

Научный Совет РАН
по физике конденсированных сред
Межгосударственный координационный Совет
по физике прочности и пластичности материалов
НИТУ «МИСиС»
ФГБУН Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН
ОАО «Гиредмет» ГНЦ РФ
Институт металловедения и физики металлов
ГНЦ РФ «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина»

МЕЖДУНАРОДНЫЙ СИМПОЗИУМ «ФИЗИКА КРИСТАЛЛОВ 2013»

*посвященный
100-летию со дня рождения
профессора М.П. Шаскольской*

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**Пятая Международная конференция
«КРИСТАЛЛОФИЗИКА 21-ГО ВЕКА»**

и

**ТРЕТЬИ МОСКОВСКИЕ ЧТЕНИЯ
по проблемам прочности материалов**



**28 октября – 2 ноября 2013 г.
МОСКВА**

СОДЕРЖАНИЕ

К 100-летию Марианны Петровны Шаскольской	3
Авдюхина В.М., Акимова О.В., Левин И.С., Ревкевич Г.П. Индуцированная водородом немонотонная структурная эволюция в фольгах сплава Pd-In-Ru	15
Авдюхина В.М., Акимова О.В., Левин И.С., Ревкевич Г.П. Структурная релаксация в фольгах сплавов на основе палладия после гидрогенизации, как процесс самоорганизации дефектных и структурных состояний	16
Аждаров Г.Х., Агамалиев З.А., Исламзаде Э.М. Гибридный метод выращивания однородных монокристаллов бинарных твёрдых растворов из расплава	17
Акчурин М.Ш., Гайнутдинов Р.В., Закалюкин Р.М. Бездислокационная пластичность кристаллов	18
Алисин В.В. Исследование механических свойств кристаллов триботехнического назначения методом кинетического микроиндентирования	19
Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Минюков С.А., Петржик Е.А., Морозов В.А., Кац В.М., Лукин А.А., Наими Е.К. Резонансная магнитопластичность в схеме ЭПР в сверхнизких магнитных полях	20
Амрастанов А.Н., Гинзгеймер С.А., Степович М.А. Оценка нагрева однородного полупроводникового материала электронным зондом	21
Андреева А.В., Деспотули А.Л. Влияние структуры гетерограниц на основе передовых суперионных проводников и углеродных материалов на характеристики суперконденсаторов в нанoeлектронике	22
Антипов В.В., Портнов О.Г. Кинетика роста из раствора кристаллов иодата лития при вытягивании за пределы зоны роста	23
Аранчий С.М., Ашкинази Е.Е., Большаков А.П., Конов В.И., Ральченко В.Г., Роголин В.Е. Алмаз - кристалл XXI века	24
Артемов И.В., Вьюненко Ю.Н. Эффект памяти формы и термоэлектрические явления	25
Багмут А.Г. О росте кристаллов в тонких аморфных пленках и принципе Гюйгенса	26
Базалевский М.А., Кольцов Г.И., Казаков И.П. Создание полупроводниковых фотоприемников для спектрального диапазона от 400 до 600 нм методом молекулярно-лучевой эпитаксии	27
Банишев А.Ф., Лотин А.А., Банишев А.А. Фото- и механолюминесценция микрочастиц люминафора $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$ в матрице фотополимера и создание сенсорных элементов механических воздействий	28
Баранникова С.А., Косинов Д.А., Надежкин М.В., Лунев А.Г., Дербичева Н.С., Зув Л.Б., Громов В.Е. Влияние электролитического наводороживания на изменение картин локализации пластической деформации малоуглеродистой стали	29
Батаев А.А., Гуськов А.В., Журавина Т.В., Милевский К.Е., Михайлова Н.Ю., Самойленко В.В. Исследование стали Гадфильда после ударно – волнового нагружения	30
Белов Н.А., Курбаткин И.И., Муравьева Т.И., Столярова О.О. Исследование трибологических свойств и структуры новых алюминиевых подшипниковых сплавов	31
Бессонов Д.А., Альшиц В.И., Любимов В.Н. Резонансное возбуждение интенсивных акустических пучков в кристаллах различных сингоний	32
Бешенков В.Г., Знаменский А.Г., Марченко В.А. Сегнетоэлектрические пленки ЦТС на гетероэпитаксиальных структурах Ir/YSZ/Si, полученные катодным распылением	33
Блецкан Д.И., Блецкан М.М., Фролова В.В. Влияние собственных и примесных точечных дефектов на электронную структуру и фотоэлектрические свойства сульфидов олова	34
Блецкан Д.И., Вакульчак В.В. Электронная структура суперионика Ag_2SiS_3	35
Блистанов А.А., Кузнецов О.М., Васильева Л.А. Влияние состояния примесных центров на лазерную стойкость щелочногогалоидных кристаллов	36
Бойко Ю.И., Волосюк М.А., Кононенко В.Г. Об особенностях формирования контакта между сдавливаемыми кристаллическими телами на заключительной стадии	37
Большакова Н.Н., Пугачева Н.А. Процессы переключения и диэлектрические свойства аланинсодержащих кристаллов триглицидсульфата	38
Борик М.А., Бублик В.Т., Кулебякин А.В., Ломонова Е.Е., Милович Ф.О., Мызина В.А., Самофалова И.В., Серяков С.В., Табачкова Н.Ю. Изменение структуры, плотности, трещиностойкости кристаллов частично стабилизированного диоксида циркония (ЧСЦ) в зависимости от содержания Y_2O_3	39

<u>Бочаров С.Н., Крючкова Л.Ю., Вихарев А.Е.</u> Рентген-томографическое изучение особенностей объемного распределения компонентов в изоморфно-смешанных кристаллах	40
<u>Бублик В.Т., Лаврентьев М.Г., Мурашев В.Н., Сорокин А.И., Самофалова И.В., Панченко В.П., Освенский В.Б., Табачкова Н.Ю.</u> Влияние процесса рекристаллизации на формировании структуры и свойств экструдированных твердых растворов халькогенидов Vi и Sb	41
<u>Бульенков Н.А., Желиговская Е.А.</u> Неравновесный нормальный рост природных и синтетических кристаллов алмаза с псевдокубической огранкой и их прочность	42
<u>Буравлев Ю.М., Милославский А.Г., Иваницын Н.П.</u> Особенности формирования реакционно-диффузионной зоны при химико-термической обработке сталей	43
<u>Бурханов А.И., Шейкин О.П., Ивлева Л.И.</u> Особенности акустических свойств монокристалла SBN-61 с примесью кобальта в области низких температур	44
<u>Бучинская И.И., Каримов Д.Н., Сорокин Н.И., Сульянова Е.А., Попов П.А., Соболев Б.П.</u> Получение монокристаллов и изучение процессов электро- и теплопереноса в конгруэнтно плавящимся твердом растворе $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{F}_2$ со структурой флюорита	45
<u>Бычкова М.Я., Петржик М.И., Левашов Е.А., Кирюханцев-Корнеев Ф.В., Цыганков П.А.</u> Механические и трибологические свойства многослойных наноструктурных тепловыделяющих покрытий Ti/Al	46
<u>Wojnar R.</u> Optimal defects in polycrystalline collagen fibrils packing	47
<u>Вейсман В.Л., Лукин А.Е., Соловьев В.Г., Трифионов С.В., Цема Г.С.</u> Электрические свойства монокристаллов цеолитов LiA и наноккомпозитов I/LiA	48
<u>Векилов Ю.Х.</u> Физические свойства квазикристаллов	49
<u>Велиханов А.Р.</u> Совместное влияние теплового поля и электрического тока на изменение физико-механических свойств Si	50
<u>Верозубова Г.А., Окунев А.О., Грибенюков А.И., Трофимов А.Ю.</u> Рост нелинейно-оптического материала ZnGeP_2 и структура его дефектов	51
<u>Вольхин А.М., Малышев В.Н.</u> Исследование прочности сцепления слоев в композиционном материале с МДО-покрытием	52
<u>Воронова Л.М., Дегтярев М.В., Чухарев В.Ф., Чашухина Т.И., Красноперова Ю.Г.</u> Структурные изменения в аустенитной стали, контактирующей с твердоксидным электролитом при 950°C	53
<u>Воскресенский В.М., Стародуб О.Р., Сидоров Н.В., Палатников М. Н., академик Калинин В.Т.</u> Моделирование энергетически равновесных кластеров в кристалле ниобата лития	54
<u>Галиярова Н.М.</u> Об аномалиях диэлектрического отклика, проводимости и последействия в области фазового перехода кристаллов титаната бария	55
<u>Галиярова Н.М.</u> Простейшая классификация типов диэлектрического отклика, проводимости и шумов и ее фрактальные обобщения	56
<u>Гантимиров Б.М., Елагина О.Ю.</u> О некоторых особенностях исследования процессов фреттинга в запорной арматуре	57
<u>Глезер А.М., Пермьякова И.Е., Шурыгина Н.А.</u> Эффект стабилизации размеров нанокристаллов в аморфно-нанокристаллических сплавах	58
<u>Голошумова А.А., Исаенко Л.И., Пашков В.М., Елисеев А.П., Огородников И.Н., Пустоваров В.А.</u> Выращивание новых сцинтилляционных кристаллов SrI_2 , легированных двух- и трехвалентными редкоземельными ионами, и исследование их свойств	59
<u>Грибенюков А.И., Филиппов М.М., Гинсар В.Е., Трофимов А.Ю.</u> Современное состояние технологии выращивания монокристаллов ZnGeP_2 для нелинейной оптики	60
<u>Гришунин В.А., Коновалов С.В., Воробьев С.В., Иванов Ю.Ф., Комиссарова И.А., Целлермаер В.Я., Громов В.Е.</u> Влияние электронно-пучковой обработки на формирование структурно-фазовых состояний в рельсовой стали, подвергнутой усталости	61
<u>Гусейнов Дж.И., Годжаев Э.М.</u> Зонная структура и оптические свойства соединения SnS	62
<u>Гусейнов Дж.И., Мургузов М.И., Годжаев Э.М.</u> Кристаллическая структура и физические свойства соединения Dy_2SnSe_4	63
<u>Даринская Е.В., Альшиц В.И., Колдаева М.В., Петржик Е.А., Шведченко Д.О.</u> Движение дислокаций в кристаллах NaCl(Ni) и NaCl(Ca) в постоянном магнитном поле и в схеме ЭПР радиодиапазона	64
<u>Деспотули А.Л., Андреева А.В.</u> Структурно-динамический подход в наноионике и приборы с быстрым ионным транспортом в наноэлектронике и микросистемной технике	65
<u>Дубовик А.М., Баумер В.Н., Зеня И.М., Литический В.А., Спасский Д.А., Тупицина И.А.,</u>	66

