организации и динамике молекул в растворе, в частности: оценить растворимость и стабильность белков; быстро и эффективно определить оптические изомеры; исследовать взаимодействия между белками и лигандами; проследить конформационные изменения вторичной структуры белков (например,  $\alpha$ -спирали и  $\beta$ -слои). Спектры КД, установленные в в дальнем УФ-диапазоне (от 185 нм до 250 нм), используются для анализа пространственной структуры белка в растворе.

Хиральность — это отсутствие симметрии относительно правой и левой стороны. Белки, как правило, имеют много хиральных центров. В данной работе анализировали характерные пики КД-спектров, характеризующие устойчивость к воздействию электрического импульса третичной структуры трех разных глобулярных белков в растворе: бычьего сывороточного альбумина, зеленого флуоресцентного белка и рибонуклеазы А.

Для генерации электрического импульса использовали электропоратор для бактерий и дрожжей. Белковые препараты готовили стандартными методами [3]. Измерения спектров кругового дихроизма белков проводили с помощью спектрополяриметра JASCO J-815. Спектры КД регистрировались при комнатной температуре в ячейке с длиной оптического пути 1 см. КД-спектры белков БСА и РНКазы А с минимумами при 208 и 222 нм и максимумом при 190 нм соответствуют белкам с большим содержанием  $\alpha$ -спиралей.

При определенных параметрах электрического импульса у каждого исследуемого белка после воздействия изменялась третичная структура. После анализа КД-спектров исследуемых белков, наиболее стабильным к воздействию электроимпульса оказался белок РНКазы А.

1. Bulheller B. M., Rodger A., Hirst J. D. Circular and linear dichroism of proteins // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2007. Т. 9. №. 17. С. 2020-2035.
2. Greenfield N. J. Using circular dichroism spectra to estimate protein secondary structure // *Nature protocols*. 2006. Т. 1. №. 6. С. 2876-2890.
3. Greenfield N. J. Methods to estimate the conformation of proteins and polypeptides from circular dichroism data // *Analytical biochemistry*. 1996. Т. 235. №. 1. С. 1-10.

## Исследование бактериостатических свойств наночастиц углерода и кварца шунгитовых пород

Н.Д. Шарпарь<sup>1,2</sup>, А.В. Степанова<sup>2</sup>, Т.А. Екимова<sup>2</sup>, Н.Н. Рожкова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИГ Карельского научного центра РАН, Петрозаводск

<sup>2</sup>Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

УДК: 549.514.51, 620,3 579.6, 538.9

В настоящее время одним из наиболее перспективных направлений использования наноуглеродных материалов является биомедицинское. Их применяют для доставки лекарственных препаратов, генного материала и биомакромолекул к тканям организма, в качестве покрытий для выращивания клеточных культур и для создания имплантантов [1].

В ИГ КарНЦ РАН были разработаны способы выделения наночастиц углерода и наночастиц кварца в виде устойчивых водных дисперсий из шунгитовых пород [2]. Было установлено, что в структуре наночастиц кварца присутствует графеноподобный шунгитовый углерод [3].

Прежде чем использовать полученные частицы в медицине, необходимо исследовать их взаимодействие с различными биологическими системами. Было проведено исследование биосовместимости наночастиц с молекулами белка, которое показало, что белок образует слой - корону на поверхности наночастиц, а модифицированные частицы не теряют устойчивости в воде. Задачей данной работы является изучение бактериостатических свойств дисперсий наночастиц углерода и наночастиц кварца шунгитовых пород.

Параметры наночастиц были определены при помощи рентгеноструктурного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния. Размер частиц и устойчивость дисперсий исследовали при помощи метода динамического рассеяния света. Из дисперсий капельным методом были получены пленки. Для анализа пленок использовалась сканирующая электронная микроскопия.

Проверка антибактериальных свойств проводилась по методике, описанной в XIV издании государственной фармакопеи Российской Федерации (ГФ РФ). Установлено бактериостатическое действие наночастиц кварца и наночастиц углерода на бактерии золотистого стафилококка (*Staphylococcus aureus*). Также было обнаружено, что наночастицы кварца являются стерильными, а наночастицы углерода требуют предварительной стерилизации.

Наночастицы кварца шунгитовых пород могут использоваться в качестве наполнителя для полимеров, для формирования покрытий, обладающих бактериостатическим эффектом.

Применение кварца для получения бактериостатических пленок позволит решить сразу две проблемы: безотходного применения шунгита и создания дешевого и простого в получении водостойкого покрытия, например, для садков рыбоводных хозяйств.