Якубовская А.Г. Новый сцинтилляционный монокристалл $Zn_xMg_{(1-x)}WO_4$, получение и свойства	
Дунаева Е.Э., Ивлева Л.И., Воронина И.С., Зверев П.Г., Дорошенко М.Е., Нехороших А.В. Выращивание и спектрально-люминесцентные свойства монокристаллов $SrMoO_4:Pr^{3+}$	67
Дьячкова И.Г., Новоселова Е.Г., Ополченцев А.М., Смирнов И.С. Имплантация протонов в упруго изогнутые кристаллы кремния	68
Елькин И.А., Волков В.А., Чулкина А.А., Протасов А.В., Елсуков Е.П. Влияние примесей кислорода и азота на состав фаз, образующихся при механосплавлении в системе Fe-C	69
Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р. Моделирование влияния винтовых супердислокаций на распространение электромагнитной волны в кварце	70
Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р. Моделирование зависимости оптических свойств кварца от плотности винтовых супердислокаций	71
Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р. Моделирование полей напряжений ансамбля винтовых супердислокаций в кристалле кварца	72
Еремкин В.В., Мараховский М.А., Смотряков В.Г., Панич А.А. Сегнетожесткая пьезокерамика с низкой температурой спекания	73
Ефремова П.В., Педько Б.Б., Кузнецова Ю.В., Малышкина О.В. СЭМ - АСМ: комплексный метод исследования реальной структуры сегнетоэлектрических кристаллов ниобата лития	74
Зуев Л.Б. Кристаллическое тело как универсальный генератор автоволн локализованной пластичности	75
Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Надежкин М.В., Горбатенко В.В. Автоволновая модель локализации деформации твердых тел и медленные движения в горных породах	76
Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Надежкин М.В., Лунев А.Г. Влияние водорода на картины локализации пластической деформации в ГЦК и ОЦК сталях	77
Зуев Л.Б., Шляхова Г.В., Баранникова С.А., Колосов С.В., Мальцев Ю.А. Исследование структуры элементов кабеля технических сверхпроводников на основе сплава Nb-Ti при многоступенчатом волочении	78
Иванов В.В., Педько Б.Б. Устойчивость поляризованного состояния в монокристаллах SBN	79
Ильин А.И., Трофимов О.В. Получение периодических инвертированных структур «точечным» облучением танталата лития в РЭМ	80
Исаев В.А., Лебедев А.В., Плаутский П.Г., Андреева Н.П., Евстигнеев В.Л., Митин К.В., Быкова М.Б., Гореева Ж.А., Козлова А.П., Козлова Н.С. Получение крупных монокристаллов со структурой шеелита и их оптические свойства	81
Исламзаде Э.М., Агамалиев З.А., Захрабекова З.М., Аждаров Г.Х. Акцепторный комплекс в термообработанном кристалле $Ge\langle Ni, Ga \rangle$	82
Исмаилов А.А., Сеидов Ф.И., Ахмедов Г.М., Исмаилов А.А. Безактивационная прыжковая проводимость в монокристалле $TlInS_2$	83
Kisel V.P. Deformation mechanisms control nuclear and radioactive decay, high energy physics	84
Kisel V.P. General role of localized deformation at phase transitions	85
Kisel V.P. Key role of deformation in the paradoxes of quantum theory	86
Kisel V.P. New evidence for the key role of deformation in biology	87
Кабанов Ю.П. Прямое экспериментальное изучение дефектов спиновой системы в трёхмерных и квазидвумерных магнетиках	88
Каневский В.М., Бутащин А.В., Муслимов А.Э., Бабаев В.А., Вовк Е. Сапфировые подложки с регулярным рельефом на поверхности	89
Каневский В.М., Бутащин А.В., Муслимов А.Э., Бабаев В.А., Исмаилов А.М., Рабаданов М.Х. Исследование процессов зародышеобразования наностержней оксида цинка на подложках (0001) Al_2O_3	90
Каневский В.М., Бутащин А.В., Муслимов А.Э., Бабаев В.А., Исмаилов А.М., Рабаданов М.Х. Особенности роста тонких пленок ZnO на подложках (0001) Al_2O_3	91
Каримов Д.Н., Кривандина Е.А., Бережкова Г.В., Марычев М.О., Сорокин Н.И., Сульянова Е.А., Соболев Б.П. Влияние концентрации структурных кластеров на твердость кристаллов флюоритовой фазы $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$	92
Каримов Д.Н., Сорокин Н.И., Соболев Б.П. Влияние примеси кислорода на пропускание и ионную проводимость кристаллов CeF_3	93
Каримов Д.Н., Сорокин Н.И., Сульянова Е.А., Соболев Б.П. Получение и ионная проводимость кристаллов твердого раствора $Sr_{0.7-x}Ba_xLa_{0.3}F_{2.3}$ ($0 \leq x \leq 0.7$) со структурой флюорита	94
Каримов Д.Н., Сорокин Н.И., Сульянова Е.А., Соболев Б.П. Рост кристаллов, ионная	95