*Работа выполнена в рамках реализации Программы поддержки НИОКР студентов, аспирантов и лиц, имеющих ученую степень, финансируемой Правительством Республики Карелия и в рамках Госзадания КарНЦ РАН -FWME-0222-2019-0065.*

1. Chlopek, J., Rosol, P. Durability of carbon-polymer composite materials in biological environment // An Intern. Conference on Carbon at the Robert Gordon University, Aberdeen, Scotland, 2006.
2. Рожкова Н.Н., Ригаева Ю.Л., Рожков С.С., Ковальчук А.А. Наноразмерный кварц и способ его получения // Патент РФ №2778691. Бюл. 2022. № 24.
3. Шарпарь Н.Д., Ковальчук А.А., Горюнов А.С., Екимова Т.А., Рожкова Н.Н. Исследование наноразмерного кварца шунгитовых пород // Оптический журнал. 2023. Т. 90. № 9. С. 102–113.

## **Возможна ли эффективная дезактивация органосиликатных покрытий для АЭС?**

***О.А. Шилова<sup>1</sup>, Л.Н. Красильникова<sup>1</sup>, А.В. Смешко<sup>1</sup>, Т.А. Кочина<sup>1</sup>, В.Н. Епимахов<sup>2</sup>***

*<sup>1</sup>Филиал НИЦ «Курчатовский институт-ПНФ-ИХС, Санкт-Петербург*

*<sup>2</sup>ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», Сосновый Бор*

УДК: 546.287:667.6:621.039.7, 538.9

Органосиликатные покрытия (ОСП) были впервые разработаны в середине XX века в Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова АН СССР. В термин «органосиликатные» вкладывался особый смысл. Отличительное качество органосиликатных материалов в ряду полимерных, керамических, стеклокерамических, стеклокристаллических композитов – их способность сочетать ценные функции составляющих компонентов – кремнийорганических полимеров, гидросиликатов и оксидов тугоплавких металлов [1]. В научной литературе термин «органосиликатные» взаимозаменяем термином «гибридные» [2]. Благодаря кремнийорганической основе, химическому взаимодействию компонентов (полиорганосилоксанов и гидросиликатов), происходящему в процессе синтеза органосиликатной композиции за счет механоактивации, а также наличию в составе оксидов тугоплавких металлов, ОСП обладают атмосферостойкостью, термо- и радиационной стойкостью. Поэтому они нашли применение в различных областях техники. Одним из важных направлений использования ОСП является атомная промышленность. Для окраски оборудования АЭС успешно используется органосиликатная композиция ОС 51-03. В последние годы, в связи с тем, что Россия строит атомные станции по всему миру, возрос интерес к ОСП, появились требования, связанные с совершенствованием свойств ОСП на основе ОС 51-03, прежде всего с улучшением их дезактивируемости и с необходимостью отказа от покрывного слоя лака КО-921, который используется для повышения гладкости поверхности ОСП, но усложняет и удлинняет технологический процесс нанесения защитного покрытия. Первые шаги по оптимизации состава органосиликатной композиции ОС 51-03 были сделаны в отношении увеличения связующего (кремнийорганического лака) за счет уменьшения пигментов (тугоплавких оксидов). Опираясь на собственный богатый опыт и экспериментальные данные, было выбрано единственно правильное массовое соотношение компонентов, когда полимерное связующее полидиметилфенилсилоксан по отношению к гидросиликату не должно превышать 2.24 к 1. Это техническое решение было запатентовано [3]. Однако проведенные исследования дезактивируемости этого покрытия показало, что этот показатель необходимо улучшать. Поэтому целью данного исследования было улучшение дезактивируемости ОСП, полученного в соответствии с рекомендациями патента № 2748705, без ухудшения его физико-механических свойств. В докладе будут представлены результаты проверки дезактивируемости ОСП и рассмотрены пути улучшения этого показателя.

1. Шевченко В.Я. Шилова О.А., Кочина Т.А. и др. Экологически безопасные защитные покрытия для транспорта // Вестник РАН. 2019. Т 89. № 6. С. 593–602.
2. Кудина Е.Ф. Органосиликатные материалы (обзор) // Материалы. Технологии. Инструменты. 2013. Т. 18. № 4. С. 31–42.
3. Буслаев Г.С., Кочина Т.А., Красильникова Л.Н. и др. Теплостойкое органосиликатное защитное покрытие для АЭС. Патент RU № 2748705. / Заявка № 2019129205 от 16.09.2019 – Бюл. № 16.

## Особенности локального атомного окружения ионов кобальта в композитах на основе полиакрилонитрила

*И.В. Шишлов, В.А. Шматко, Г.Э. Яловега*  
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

УДК:538.915

В последнее время наблюдается тенденция к модифицированию органических полимеров солями переходных металлов — это позволяет создавать композиты с уникальными электро-, магнито-, био- и газо-чувствительными свойствами. Среди наиболее часто модифицируемых полимеров – полиакрилонитрил и полианилин, среди наиболее часто используемых добавок медь, железо, никель, цинк и кобальт. Кобальт в данной области является изученным много меньше своих сородичей, в связи с чем количество литературных данных о его соединениях и спектрах несколько ограничено. Поэтому исследования и интерпретация спектров кобальтсодержащих композитов является важной задачей в области изучения функциональных материалов.

В данной работе представлены результаты анализа экспериментального XANES спектра за К-краем поглощения кобальта fingerprinting-методом, в композите на основе полиакрилонитрила [1]. На основе предварительных данных были построены модели локального атомного окружения кобальта, оптимизированы методами молекулярной механики и смоделированы спектры рентгеновского поглощения моделей, методом конечных разностей в программном комплексе FDMNES [2]. Так же выполнен анализ химического окружения кобальта в полимерной матрице на основе данных, полученных из рентгеновских фотоэлектронных XPS спектров.

В результате анализа синхротронных XPS спектров линий кобальта установлено, что кобальт в композите находится преимущественно форме монооксида с небольшим содержанием металлического кобальта, а также может координироваться с азотом. Эти данные согласуются с результатами анализа XANES спектра за К-краем поглощения кобальта, показывающего, что ионы кобальта имеют октаэдрическое окружение, содержащее кислород, находясь преимущественно в степени окисления  $\text{Co}^{2+}$  [3]. По результатам проведённых расчётов спектров рентгеновского поглощения XANES за К-краем кобальта для набора структурных моделей установлены изменения локального окружения ионов кобальта в композите в сравнении с  $\text{CoO}$ .

1. Yalovega G. E., Semenistaya T. Chemical bonding specifics of hybrid metal-polymer nanocomposites based on cobalt nanoparticles and polyacrylonitrile: X-ray spectroscopy investigation //Solid State Phenomena. 2017. Т. 257. С. 175-178.
2. Bunău O., Ramos A. Y., Joly Y. The FDMNES code. 2024.
3. Wang S. et al. Identifying the geometric catalytic active sites of crystalline cobalt oxyhydroxides for oxygen evolution reaction //Nature Communications. 2022. Т. 13. №. 1. С. 6650.

## Фрактальная структура еловых веток с иголками и без иголок

О.Д. Шнырков<sup>1,2</sup>, Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, К.А. Пшеничный<sup>1</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 57.018.4, 53.01, 538.9

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что результат их измерения привычными нам мерами (длина, площадь, объём) зависит от выбора мерного отрезка (масштаба). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. Было показано, что боковая проекция листовенного дерева является логарифмическим фракталом, для которого выполняется закон сохранения площади [2].

Интерес с точки зрения фрактальной геометрии представляют различные структуры дерева и всё дерево в целом, как ветвящийся объект. Определение фрактальной размерности хвойных деревьев связано с дополнительными сложностями: дерево круглый год покрыто иголками, которые частично скрывают структуру ветвления дерева. В недавней работе [3] была предложена модель, описывающая фрактальную структуру ветвей ели с иголками, при этом основное внимание было уделено веткам с иголками. Возникает отдельный вопрос, а как устроена та же самая ветка, но без иголок?

Мы использовали метод численного Фурье-анализа для экспериментального изучения фрактальной структуры ветвей ели с иголками и без иголок. Были взяты одни и те же ветки – сначала с иголками, потом без иголок. Получены результаты для 15 веток (2 проекции с иголками и 2 проекции без иголок). Результаты для каждой ветки были усреднены и для них построены кривые малоуглового рассеяния. Полученные кривые в области малых и средних переданных импульсов (больших и средних масштабов) в случае веток с иголками и в случае веток без иголок аппроксимируются функциями одинакового вида:  $I(q) = A \cdot \exp((qb)^2/3) + P \cdot q^{-N}$ . При этом существенно отличается показатель степени  $N$ , характеризующий фрактальную размерность на крупных масштабах: для фотографий веток с иголками он близок к 1.9, а для веток без иголок около 1.4, оба этих показателя соответствуют массовому фракталу. Отклонение показателя степени  $N$  для веток с иголками от 2 (логарифмический фрактал) может объясняться тем, что взятые ветки росли близко к вершине. В работе [3] для верхних веток показатель степени  $N$  так же был меньше 2. В области больших переданных импульсов кривые существенным образом отличаются из-за наличия (отсутствия) на этих масштабах иголок.