проводимость и структура упорядоченной фазы $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$	
<u>Кащенко М.П., Чащина В.Г.</u> Динамическая теория зависимости температуры M_s сплава стехиометрического состава Fe_3Pt от степени упорядочения	96
<u>Кащенко М.П., Чащина В.Г.</u> Динамическая теория формирования двойников II рода при B2-B19' мартенситном превращении в сплавах на основе никелида титана	97
<u>Квашин Д.Г., Сорокин П.Б., Vancsó P., Márk G.I., Квашина О.П., Чернозатонский Л.А.</u> Новые углеродные сверхрешетки на основе двухслойного графена. Изучение структуры и свойств	98
<u>Керимова Э.М., Мустафаева С.Н., Гасанов Н.З., Асадов Ю.Г., Гусейнова К.М.</u> Получение, кристаллическая структура и физические свойства твердых растворов $\text{TlGa}_{1-x}\text{Er}_x\text{S}_2$	99
<u>Киселев Д.А., Жуков Р.Н., Быков А.С., Ксенич С.В., Малинкович М.Д., Пархоменко Ю.Н.</u> Влияние ориентации подложки на пьезоэлектрические характеристики тонких пленок LiNbO_3	100
<u>Клопотов А.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Морозов М.М., Маркова Т.Н.</u> Слабоустойчивые состояния и структурные изменения в области фазовых переходов в сплаве Cu_3Al	101
<u>Кобелева С.П., Анфимов И.М.</u> Применение радиационных технологий для получения высокоомного кремния с улучшенными характеристиками	102
<u>Ковалева М.Г., Колпаков А.Я., Поплавский А.И., Галкина М.Е.</u> Адгезионные характеристики наноразмерных углеродных покрытий, полученных вакуумно-дуговым методом	103
<u>Ковалева М.Г., Колпаков А.Я., Поплавский А.И., Галкина М.Е.</u> Влияние отжига на триботехнические характеристики наноразмерных алмазоподобных углеродных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым методом	104
<u>Коваленко А.Ф.</u> Обобщенный критерий термостойкости диэлектрических и полупроводниковых материалов при лазерной обработке	105
<u>Коваленко А.Ф.</u> Приближенный метод определения неразрушающих режимов лазерной обработки слабо анизотропных пластин	106
<u>Козлова А.П., Анфимов И.М., Козлова Н.С., Миляев Д.В., Сагалова Т.Б.</u> Управление приэлектродными процессами в полярном кристалле лантан-галлиевого танталата как способ снижения деградации поверхности	107
<u>Козлова Н.С., Бузанов О.А., Диденко И.С., Забелина Е.В., Козлова А.П., Симинел Н.А.</u> Оптические свойства лантан-галлиевого танталата в связи с условиями получения и послеростовой обработкой	108
<u>Козлова Н.С., Быкова М.Б., Бычкова М.Я., Гореева Ж.А., Диденко И.С., Левашов Е.А., Петржик М.И.</u> Роль стандартных образцов в работе аккредитованных испытательных лабораторий	109
<u>Козлова Н.С., Быкова М.Б., Гореева Ж.А., Диденко И.С., Ломакина Ю.С.</u> Результативность и улучшение системы менеджмента качества в испытательной лаборатории	110
<u>Козлова Н.С., Диденко И.С., Козлова А.П., Симинел А.В., Симинел Н.А.</u> Влияние изотермического отжига на люминесцентные свойства лантан-галлиевого танталата	111
<u>Колдаева М.В., Альшиц В.И., Петржик Е.А., Даринская Е.В., Белов А.Ю.</u> Низкочастотные спектры дислокационных пробегов в кристаллах NaCl в схеме ЭПР	112
<u>Колесников А.И., Каплунов И.А., Третьяков С.А., Гречишкин Р.М., Каплунова Е.И.</u> Взаимосвязь рельефа ростовой поверхности и структуры монокристаллов германия	113
<u>Колосов А.Ю., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В., Новожилов Н.В., Хашин В.А., Соколов Д.Н.</u> Моделирование процесса коалесценции наночастиц различной геометрии	114
<u>Колосов В.Ю.</u> Необычная трансротационные микрокристаллы, растущие в аморфных плёнках и новая микрокристаллическая модель аморфного состояния	115
<u>Колосов В.Ю., Агафонов Л.Ю.</u> Применение конформных преобразований для описания трансротационных микрокристаллов	116
<u>Кольцов Г.И., Диденко С.И., Черных А.В., Черных С.В., Свешников Ю.Н.</u> Нелегированные эпитаксиальные слои GaAs для детекторов быстрых нейтронов	117
<u>Комшина А.В., Коровушкин В.В., Шипко М.Н., Степович М.А.</u> Влияние магнитоимпульсной обработки на структуру и свойства титанового сплава ВТ23	118
<u>Кондратюк Н.В.</u> Влияние нелинейного поглощения излучения с длиной волны 266 нм на эффективность нелинейно-оптических преобразований в кристаллах ВВО	119
<u>Коневцова О.В., Рошаль С.Б., Лорман В.Л.</u> Кристаллический и квазикристаллический порядок в вирусных капсидах	120

<u>Конопляников А.Г., Злотин С.Г., Смирнов Б.Б., Кальсина С.Ш., Лепехина Л.А., Семенкова И.В., Агаева Е.В., Бабоян С.Б., Рюмишина Е.А., Носаченко В.В., Конопляников М.А., Ставрев С.</u>	121
С. Комплексы детонационных наноалмазов с ингибиторами раковых стволовых клеток или с паракринными продуктами мезенхимальных стволовых клеток как новые потенциальные лекарственные средства	
<u>Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К.</u>	122
Оптическая активность в кристаллах и живой природе	
<u>Косинова А.В., Притула И.М., Колыбаева М.И., Копыловский М.А., Гайворонский В.Я.</u>	123
Структура и физические свойства композитных материалов KDP:TiO ₂ и KDP:Al ₂ O ₃ ·nH ₂ O	
<u>Кох А.Е.</u>	124
Выращивание кристаллов в неоднородных тепловых полях	
<u>Коханчик Л.С., Емелин Е.В., Палатников М.Н.</u>	125
Периодические доменные структуры, сформированные электронным лучом в Z –срезах кристаллов LiNbO ₃ :MgO разного состава	
<u>Коханчик Л.С., Шандаров С.М., Волк Т.Р.</u>	126
Формирование доменов и периодических доменных структур при электронном облучении кристаллов LiNbO ₃ -0,5%Ti и в оптических волноводах Ti:LiNbO ₃ на Y-срезах	
<u>Крейцберг А.Ю., Браиловский В., Прокошкин С.Д., Коротицкий А.В.</u>	127
Исследование влияния структуры и текстуры сплава Ti-50,26 ат.%Ni при включении в цикл ТМО тепловой деформации на величину обратимой деформации	
<u>Крымов В.М., Носов Ю.Г., Бахолдин С.И., Маслов В.Н., Шульпина И.Л.</u>	128
Блочность и остаточные напряжения в стержнях сапфира различной кристаллографической ориентации, выращиваемых способом Степанова	
<u>Кубасов И.В., Быков А.С., Малинкович М.Д., Жуков Р.Н., Киселев Д.А., Ксенич С.В.</u>	129
Использование бидоменных структур на основе монокристаллического ниобата лития для производства актюаторов малых перемещений	
<u>Кузнецов О.М., Сагалова Т.М., Петраков В.С., Бузанов О.А., Базалевская С.С., Сахаров С.А.</u>	130
Высокотемпературный рентгеноструктурный анализ фазового состава кристаллов семейства лангасита	
<u>Кузнецов О.М., Петраков В.С., Бузанов О.А., Базалевская С.С., Сахаров С.А., Гастрок Й.</u>	131
Микроструктура и усталостная прочность кристаллов семейства лангасита	
<u>Кузнецов О.М., Петраков В.С., Сенатулин Б.Р., Бузанов О.А., Базалевская С.С., Сахаров С.А.</u>	132
Анизотропия теплофизических свойств кристаллов семейства лангасита	
<u>Кузнецов О.М., Петраков В.С., Табачкова Н.Ю., Базалевская С.С., Бузанов О.А., Сахаров С.А.</u>	133
Влияние термоудара на микроструктуру кристаллов ЛГТ	
<u>Кузнецов П.М., Федоров В.А.</u>	134
Анализ сигналов фотоэда, полученных регистрацией эрозионного факела в момент воздействия лазерного излучения на металлическую поверхность	
<u>Кульчицкий А.Н., Кульчицкий Н.А., Мельников А.А.</u>	135
Кристаллы Cd _{1-x} Zn _x Te для неохлаждаемых ядерных детекторов	
<u>Кульчицкий Н.А., Мельников А.А.</u>	136
Современные приборы на основе теллуридов кадмия и цинка	
<u>Кустов А.И., Мигель И.А.</u>	137
АМД-методы, как методы повышения надёжности и достоверности исследований качества материалов	
<u>Кустов А.И., Мигель И.А.</u>	138
Оценка влияния внешних физических воздействий на структуру и физические свойства материалов АМД-методами	
<u>Кустов А.И., Мигель И.А.</u>	139
Разработка способов обнаружения и характеристики дефектов полупроводниковых материалов АМД-методами	
<u>Lissowski A.</u>	140
Two alternating triple junctions of GB in any 2D polycrystal	
<u>Летко А.К., Савчук Г.К.</u>	141
Оптические свойства керамики системы (Zn _{1-x} Mg _x) - Ti - O	
<u>Литвиненко Н.Г., Загуляев Д.В., Комиссарова И.А., Коновалов С.В., Громов В.Е.</u>	142
Влияние магнитного поля на микротвердость поликристаллической меди	
<u>Литвинова В.А., Литвинова М.Н.</u>	143
Особенности упорядочения структуры легированных кристаллов ниобата лития	
<u>Лозовой К.А., Коханенко А.П., Войцеховский А.В.</u>	144
Моделирование процессов формирования квантовых точек германия на кремнии	
<u>Магомедов М.Н.</u>	145
О зависимости коэффициента теплового расширения от размера и формы безопорного нанокристалла железа	
<u>Магомедов М.Н.</u>	146
Об изменении коэффициента Пуассона при уменьшении размера нанокристаллов алмаза, кремния и германия	
<u>Майер Г.Г., Астафурова Е.Г., Кошовкина В.С., Тукеева М.С., Мельников Е.В., Добаткин С.В.,</u>	147