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature // New York: Freeman. 1983.
2. Grigoriev S. V. et al. // Phys. Rev. E 105. 044412.
3. Григорьев С.В. и др. // ZhETF, V. 166, № 6, P. 888.

## Логарифмические фракталы: физический смысл подразмерности

О.Д. Шнырков<sup>1,2</sup>, Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, К.А. Пшеничный<sup>1</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 57.018.4, 53.01

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что результат их измерения привычными нам мерами (длина, площадь, объём) зависит от выбора мерного отрезка (масштаба). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. Было показано, что боковая проекция листовенного дерева является логарифмическим фракталом, для которого выполняется закон сохранения площади [2].

Для измерения фракталов используется мера Хаусдорфа. Чтобы получить меру Хаусдорфа, объект покрывают сферами, устремляя их радиус к нулю, количество сфер умножают на некоторую «пробную функцию», которую подбирают таким образом, чтобы мера оставалась ненулевой константой. Как правило, пробные функции имеют степенной вид, показатель степени в них определяется единственным образом и называется фрактальной размерностью. В некоторых случаях пробную функцию необходимо выбирать как произведение степенной функции и логарифмической функции в некоторой степени. Показатель этой степени называется логарифмической подразмерностью, физический смысл которой долгое время оставался неисследованным. Объекты, измеряемые мерой Хаусдорфа, в которую входит логарифм, называются логарифмическими фракталами. Исследования показывают, что очень часто живые системы развиваются по законам логарифмического фрактала (ветвление деревьев, упаковка хроматина в ядре биологических клеток [2, 3]), поэтому изучение логарифмических фракталов представляет интерес.

Чтобы определить физический смысл логарифмической подразмерности, мы построили меру Хаусдорфа для логарифмического фрактала «Дерево да Винчи», который строится за счёт того, что к углам каждого квадрата предыдущей генерации добавляется по четыре квадрата со сторонами в 2 раза меньше [4]. Из этой меры мы определили, что размерность этого фрактала равна 2, а его подразмерность равна -1. С помощью математического анализа меры Хаусдорфа для данного объекта мы определили, что знак логарифмической подразмерности показывает, увеличивается или уменьшается суммарная площадь (объём) фрактала при переходе от одной генерации к другой, а модуль подразмерности показывает, как сильно площадь (объём) меняется при этом. Чтобы подобная интерпретация была верна и непротиворечива, необходимо рассматривать фрактал, как последовательность «предфракталов» (изображений, полученных при конечном количестве генераций), при этом число генераций «предфрактала» соответствует его порядковому номеру в этой последовательности. Мы предложили алгоритм генерации фрактала «убывающее Дерево да Винчи»: процесс построения такой же, как и для обычного «Дерева да Винчи», но на каждом шаге суммарная длина фрактала остаётся постоянной. В этом случае площадь фрактала уменьшается с каждой генерацией и стремится к нулю при устремлении числа генераций к бесконечности. Построив меру Хаусдорфа для такого объекта, мы определили, что его фрактальная размерность равна 2, а подразмерность равна +1, что также подтверждает наш вывод о физическом смысле логарифмической подразмерности.

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature // New York: Freeman. 1983.
2. Grigoriev S. V. et al. // Phys. Rev. E 105. 044412.
3. Григорьев С.В. и др. // ZhETF, V. 163, № 3, P. 428.
4. Indekeu J. O. et al. //Physica A 261, 294 (1998).

## Термодинамика $\text{PbZrO}_3$ и $\text{PbHfO}_3$ вне теории Ландау

*П.Д. Шульга, Н.А. Архипов, Р.Г. Бурковский*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург*

УДК 681.777, 538.9

Антисегнетоэлектрики, как и сегнетоэлектрики, активно используются в устройствах хранения энергии, устройствах памяти и электрокалорических устройствах. Большинство прикладных свойств АСЭ-материалов основаны на их фазовых переключениях. Несмотря на то, что первые серьезные экспериментальные работы по изучению фазовых переходов проводились еще во второй половине прошлого века [1], механизм фазовых переходов не понят до конца даже к текущему моменту. Попытки же теоретически описать и смоделировать фазовые переходы наиболее прогрессивными методами высокотемпературного атомного моделирования [2] в чистых монокристаллах АСЭ уже начали давать положительные результаты, однако такие моделирования зачастую ограничены по многим параметрам (температура, размер кристалла) в силу большой вычислительной сложности.