<i>Одесский П.Д.</i> Влияние кручения под квазигидростатическим давлением на структуру и механические свойства низкоуглеродистой стали 06МБФ	
<i>Максимов С.К., Максимов К.С.</i> Мероэдральное двойникование и наноструктурирование упорядочивающихся композиций	148
<i>Малыгин Г.А.</i> Прочность и пластичность наноразмерных кристаллов	149
<i>Малышкина О.В., Педько Б.Б., Моргушка И.В.</i> Влияние примеси Eu на диэлектрические свойства кристаллов SBN	150
<i>Маняхин Ф.И.</i> Малосигнальный метод определения параметров энергетических уровней в полупроводниковых структурах	151
<i>Маслов В.Н., Бахолдин С.И.</i> Моделирование габитусных форм кристаллов сапфира с использованием принципов подхода периодических цепей связей (ПЦС)	152
<i>Микрюков В.Р., Дябденков В.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Мясникова В.И., Громов В.Е.</i> Диффузионная проницаемость тройных стыков границ зерен в никеле	153
<i>Монахов И.С., Новоселова Е.Г., Нурждин А.Д., Смирнов И.С.</i> Особенности роста наноразмерных пленок при магнетронном распылении, выявляемые методом in-situ рентгеновской рефлектометрии	154
<i>Морченко А.Т., Костишин В.Г., Кожитов Л.В., Пилипосян Р.Д., Подгорная С.В., Костикова А.В., Попкова А.В.</i> Поглощение электромагнитного излучения в композитах на основе магнитных материалов	155
<i>Москвин П.П., Крижановский В.Б., Кузнецов В.В., Литвин П.М., Рашковецкий Л.В.</i> Мультифрактальные спектры поверхности сверхтонких полупроводниковых слоев в композитных структурах ZnCdTe- несогласованная и аморфная подложка	156
<i>Муратов Д.Г., Кожитов Л.В., Попкова А.В., Матвеев К.Е.</i> Влияние соединения железа на фазовый состав нанокompозитов Fe-Co/C	157
<i>Мусяенко А.Ю., Леонов В.П., Козлова И.Р., Паноцкий Д.А.</i> Компьютерное моделирование реальной структуры титановых сплавов при исследовании процессов деформирования и разрушения	158
<i>Мустафаева С.Н., Асадов М.М., Гусейнов Д.Т.</i> Комплексная диэлектрическая проницаемость и перенос заряда в монокристалле CdGa ₂ S ₄ на переменном токе	159
<i>Nguyen Dac Dien, Tong Van Trung, Dang Duc Vuong, Nguyen Hoang Hung, Nguyen Hong Viet</i> NH ₃ sensing property of WO ₃ nanorods prepared by ethanol catalysed hydrothermal treatment	160
<i>Набатов Б.В., Набатов В.В., Бузанов О.А., Каневский В.М., Корноухов В.Н., Федоров В.А.</i> Метод оперативного спектрофотометрического контроля слабого остаточного поглощения на примере монокристаллов CaMoO ₄	161
<i>Наими Е.К., Колдаева М.В., Бушуева Г.В., Зиненкова Г.М., Турская Т.Н.</i> Неупругое поведение монокристаллов гидрофталата калия при деформации ультразвуком	162
<i>Нгуен Хонг Вьет, Кожитов Л.В., Козлов В.В.</i> Влияние кислорода на структуру термообработанного полиакрилонитрила под действием ИК-нагрева	163
<i>Нгуен Хонг Вьет, Костикова А.В., Кожитов Л.В., Козлов В.В.</i> Свойства углеродного материала, полученного под действием ИК нагрева полиакрилонитрила	164
<i>Нечаев В.Н., Дежин В.В.</i> Изгибные колебания дислокации произвольной ориентации вблизи точки структурного фазового перехода	165
<i>Нечаев В.Н., Дежин В.В.</i> Функция линейного отклика дислокации произвольной ориентации вблизи точки структурного фазового перехода	166
<i>Никифоров В.Н., Гольдт А.Е., Гудилин Е.А., Средин В.Г., Игнатенко А.Н., Ирхин В.Ю.</i> Особенности магнитных свойств 4 нм наночастиц маггемита	167
<i>Никифоров В.Н., Игнатенко А.Н., Ирхин В.Ю.</i> Магнетизм наночастиц магнетита: эффекты конечного размера и покрытия	168
<i>Никифорова Н.А., Михеев Н.Н., Степович М.А.</i> О некоторых проблемах катодолуминесцентной диагностики электрофизических параметров прямозонных полупроводниковых материалов	169
<i>Никулин С.А., Рожнов А.Б., Розачев С.О., Дергунова Е.А., Алиев Р.М., Трактирников Н.В., Хаткевич В.М.</i> Деформационная способность ниобия и бронзы, используемых для производства технических сверхпроводников	170
<i>Onanko A.P., Lyashenko O.V., Prodayvoda G.T., Onanko Y.A., Lyashenko I.O.</i> Mechanical properties and defect nanostructure changing of Si, Si + SiO ₂ , GeSi and automated system of anisotropy visualization	171

<u>Овчаренко Н.В., Яковлев В.Ю., Трефилова Л.Н., Карнаухова А.Н.</u> Активаторные центры свечения в кристаллах CsI:Eu	172
<u>Окунев А.О., Верозубова Г.А., Ткаль В.А., Стащенко В.А., Жуковская И.А.</u> Анализ дефектов структуры монокристаллов ZnGeP ₂ методами рентгеновской топографии и фотоупругости	173
<u>Орлов В.И., Феклисова О.В., Якимов Е.Б.</u> Сравнительные исследования методами EBIC и LBIC солнечных элементов на основе мультикристаллического кремния	174
<u>Осадчая А.С., Золотов Д.А., Беседин И.С., Бузмаков А.В., Асадчиков В.Е., Смирнов И.С.</u> Применение метода рентгеновской топо-томографии для исследования трехмерной структуры кристаллов	175
<u>Осиян В.Г.</u> Кристаллохимические особенности простейших и смешанно-слоистых оксидов висмута	176
<u>Островский Б.И.</u> Кристаллы и гексатики - новый взгляд на строение фаз с пониженным трансляционным порядком	177
<u>Павлов Д.А., Лихачев А.Н.</u> Модель больших деформаций с учетом изменения площади поперечного сечения и модуля Юнга	178
<u>Панина Л.В., Морченко А.Т., Костишин В.Г., Юданов Н.А., Курочка С.П., Сергиенко А.А., Крупа Н.Н.</u> Использование магнитооптической эллипсометрии для исследования гетероструктур на основе наноразмерных металлических, полупроводниковых и диэлектрических слоев	179
<u>Панина Л.В., Юданов Н.А., Морченко А.Т., Костишин В.Г.</u> Использование явления недиагонального магнитоимпеданса для построения датчиков слабых магнитных полей и токов	180
<u>Папиров И.И., Николаенко А.А., Шокуров В.С., Тузов Ю.В.</u> Влияние условий деформации на образование встроенных зон в бериллии	181
<u>Петржик Е.А., Альшиц В.И., Иванова Е.С., Даринская Е.В.</u> Изменение микротвердости кристаллов TGS и ZnO в постоянном магнитном поле и в схеме ЭПР радиодиапазона	182
<u>Петржик М.И., Бычкова М.Я., Левашов Е.А.</u> Деформация и разрушение функциональных поверхностей при контактном нагружении	183
<u>Петржик М.И., Касимцев А.В., Свиридова Т.А., Чернавин Н.В.</u> Деформационное поведение биосовместимого титанового сплава Ti-Nb-Ta при формовании и спекании	184
<u>Петухов Б.В.</u> Эволюция размеров доменов при переключении состояний одномерной системы с дефектами	185
<u>Печина Е.А., Иванов С.М., Юшкова Д.Р., Дорофеев Г.А., Ладьянов В.И.</u> In situ регистрация структурно-фазовых превращений при сдвиге под высоким давлением методом непрерывного измерения крутящего момента	186
<u>Полетика Т.М.</u> Колебательная неустойчивость локализованного пластического течения в ГПУ-сплавов циркония	187
<u>Пономарев Р.С., Волынец А.Б., Вобликов Е.Д.</u> Влияние пироэлектрического эффекта в ниобате лития на работу интегрально-оптического модулятора интенсивности	188
<u>Прокофьев С.И., Йонсон Э., Дамен У.</u> Влияние тепловых колебаний и анизотропии энергии дислокации в алюминии на траектории теплового движения включений жидкого свинца, связанных с ней	189
<u>Прокофьев С.И., Йонсон Э., Дамен У.</u> Тепловое движение включений жидкого свинца, связанных с закрепленными дислокациями в алюминии	190
<u>Пушин В.Г., Белослудцева Е.С., Куранова Н.Н., Марченкова Е.Б., Пушин А.В., Уксусников А.Н.</u> Кристаллофизические закономерности термоупругих мартенситных превращений в сплавах с термически-, деформационно- и магнитоуправляемыми эффектами памяти формы	191
<u>Пыталев Д.С.</u> Проявление случайных деформаций кристаллической решетки в оптических спектрах высокого разрешения	192
<u>Пьянкова Л.А., Пунин Ю.О., Штукенберг А.Г., Комиссаров А.А.</u> Сложности рентгенодифракционного анализа гетерофазных монокристаллов	193
<u>Рабинович О.И., Кушхов А.Р.</u> Исследование влияния строения наногетероструктур на их свойства на основе компьютерного моделирования	194
<u>Рагимов Р.Н., Мамедов И.Х., Араслы Д.Г., Халилова А.А., Алиев М.И., Янушкевич К.И., Галяс А.В.</u> Получение и структура тонких пленок композитов GaSb-FeGa _{1,3} и InSb-MnSb	195
<u>Райков С.В., Ващук Е.С., Кобзарева Т.Ю., Будовских Е.А., Громов В.Е.</u> Структура износостойких покрытий, наплавленных электродуговым методом	196
<u>Романов Д.А., Олесюк О.В., Гагарин А.Ю., Будовских Е.А., Громов В.Е.</u> Износостойкие покрытия системы TiC-Mo, полученные методом электродугового напыления	197