Термодинамический подход, хоть и не позволяет в микромасштабе рассмотреть процессы в кристалле, лишен этих недостатков и способен описывать кристаллы реальных размеров при реальных температурах, однако на сегодняшний день нет ни одной работы, термодинамически описывающей индуцированные полем фазовые переходы в широком диапазоне температур.

Целью данной работы стало нахождение макроскопических термодинамических параметров (энтальпия ( $H$ ), энтропия ( $S$ ) и поляризация ( $P$ )) АСЭ монокристаллов  $\text{PbZrO}_3$  (PZO) и  $\text{PbHfO}_3$  (PHO) через свободную энергию Гиббса ( $G$ ).

Энергия Гиббса в координатах ( $T, E$ ), которая использовалась для определения диапазона стабильности каждой фазы. Для любой температуры и электрического поля фаза с наименьшей  $G$  стабильна. Изначальный вид  $G-E-T$  пространства может быть восстановлен по фазовой диаграмме решением системы уравнений Клапейрона-Клаузиуса для линий раздела фаз и вычислением соответствующих макроскопических термодинамических параметров: энтропии ( $S$ ) и поляризации ( $P$ ).

Используя рассчитанные параметры и меняя угол между поляризацией и внешним электрическим полем в формуле энергии Гиббса, становится возможным пересчет диаграмм для произвольного направления внешнего электрического поля. Таким образом, использование термодинамического метода, описанного в данной работе, позволяет прогнозировать значения критического поля переходов, значительно упрощая работу экспериментаторов. Результаты проделанной работы также находятся в соответствии с другими экспериментальными работами [3].

Данный подход также позволил выявить некоторые особенности фазовых переходов в АСЭ, которые до этого не обсуждались в научных работах.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 20-72-10126).*

1. O. Fesenko et al. The structural phase transitions in lead zirconate in super-high electric fields // *Ferroelectrics*. 1978. V. 20 P. 177.
2. Lisenkov S. et al. Prediction of high-strain polar phases in antiferroelectric  $\text{PbZrO}_3$  from a multiscale approach // *Physical Review B*. 2020. V. 102. No. 10. P. 104101.
3. N. Arkhipov, et al. In situ X-ray diffraction evidence of field-induced transitions in a  $\text{PbHfO}_3$  single crystal // *Applied Crystallography*. 2024. V. 57 P. 1184.

## **Трехосный спектрометр тепловых нейтронов на РК ПИК**

***М.Х. Юзюк, И.А. Зобкало***

*НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.97

Неупругое рассеяние нейтронов – основной универсальный метод исследования атомной и магнитной динамики в различных веществах, позволяет получить информацию о природе и характере сил и взаимодействий, которые определяют основные свойства и строение вещества.

На РК ПИК (Гатчина) активно ведется разработка трехосного спектрометра тепловых нейтронов IN1. Данный спектрометр предназначен для исследования неупругого рассеяния на коллективных возбуждениях в твердом теле, например, фононов, магнонов. Диапазон рабочих энергий нейтронов лежит в пределах от 15 до 100 мэВ, есть три сменных монохроматора с двойной фокусировкой – на основе пиролитического графита PG(002), германия Ge(220) и упруго изогнутых пластин кремния Si(111).

Основная задача, которая решается в данный момент – разработка секторной защиты монохроматора. Данный узел является важным и сложным компонентом спектрометра. Он должен обеспечивать плавное изменение энергии падающих на образец нейтронов в диапазоне углов от  $10^\circ$  до  $90^\circ$ , что выполняется посредством подвижных секторов. На спектрометре IN1 планируется использование 39 подвижных секторов, расположенных в два ряда, сдвинутых друг относительно друга для исключения «прострелов». Движение осуществляется посредством пневмоцилиндров. Сами сектора состоят из набора из нескольких материалов разных размеров: борированного полиэтилена, стали, свинца, борированной резины.

## Малоугловое рентгеновское рассеяние в скользящей геометрии на нанокластерах FeCoZr в матрице MgF<sub>2</sub>

О.Ю. Юракова<sup>1</sup>, М.А. Андреева<sup>1</sup>, Р.А. Баулин<sup>1,2</sup>, Е.А. Ганьшина<sup>1</sup>, М.Н. Борисов<sup>2</sup>, С.Н. Якунин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва

УДК: 539, 538.9

Методом GISAXS [1] исследовались образцы с нанокластерами FeCoZr, распределенными в диэлектрической матрице MgF<sub>2</sub>, для которых при определенных концентрациях включений обнаруживается гигантское магнетосопротивление при комнатной температуре. Карты рассеяния GISAXS измерялись на станции «ФАЗА» Курчатовского источника синхротронного излучения. Основная особенность карт – наличие дифракционного полукольца, свидетельствующего о некоторой радиально однородной периодичности в распределении наночастиц.

В рамках простейшей теории радиального паракристалла [2] для сферически однородного распределения частиц максимуму интенсивности соответствует условие  $QD=2\pi$ , где  $D$  – расстояние между рассеивающими частицами,  $Q$  – вектор рассеяния, что дает идеальный полукруг, радиус которого однозначно определяет среднее расстояние между частицами. В условиях скользящей геометрии  $Q$  становится комплексным и структура полукольца отличается от идеальной за счет эффектов преломления. Смещение максимума за счет преломления максимально для вертикального сечения ( $\Omega=90^\circ$ ,  $\Omega$  – угол между направлением радиального сечения карты и поверхностью образца), и оно уменьшается с уменьшением  $\Omega$ .

Анализ радиальных сканов экспериментальных карт обнаружил существенные особенности, значительно отличающиеся от теоретических. Для одного из образцов и углов радиальных сечений  $\Omega$  приближающихся к поверхности смещение неожиданно возрастает. Здесь возникает необычный для рентгеновской оптики эффект: пересечения брэгговского угла и критического угла полного внешнего отражения. При этом происходит обрезание переднего фронта и соответственно настоящего максимума брэгговского профиля, а получающийся максимум интенсивности смещается к большим углам.

Для второго образца смещение брэгговского максимума с уменьшением радиального угла сечения карты рассеяния для всех углов сечения увеличивается с уменьшением  $\Omega$ . Очевидно, что такое смещение не может объясняться эффектами преломления и влияния критического угла полного отражения. Приходится сделать вывод, что для этого образца имеет место не сферически однородное распределение частиц в матрице. Здесь выявляется эффект различия в латеральной и нормальной периодичности распределения нанокластеров в объеме матрицы.

Таким образом, качественный анализ экспериментальных карт рассеяния показал, что средние расстояния между частицами, определяемые по формуле  $2D\sin\theta = n\lambda$ , неточны. Детальная картина распределения частиц и их характеристик может быть получена только численной подгонкой, включающей множество параметров, в нашем случае совокупности радиальных сканов.

*Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В.Ломоносова.*

1. Renaud G., Lazzari R., Leroy F. Probing surface and interface morphology with grazing incidence small angle X-ray scattering // Surface Science Reports. 2009. V. 64 (8). P. 255-380.
2. Юракова О. Ю., Баулин Р. А., Андреева М. А. Теория рассеяния рентгеновского излучения в скользящей геометрии от наноконструктивных структур // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия. 2025. Т. 80, № 1. С. 2510502.

## Первопринципные расчеты наноматериалов: автоматизация работы с данными

А.Д. Якименко<sup>1</sup>, Е.В. Аникина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южно-Уральский государственный университет, Челябинск

УДК: 004.942-539.2, 538.9

Теория функционала электронной плотности позволяет достаточно хорошо моделировать структуру даже новых, еще не синтезированных экспериментально материалов. Но при использовании конкретного программного обеспечения для численного исследования свойств материала возникает проблема подбора параметров моделирования, которые могут достаточно сильно влиять на точность вычислений. Этот процесс подготовительных расчетов может быть достаточно объемным. Поэтому актуальной является автоматизация проведения подобной работы. Это позволит сократить количество рутинных операций, а значит приведет к уменьшению числа ошибок, возникающих из-за человеческого фактора.

В данной работе предпринята попытка улучшения пользовательского опыта взаимодействия с пакетом SIESTA [1], где имплементирована теория функционала электронной плотности. Для объединения модулей, работающих с входными и выходными файлами для SIESTA, нами разрабатывается единый интерфейс программы. Разработка ведется на языке Python, т.к. это позволит создать приложение, которому не требуются сторонние веб-интерфейсы, и которое будет работать во всех распространенных операционных системах (Windows, macOS, Linux).