<u>Рошупкин Д.В., Иржак Д.В., Плотицына О.А.</u> Исследование структурного совершенства, пьезоэлектрических и акустических свойств кристаллов группы лантангаллиевого силиката	198
<u>Русаненко В.В., Филиппова В.П., Блинова Е.Н., Макушев С.Ю.</u> Формирование высокопрочных наноструктурных состояний на основе комбинированных фазовых превращений в многофункциональных сталях	199
<u>Рыбалка И.А., Галкин С.Н., Лалаянц А.И.</u> Влияние дефектов структуры на механические и оптико-люминисцентные параметры кристаллов ZnSe и твердых растворов на их основе	200
<u>Рябочкина П.А., Ломонова Е.Е., Малов А.В., Сидорова Н.В., Ушаков С.Н., Чабушкин А.Н.</u> Спектрально-люминесцентные свойства кристаллов стабилизированного иттрием диоксида циркония, активированных ионами Eg^{3+} , Tm^{3+} , Ho^{3+} , и ИК-лазеры на их основе	201
<u>Самсонов В.М., Бембель А.Г., Васильев С.А.</u> Молекулярно-динамическое моделирование плавления и кристаллизации нанокластеров переходных металлов	202
<u>Сахаров М.В., Средин В.Г., Дуванов Б.Н., Астраускас Й.И., Гостев А.А.</u> Тепловая модель функционирования двухдиапазонного матричного фотоприемного устройства на основе HgCdTe в поле лазерного излучения	203
<u>Сдобняков Н.Ю., Ванюшева Т.А., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Новожилов Н.В., Михайлов А.С.</u> О влиянии поверхностных и объемных дефектов на термодинамические и структурные характеристики наночастиц металлов при фазовом переходе плавление-кристаллизация	204
<u>Сидоров Н.В., Яничев А.А., Габаин А.А., Палатников М.Н., Пикуль О.Ю.</u> Оптическая однородность и фоторефрактивные свойства кристаллов ниобата лития, легированных катионами Zn^{2+}	205
<u>Скворцов А.А., Каризин А.В.</u> Дислокационный энгармонизм и магнитопластичность кремния	206
<u>Скворцов А.А., Корячко М.В.</u> Миграция расплавленных включений Al-Si в поле структурной неоднородности кремния	207
<u>Скворцов А.А., Хортов В.П., Скворцов П.А.</u> Изучение высокоэффективных пористых материалов на основе наноструктурированного диатомитового сырья	208
<u>Скворцова Н.П.</u> Высокотемпературная пластичность ковалентных монокристаллов парателлурита	209
<u>Смирнов Б.Б.</u> Роль центрального эллипсоида инерции в определении хиральности произвольного объекта	210
<u>Смирнова А.Н., Батурин И.С., Азанова И.С., Ахматханов А.Р., Шур В.Я.</u> Движение доменных стенок в конгруэнтном ниобате лития, модифицированном протонообменными волноводами	211
<u>Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Кутилин П.С., Новожилов Н.В., Михайлова О.В., Антонов А.С.</u> Моделирование взаимодействия зонда сканирующего туннельного микроскопа с образцом в системе медь-золото	212
<u>Сорокин Б.П., Квашинин Г.М., Бормашов В.С., Волков А.П., Теличко А.В., Гордеев Г.И., Терентьев С.А., Бурков С.И., Золотова О.П.</u> Исследования СВЧ акустических свойств пьезоэлектрических слоистых структур AlN/монокристаллический алмаз	213
<u>Сорокин Н.И., Каримов Д.Н., Соболев Б.П.</u> Изменение фтор-ионной проводимости (при 500 К) при морфотропных переходах в ряду трифторидов редкоземельных элементов	214
<u>Сорокин Н.И., Новикова Н.Е., Сорокина Н.И., Шалдин Ю.В.</u> Ионный транспорт в сегнетоэлектрических монокристаллах $MTiORO_4$ ($M = K, Rb; R = P, As$)	215
<u>Сосков А.А., Микрюков В.Р., Старостенков М.Д., Мясникова В.И., Громов В.Е.</u> Массоперенос в биметаллах Ni-Fe, Ni-Al при наличии комплексов вакансий в поле дислокаций несоответствия	216
<u>Средин В.Г., Никифоров В.Н., Оксенгендлер Б.Л.</u> К проблеме эффективной массы в наноматериалах	217
<u>Столяров В.В.</u> Пластическая деформация сплавов при воздействии импульсного тока	218
<u>Суворова Е.И., Клечковская В.В.</u> Структура материалов на основе силицида марганца и их термоэлектрические свойства	219
<u>Суворова Е.И., Пушкарев С.С., Галиев Г.Б., Имамов Р.М.</u> Напряженные сверхрешетки $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$ в НЕМТ гетероструктурах	220
<u>Сүндеев Р.В., Шалимова А.В., Глезер А.М.</u> Особенности структурно-фазовых превращений «аморфное состояние \leftrightarrow кристалл» в металлических сплавах при мегапластической деформации в камере Бриджмена	221
<u>Супрун И.Т.</u> Влияние ловушек на диффузионные процессы в кристаллах	222
<u>Сурсаева В.Г.</u> Изучение особенностей поведения растущих и исчезающих зёрен в двумерных фольгах алюминия при нормальном росте зерен	223