Таким образом, нами создается графический пользовательский интерфейс для автоматизации запуска и обработки результатов преимущественно подготовительных расчетов, необходимых для определения оптимальных параметров моделирования в рамках теории функционала электронной плотности. Работа программы уже протестирована при поиске оптимальных параметров атомноподобного базиса для ряда низкоразмерных углеродных наноматериалов.

*Работа выполнена в рамках грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее».*

1. Soler J.M. et al. The SIESTA method for *ab initio* order-*N* materials simulation // J. Phys. Condens. Matter. 2002. V. 14. No. 11. P. 2745–2779.

## Structural and Magnetic Evolution in Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub>-Based Perovskites: Effects of Temperature and Substitutions

A.S. Abiyev<sup>1</sup>, V.G. Kostishin<sup>2</sup>, M. Čebela<sup>3</sup>, S.V. Sumnikov<sup>1</sup>, V. A. Turchenko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

<sup>2</sup>National University of Science and Technology MISiS, Moscow

<sup>3</sup>Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade

UDK: 537.9, 538.9

Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> is a double perovskite oxide exhibiting half-metallic ferromagnetism and high Curie temperature, making it a promising candidate for spintronic applications. Its structure alters Fe and Mo ions, leading to unique electronic and magnetic properties [1]. Additionally, Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> has been investigated for potential use in solid oxide fuel cells due to its considerable electronic conductivity and thermal stability [2]. In our work, the structural properties of Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> and its substituted variants, Sr<sub>2</sub>FeMo<sub>1-x</sub>Ta<sub>x</sub>O<sub>6</sub> (x = 0.05) and Sr<sub>2</sub>FeMo<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>O<sub>6</sub> (x = 0.15), were investigated using neutron diffraction at various temperatures by High Resolution Fourier diffractometer (HRFD, Dubna). All investigated samples are homogenous. The results provide insight into the effects of temperature and substitution on the lattice parameters. For the initial Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> sample, the unit cell volume increased with temperature, from 244.63 Å<sup>3</sup> at 4K to 246.11 Å<sup>3</sup> at 290K. The c-axis showed slight contraction with increasing temperature, while the a-axis expanded. These structural modifications indicate typical thermal expansion effects within the perovskite lattice. Upon substitution Sr<sub>2</sub>FeMo<sub>1-x</sub>Ta<sub>x</sub>O<sub>6</sub> with Ta (x = 0.05), the unit cell volume remained close to that of the undoped compound but exhibited a minor increase at intermediate temperatures, reaching 245.95 Å<sup>3</sup> at 250K. The a-axis displayed minimal expansion, while the c-axis remained stable. For the Vanadium substituted Sr<sub>2</sub>FeMo<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>O<sub>6</sub> (x = 0.15), the unit cell volume was consistently lower than both the initial and Ta-substituted samples, reaching 243.99 Å<sup>3</sup> at 4K. The c-axis showed a more pronounced reduction, suggesting lattice contraction due to Vanadium substitution. Compared to Ta substitution, the V-substituted sample displayed a stronger impact on structural contraction. The Ta-substituted sample shows only minor deviations from the pristine structure, maintaining stability across temperature variations. In contrast, V-substitution induces significant lattice contraction, demonstrating a more pronounced impact on the structural framework. These findings highlight the role of B-site substitutions in tailoring the thermal and structural behavior of double perovskites, with potential implications for their functional properties in various applications.

1. Farzin Y. A., Babaei A., Ataie A. Low-temperature synthesis of Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> double perovskite; structure, morphology, and magnetic properties. *Ceramics International*. 2020. V. 46. P. 16867-16878.
2. Manal Hajjami, Ali Oublkacem, Younes Benhouria. Unveiling the Multifaceted Nature of Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> Double Perovskites: Insights into Electronic and Optical Properties. *E3S Web of Conferences* 2025. 601. P. 00085.

## Molecular dynamics simulation of the distribution mechanism of proton in the carbonitride structure

*K. M. Hasanov<sup>1,2</sup> M.N. Mirzayev<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>*Institute of Radiation Problems, Baku*

<sup>2</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna*

*УДК: 538.9, 53.08*

The investigation into the crystal structure of carbonitride ceramic materials has garnered significant attention in recent years due to their remarkable mechanical, thermal, and electronic properties. Carbonitride ceramics, comprising elements such as silicon, boron, carbon, and nitrogen, exhibit a combination of high hardness, chemical stability, and resistance to oxidation and thermal degradation [1-3].