<u>Таланин В.И., Таланин И.Е.</u> Диффузионная модель дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния	224
<u>Таланов М.В., Таланов В.М., Широков В.Б.</u> Упорядочение катионов в структуре перовскита – теоретико-групповое исследование	225
<u>Талипов Н.Х., Войцеховский А.В.</u> Активация ионно-имплантированных атомов бора и азота в гетероэпитаксиальных слоях $Cd_xHg_{1-x}Te$	226
<u>Тараканов П.В., Романов А.Н., Шашурин Г.В.</u> Рост трещин в элементах конструкций из металлических материалов под влиянием водорода и циклического нагружения	227
<u>Теличко А.В., Сорокин Б.П.</u> Исследование нелинейных электромеханических свойств монокристалла танталата лития	228
<u>Терещенко А.Н., Штейнман Э.А., Мазилкин А.А., Хорошева М.А., Кудренко Е.А., Конончук О.</u> Структура и электронные свойства дефектов на границе соединенных пластин кремния	229
<u>Тимошенко Н.Н.</u> Определение предельной концентрации примесей в исходном сырье для выращивания длинномерных сцинтилляторов CsI	230
<u>Ткаль В.А., Окунев А.О., Жуковская И.А.</u> Количественные критерии оценки качества топографических изображений дефектов структуры монокристаллов	231
<u>Ткаль В.А., Окунев А.О., Жуковская И.А.</u> Повышение быстродействия вейвлет-обработки экспериментального контраста монокристаллов	232
<u>Торщина Е.С., Кугаенко О.М.</u> Анизотропия микротвердости и микрохрупкости кристаллов семейства лангасита	233
<u>Тукеева М.С., Мельников Е.В., Майер Г.Г., Кошовкина В.С., Астафурова Е.Г.</u> Закономерности эволюции структуры высокомарганцевых аустенитных сталей в процессе интенсивной пластической деформации	234
<u>Федоров В.А., Новиков Г.В.</u> Влияния β -облучения на процессы деформации и разрушения ЦГК при микроиндентировании	235
<u>Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Сидоров С.А., Яковлев А.В.</u> Влияние импульсного электрического тока на ход диаграммы разгрузки аморфных и нанокристаллического сплавов	236
<u>Феклисова О.В., Якимов Е.Б.</u> Влияние переходных металлов на электрические свойства протяженных дефектов в мультикристаллическом кремнии	237
<u>Феклисова О.В., Ярыкин Н.А.</u> Кинетика отжига центров V_iO_i в кремнии, облучённом электронами с высокой энергией	238
<u>Филиппова В.П., Томчук А.А., Перлович Ю.А., Крымская О.А.</u> Перераспределение растворенных элементов между структурными компонентами сплавов на основе альфа-железа в условиях стесненной мегапластической деформации	239
<u>Хаимзон Б.Б.</u> Комбинаторно-логическая теория структур	240
<u>Хаимзон Б.Б.</u> Теоретический вывод возможных сверхструктур	241
<u>Хесс Мартин, Мозильников Ю.В.</u> Скретч-тест: модель и реальность	242
<u>Храповский Г.М., Гарифзянова Г.Г.</u> Моделирование структуры кластера Pt_2Os_3	243
<u>Хрущов М.М., Атаманов М.В., Марченко Е.А., Петржик М.И., Левин И.С.</u> Алмазоподобные наноккомпозитные покрытия а-С:N:Сг - структурное состояние, механические и трибологические свойства	244
<u>Чернозатонский Л.А., Демин В.А.</u> Бислойные гексагональные структуры, соединенные с нанотрубками: геометрия и физические свойства	245
<u>Чувильдеев В.Н., Благовещенский Ю.В., Болдин М.С., Сахаров Н.В., Нохрин А.В., Исаева Н.В., Лопатин Ю.Г., Шотин С.В.</u> Исследование влияния режимов плазмохимического синтеза и электроимпульсного плазменного спекания на структуру и механические свойства карбида вольфрама	246
<u>Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И.</u> Влияние температуры равноканального углового прессования на структуру и свойства субмикрокристаллических металлов и сплавов	247
<u>Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И., Бахметьев А.М., Сандлер Н.Г., Тряев П.В., Козлова Н.А., Лопатин Ю.Г., Мелехин Н.В., Грязнов М.Ю., Кузин В.Е., Бутусова Е.Н.</u> Влияние РКУ-прессования на механические свойства и коррозионную стойкость сплавов и сталей	248
<u>Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И., Лопатин Ю.Г., Мелехин Н.В., Сахаров Н.В., Пирожникова О.Э., Грязнов М.Ю., Козлова Н.А., Пискунов А.В.</u> Влияние предварительных низкотемпературных отжигов на термическую стабильность структуры и свойств субмикрокристаллических металлов и сплавов	249

<u>Шалдин Ю.В.</u> Кристаллофизические модели некоторых ацентрических кристаллов	250
<u>Шалдин Ю.В., Матясык С., Давыдов А.А., Жаворонков Н.В.</u> Пироэлектрическая дефектоскопия нестехиометричных кристаллов типа вюрцита: ZnO, CdS, CdSe и AlN	251
<u>Шахов Ф.М., Кидалов С.В., Баранов П.Г., Бабунц Р.А., Саксеев Д.А., Кириленко Д.А., Алексенский А.Е., Байдакова М.В., Вуль А.Я.</u> Самоорганизация алмазных нанокристаллов в объемные монокристаллы	252
<u>Шевченко С.А., Терещенко А.Н., Мазилкин А.А.</u> Взаимодействие быстро диффундирующих примесей с дислокациями в монокристаллах германия	253
<u>Шипко М.Н., Коровушкин В.В., Староверов Б.А., Степович М.А.</u> О некоторых возможностях магнитоимпульсного упрочнения материалов	254
<u>Шубин А.В.</u> Особенности формирования условий выращивания крупногабаритных монокристаллов германия	255
<u>Шур В.Я.</u> Формирование нанодоменных структур в одноосных сегнетоэлектриках и достижения доменной инженерии	256
<u>Щербачев К.Д., Бублик В.Т., Воронова М.И., Табачкова Н.Ю., Подгорный Д.А., Мордкович В.Н., Пажин Д.М.</u> Особенности кристаллической структуры слоев кремния на изоляторе, полученных по технологии SIMOX	257
<u>Юсупов Х.У., Ильиных И.А., Бурмистров И.Н., Кузнецов Д.В.</u> Влияние наноразмерных наполнителей: полититанатов калия, нанотрубок оксида алюминия и серпентинита на механические свойства вторичного поливинилбутираля	258
<u>Якимов Е.Б.</u> Исследование введенных при пластической деформации дефектов упаковки в 4H-SiC	259
<u>Якушко Е.В., Муратов Д.Г., Кожитов Л.В., Афанасьев И.С.</u> Формирование наночастиц никеля в углеродной матрице на основе ПАН в условиях ИК-пиролиза	260
<u>Алфавитный указатель</u>	261

ИНДУЦИРОВАННАЯ ВОДОРОДОМ НЕМОНОТОННАЯ СТРУКТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ В ФОЛЬГАХ СПЛАВА Pd-In-Ru

Авдюхина В.М., Акимова О.В., Левин И.С., Ревкевич Г.П.
Физический факультет МГУ, Москва, Россия, vmaphys@gmail.com

Актуальной задачей современной науки и техники является исследование разнообразных проблем взаимодействия водорода с металлами. До недавнего времени считалось, что кинетика фазовых превращений в водородсодержащих материалах является монотонной. Однако недавно было обнаружено, что она в ряде сплавов после гидрогенизации приобретает немонотонный характер, который может сохраняться десятки тысяч часов, т.е. даже тогда, когда в системе практически не остается водорода. Ситуация осложняется еще и тем, что гидрогенизация приводит к возникновению в системе аномально большого количества вакансий. Водород и вакансии могут индуцировать диффузионные перемещения атомов металла, что может привести к немонотонным структурным и фазовым изменениям в материале в процессе релаксации и явиться причиной самопроизвольных процессов деградации, весьма опасных при эксплуатации водородсодержащих материалов.

В работе методами прецизионной рентгеновской дифрактометрии проведено изучение особенностей структурной эволюции на примере фольг сплавов Pd-In-Ru после насыщения их водородом и в процессе длительной релаксации после гидрирования, выявлены ее характерные черты и определены ключевые факторы, их формирующие.

Установлено, что в насыщенной водородом фольге сплава происходят стохастические фазовые превращения, связанные с немонотонными и нерегулярными изменениями объемных концентраций сосуществующих фаз, продолжающиеся в течение года. Фазовые превращения происходят как на стадиях, на которых в матрице сплава сохраняется большое количество водорода (0-500 часов релаксации), так и на стадии, когда количество водорода в системе становится небольшим (8200 часов релаксации). Предложена модель распада дифракционных максимумов на сосуществующие фазы в исследованном сплаве. Показано, что процесс релаксации происходит не только с участием атомов водорода, но и с участием индуцированными ими вакансий. В исследованных сплавах дефекты кристаллической решетки вместе с атомами водорода и вакансиями (концентрация которых в различных фазах достигает 1-6%) образуют сложные, устойчивые дефектные водород-дефект-металл-вакансия и водород-вакансия - комплексы, которые служат как источниками, так и стоками неравновесных вакансий. Обнаружены изменения ширины дифракционных максимумов после гидрирования, характеризующие немонотонный характер перераспределения атомов индия, водорода и вакансий по глубине фольги и образование дополнительных фаз, часть из которых содержит высокую концентрацию вакансий. Показано, что немонотонная структурная эволюция после гидрогенизации носит стохастический характер во времени. Выделение новых фаз при эволюции системы проявляется в определенных локальных зонах, что подтверждает наличие многодолинной структуры термодинамического потенциала в обратном пространстве. Установлено, что процесс $\beta \rightarrow \alpha$ превращения в фольгах сплава Pd-In-Ru носит многостадийный характер. Определены закон дегазации, параметр скорости распада β -фазы и время инкубационного периода в зависимости от индексов кристаллографического направления для обеих сторон фольги исследованного сплава .

СТРУКТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В ФОЛЬГАХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ ПОСЛЕ ГИДРОГЕНИЗАЦИИ, КАК ПРОЦЕСС САМООРГАНИЗАЦИИ ДЕФЕКТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ

Авдюхина В.М., Акимова О.В., Левин И.С., Ревкевич Г.П.

Физический факультет МГУ, Москва, Россия, vtarphys@gmail.com

В связи с развитием водородной энергетики и ряда наукоемких технологий в различных отраслях промышленности усилился интерес к эффективным способам производства особо чистого водорода. В настоящее время наиболее перспективным является способ его извлечения из промышленных газовых смесей с помощью диффузии через мембраны из палладиевых сплавов. Однако проблема создания таких мембран до настоящего времени еще полностью не решена. Это связано с тем, что имеющиеся промышленные мембраны не выдерживают длительную эксплуатацию. Улучшение свойств водородосодержащих соединений достигается за счет введения в палладий малой концентрации легирующих добавок. Очевидно, что на эксплуатационные характеристики таких мембран будет существенным образом влиять изменение их структурного состояния, происходящее в процессе ее работы. Прежде всего речь идет о перераспределении атомов легирующей добавки в матрице палладиевого сплава после гидрирования, что связано с разным сродством к водороду палладия и второй компоненты сплава. Этот процесс может идти достаточно быстро вследствие того, что при прохождении водорода через мембрану может образовываться большое количество вакансий, что увеличивает коэффициент диффузии компонент сплава. Структурное состояние мембраны при эксплуатации также может меняться вследствие образования и трансформирования дефектов и их комплексов в процессе релаксации после гидрирования.

На физическом факультете МГУ в течение ряда лет ведутся работы по исследованию влияния водорода на структурное состояние сплавов на основе палладия. Было установлено, что одной из наиболее сложных проблем оказывается проблема возникновения в этих системах неустойчивых структурных и фазовых состояний. Наличие такой неустойчивости в ряде случаев приводит к немонокотным во времени изменениям структурно-дефектного состояния системы. Все это может быть причиной нежелательных механических разрушений при эксплуатации не только мембран, но и других конструкций, в которых металл взаимодействует с водородом. Отсюда вытекает необходимость проведения исследования структурных состояний подобных систем и в случае фольг сплавов на основе палладия. Актуальность работы также связана с тем, что немонотонное изменение структурных параметров в открытых поликристаллических водородосодержащих системах до сих пор не имеет надежного физического описания. Поэтому накопление материала в рамках сопоставимого эксперимента особенно желательно.

Проведен цикл рентгенинетических исследований структурных характеристик фольг сплавов на основе палладия (Pd-Y, Pd-Ru, Pd-In-Ru) как после однократного, так и циклического гидрирования с целью установления характера их изменения в процессе релаксации.

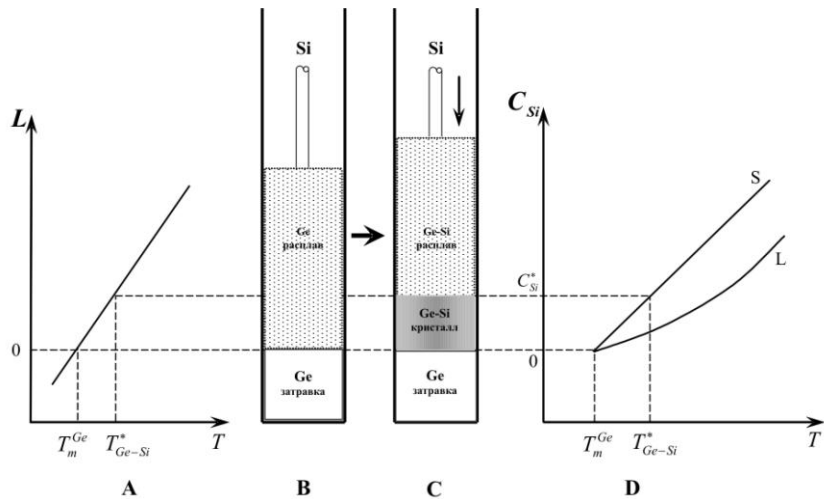
Все представленные результаты получены с использованием рентгенидифракционных методов, которые позволили определить и проанализировать положение, интегральную интенсивность и интегральную ширину дифракционных максимумов, определить фазовый состав и изменение концентрации легирующей добавки в исследуемых фольгах сплавов после насыщения их водородом и в процессе релаксации (в том числе и длительной).

ГИБРИДНЫЙ МЕТОД ВЫРАЩИВАНИЯ ОДНОРОДНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ БИНАРНЫХ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ ИЗ РАСПЛАВА

Аждаров Г.Х., Агамалиев З.А., Исламзаде Э.М.

Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, E-mail: zangi@physics.ab.az

В работе дана концепция и теоретическая основа гибридного метода выращивания однородных монокристаллов полупроводниковых твёрдых растворов из расплава. Для конкретности и удобства гибридный метод представлен на примере выращивания монокристаллов твёрдых растворов классической системы германий-кремний. На рисунке представлена концептуальная схема выращивания однородных монокристаллов гибридным методом. В нагревателе, обеспечивающем аксиальный рост температуры в рабочем объёме тигля (рис. А), проводится расплавление германиевой загрузки над монокристаллической заправкой германия (рис.В). По истечении стабилизационного времени в расплав вводится кремниевый стержень с заданной скоростью. На первом этапе рост кристалла происходит в статическом режиме модифицированным методом направленного концентрационного переохлаждения расплава. В стартовый момент температура на фронте кристаллизации равна температуре плавления германия. С течением времени, часть растворённого кремния у верхней границы расплава за счёт диффузии достигает фронта кристаллизации. Это приводит к формированию переохлаждённого расплава у фронта кристаллизации и переходу его в твёрдую фазу в виде раствора Ge-Si. С этого момента, согласно диаграмме фазового состояния системы Ge-Si (рис. D, представлена часть диаграммы с германиевой стороны) и температурному полю в расплаве (рис. А), происходит рост кристалла твёрдого раствора с возрастающей концентрацией кремния. По достижению концентрации кремния на фронте кристаллизации заданного значения C_{Si}^* (рис. С) включается механизм перемещения тигля вниз относительно нагревателя и начинается второй этап. На протяжении всего второго этапа температура на фронте кристаллизации (T_{Ge-Si}^*) и состав растущего кристалла (C_{Si}^*) остаются неизменными вплоть до полного завершения кристаллизации расплава. Достигается это состояние при определённом соотношении скоростей подпитывания и кристаллизации расплава, соответствующим методу подпитки расплава вторым компонентом.



В пфанновском приближении рассчитаны концентрационные профили компонентов вдоль длины кристаллов твёрдых растворов Ge-Si, выращенных при различных режимах и определены критические динамики их роста, обеспечивающие монокристалличность слитков по всей длине. Анализ полученных результатов определяет оптимальные технологические параметры и условия для выращивания однородных монокристаллов твёрдых растворов с заданным составом и размером.

БЕЗДИСЛОКАЦИОННАЯ ПЛАСТИЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ

М.Ш. Акчурин, Р.В. Гайнутдинов, Р.М. Закалюкин

Институт Кристаллографии РАН, Москва, Ленинский пр. 59

E-mail: akchurin@ns.crys.ras.ru

При изучении любых проявлений пластической деформации сразу встает вопрос об участии в этих процессах дислокаций. Однако есть кристаллы и способы деформирования, когда дислокационная пластичность затруднена и/или пластическая деформация осуществляется без участия дислокаций [1]. В работе представлены результаты по изучению закономерности бездислокационной пластичности ионных кристаллов (ЩГК, тугоплавкие оксиды и т.д.) в полях высоких механических напряжений и $T < 0,3 T_{пл}$. Установлено, что основным механизмом пластической деформации, осуществляющим фрагментацию и развороты кристаллической структуры при действии сосредоточенной нагрузки являются процессы механического двойникования. Размер образующихся нанокристаллитов обратно пропорционален твёрдости исследованных образцов, а выявляемые дислокации вокруг отпечатков и царапин лишь релаксируют напряжения на границе нанокристаллической области и исходного монокристалла. Проведено моделирование процессов двойникования в исследуемых монокристаллах путём вращения структуры вокруг оси третьего порядка на 60 градусов и вокруг оси второго порядка на 70 градусов 32 минуты. Оценены энергии их образования и показано, что энергии образования двойников заметно меньше, чем дислокаций, причём в ГЦК структурах наблюдается прямая корреляция с твёрдостью материала. Обсуждается физический смысл понятия микротвёрдости. Показано, что твёрдость кристаллических тел определяется работой фрагментации при пластическом деформировании или работой диспергирования при хрупком.