The molecular dynamics simulation is based on the systematic representation of particle flux interactions with the research objects. Changes in the surface morphology of the investigated sample occur as a result of the motion of the aforementioned particles. The modeling was performed using the Las Palmeras Molecular Dynamics software package, implemented in C++ on the "GOVORUN" supercomputer located at the Joint Institute for Nuclear Research Laboratory. The study demonstrates the time-dependent distribution of temperature along the depth of the structure and the wave energy transfer mechanism. The electron-phonon interaction coefficient for the thermal field is determined to be  $0.15 \times 10^{10}$  W/(cm<sup>3</sup>×K) and the radial energy distribution parameter is 1.30 nm.

1. Ramakrishnan P. et al. Silicoboron-Carbonitride Ceramics: A Class of High Temperature, Dopable Electronic Materials // *Applied Physics Letters*. 2001. V. 78. P. 3076-3078.
2. Lei Chen et al. First-principles study on a new type of quaternary carbonitride VWCN with outstanding mechanical properties // *International Journal of Refractory Metals & Hard Materials*. 2020. V. 92. P. 105319.
3. Jia D. et al. Metastable Si-B-C-N ceramics and their matrix composites developed by inorganic route based on mechanical alloying: Fabrication, microstructures, properties and their relevant basic scientific issues // *Progress in Materials Science*. 2018.

## Characterization of Thermal Effects on TiN Nanocrystals after Gamma Irradiation

*E.M. Huseynov<sup>1,2</sup>, A. S. Abiyev<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>*Institute of Radiation Problems of Ministry of Science and Education, Baku*

<sup>2</sup>*Nuclear Research Department of IDDA, Gobu Settlements, Baku-Shamakhi Highway, Baku*

<sup>3</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow*

УДК: 537.9

Titanium nitride (TiN) is a hard ceramic material known for its high thermal stability, corrosion resistance, and excellent mechanical properties [1]. It is widely used in protective coatings for cutting tools, biomedical implants, and microelectronics due to its wear resistance and conductivity [2]. This study examines the thermal and oxidation behavior of nanocrystalline TiN particles subjected to gamma radiation, focusing on oxidation kinetics, activation energy, and heat flow characteristics. The TiN material, with a particle size of 20 nm, a specific surface area of 50–80 m<sup>2</sup>/g, and a cubic structure with 99.2+% purity, was obtained from US Research Nanomaterials, Inc. Samples were irradiated at room temperature using a Co-60 gamma source at doses of 50 kGy, 200 kGy, 900 kGy, and 3.5 MGy at the Institute of Radiation Problems of MST. Thermal analysis was conducted using a Perkin Elmer STA 6000 device in a temperature range of 290K to 1273K with a heating rate of 5 K/min. Mass changes, heat flow, and activation energy were evaluated using PyrisManager software, and results were analyzed with OriginPro 9.0. Findings indicate that oxidation initiates at approximately 600K due to the high surface reactivity of nanocrystalline TiN, with a significant mass increase observed between 600K and 850K, attributed to the formation of titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) and the release of gaseous byproducts. Heat flow measurements confirm that oxidation primarily occurs during heating, with no significant changes detected during cooling, indicating post-oxidation thermal stability. Activation energy analysis reveals a stable oxidation mechanism, with deviations at lower temperatures linked to chemisorbed impurities. While gamma radiation has minimal impact on activation energy, it significantly enhances oxidation by generating additional reactive sites on the TiN surface. Moreover, high-dose irradiation shifts the oxidation onset temperature higher, suggesting structural modifications that improve oxidation resistance. These findings highlight the complex interplay between gamma irradiation, temperature, and oxidation behavior, emphasizing the need to consider radiation effects in high-temperature applications such as aerospace, nuclear technologies, and protective coatings. The results contribute to a deeper understanding of the oxidation kinetics of nanocrystalline TiN under radiation exposure and provide a basis for optimizing its stability and performance in extreme environments. Future studies should further investigate the long-term effects of radiation-induced structural changes and their implications for practical applications.

1. Mahajan U., Dhonde M., Sahu K., Ghosh P., Shirage P. M. Titanium nitride (TiN) as a promising alternative to plasmonic metals: a comprehensive review of synthesis and applications. *Materials Advances*. 2024.
2. Abiyev A. S., Huseynov E. M., Hashimov R. F. Gamma radiation-induced alterations in nanocrystalline titanium nitride (TiN) particles: A structural perspective. *Radiation Physics and Chemistry*. 2024;218: 111638.