Проанализирована роль разработанных механизмов двойникования в релаксации напряжений при росте монокристаллов ($Y_3Al_5O_{12}$) и образовании естественных кристаллографических межзёренных границ в оптических керамиках на основе кубических оксидов (Y_2O_3 , Lu_2O_3 , $Y_3Al_5O_{12}$, $Lu_3Al_5O_{12}$ и др.). Изучены строение и свойства двойниковых межзёренных границ, предложены механизмы их перемещения. Разработаны модели залечивания пор в оптических керамиках, основанные на разворотах зёрен при двойниковании по системе (111)[112]. Обсуждается механизм релаксации напряжений, связанный с изменением стехиометрии вблизи двойниковых границ.

Предложен новый механизм протекания твёрдотельных реакций при контактном деформировании соответствующих компонентов, основанный на массопереносе за счёт пластической деформации двойникованием. Механосинтез сложных оксидов ($Y_2O_3 + Al_2O_3 \rightarrow Y_3Al_5O_{12}$; $MgO + Al_2O_3 \rightarrow MgAl_2O_4$; $PbO + TiO_2 \rightarrow PbTiO_3$) проводился в шаровых планетарных мельницах при $T_{ком}$.

1. Akchurin M.Sh., Regel V.R. // Chem. Rev. 1998. V. 23. P. 59-83.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ ТРИБОТЕХНИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ МЕТОДОМ КИНЕТИЧЕСКОГО МИКРОИНДЕНТИРОВАНИЯ

Алисин В.В.

Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, РФ, yva-imash@yandex.ru

Технические кристаллы и керамические композиционные материалы обладают высокой твердостью, способностью сохранять механическую прочность до температур выше 1000°C в сочетании с химической инертностью по отношению к различным средам (газовым, жидкостным, биологическим). Это делает перспективным их применение в тяжело нагруженных узлах трения механизмов. Трибологические характеристики кристаллов зависят от их твердости и пластичности. Особенно эти требования относятся к работе узла трения в условиях повышенных вибраций. Основным недостатком конструкционных кристаллов и керамик состоит в большой хрупкости и малой пластичности. Стандартизованные методы оценки пластичности по испытаниям на растяжение мало пригодны для кристаллов по экономическим соображениям. В работе предлагается новый критерий выбора кристаллов и керамик для узлов трения, а именно произведение твердости на коэффициент пластичности, который определяется отношением площади петли гистерезиса к площади, соответствующей полной работе совершаемой при кинетическом микроиндентировании. Рассматривается эффективность методики оценки применимости кристаллов и керамик для работы в узлах трения. Эксперименты выполнены на лейкосапфире, наноструктурированных кристаллах частично стабилизированного диоксида циркония, керамическом композите на основе карбида кремния, углеродном нанокompозите, в том числе в условиях повышенных температур.

Метод кинетического микроиндентирования с нагревом испытуемых образцов реализован в измерительных установках Микро-Hardness Tester фирмы CSM (Швейцария), разработанных в последние годы. В РФ это единственная установка позволяющая записывать диаграмму вдавливания в условиях нагрева до 400°C . Реализация предлагаемого подхода позволит разработать методику комплексной оценки механических характеристик поверхностного слоя и набрать стандартные справочные данные, необходимые для проектирования узлов трения с новыми керамическими материалами и кристаллами. Приводятся примеры практического применения керамических материалов в узлах трения.

РЕЗОНАНСНАЯ МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТЬ В СХЕМЕ ЭПР В СВЕРХНИЗКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Альшиц В.И.¹, Даринская Е.В.¹, Колдаева М.В.¹, Минюков С.А.¹, Петржик Е.А.¹, Морозов В.А.², Кац В.М.², Лукин А.А.², Наими Е.К.³

1 - *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

alshits@ns.crys.ras.ru

2 – *Санкт-Петербургский Государственный Университет*

3 – *НИТУ «МИСиС», Москва*

Экспериментально изучена резонансная релаксация дислокационной структуры в кристаллах NaCl с разным примесным составом под действием скрещенных магнитных полей: постоянного поля Земли $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$ и переменного радиочастотного поля $\tilde{\mathbf{V}}$. Варьировались частота ν и направление поля накачки $\tilde{\mathbf{V}}$, а также ориентация образцов в магнитном поле Земли. Пики дислокационных пробегов $I(\nu)$ различались высотой и положением резонансной частоты ν_r . Максимальный эффект возникал для дислокаций с направлением \mathbf{L} , ортогональным плоскости магнитных полей, когда векторы $\{\mathbf{L}, \tilde{\mathbf{V}}, \mathbf{V}_{\text{Earth}}\}$ были взаимно перпендикулярны и принадлежали системе $\langle 100 \rangle$. Изменение угла между полями в плоскости $\perp \mathbf{L}$, как и вариации концентрации C примеси Ca, изменяли только высоту пика. А повороты образца относительно поля $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$ закономерно влияли и на резонансную частоту ν_r .

Последующее детальное исследование релаксационных перемещений дислокаций в расширенном диапазоне частот переменного поля и различных постоянных полях ($B = 26 \div 261$ мкТл) выявило квартет равноотстоящих по частоте резонансных пиков дислокационных пробегов $I(\nu)$. В большей части изученного интервала полей B частоты ЭПР пиков отвечали зеемановскому расщеплению уровней с четырьмя g -факторами, близкими к 2 и разностью соседних значений $\Delta g = 0.09$, независимой от B . Эквидистантность нарушалась лишь при самых низких полях $B < 50$ мкТл (и соответственно частотах $\nu < 0.7$ МГц).

Обнаружены и исследованы резонансные перемещения дислокаций в кристаллах NaCl(Ca) при совместном действии магнитного поля Земли и импульсного поля накачки. Измеренные зависимости дислокационных пробегов от длительности импульса τ имели максимум при $\tau_r \approx 0.53$ мкс., что отвечает обычному условию ЭПР, в котором g -фактор близок к 2, а частота $\nu_r = \tau_r^{-1}$.

Обнаружены изменения микротвердости кристаллов ZnO, триглицинсульфата (TGS) и гидрофталата калия (КАР) после их выдержки (30 мин) в магнитном поле Земли (≈ 50 мкТл) и ортогональном к нему переменном поле (≈ 3 мкТл). Резонансная частота поля накачки $\tilde{\mathbf{V}}$ отвечает условию ЭПР с g -фактором близким к 2. В кристаллах ZnO микротвердость возрастает, а в TGS и КАР – убывает. Максимальное изменение (10–15%) достигается через 1–3 часа после магнитной обработки. Магнитная “память” обладает сильной анизотропией: для каждого из кристаллов найдено направление, при совпадении которого с вектором магнитного поля Земли $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$ эффект полностью или частично подавляется. В кристаллах ZnO и TGS это оси симметрии 6 и 2, соответственно. А в кристалле КАР это направление в плоскости спайности ортогональное оси 2.

Работа частично поддержана Президиумом РАН (Программа № 24) и РФФИ (грант №13-02-00341).

ОЦЕНКА НАГРЕВА ОДНОРОДНОГО ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО МАТЕРИАЛА ЭЛЕКТРОННЫМ ЗОНДОМ

Амрастанов А.Н.¹, Гинзгеймер С.А.², Степович М.А.^{1,3,4}

¹ *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, г. Калуга, Россия, an_amr@mail.ru, m.stepovich@rambler.ru*

² *Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана, г. Калуга, Россия, ginzgeymer@mail.ru*

³ *Ивановский филиал Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова, г. Иваново, Россия, m.stepovich@rambler.ru*

⁴ *Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва, Россия, m.stepovich@rambler.ru*

Анализ температурных полей, возникающих в результате облучения поверхности изучаемого образца остро сфокусированным пучком электронов, может иметь важное практическое значение для интерпретации экспериментальных данных. Это может быть существенным для любых твёрдых тел, но особенно важно в катодолюминесцентной микроскопии полупроводников, использование которой позволяет проводить бесконтактные измерения электрофизических параметров мишеней с высокой локальностью (порядка микрометра и менее). Однако при облучении электронным зондом в месте его падения на мишень выделяется значительная энергия, что может привести к существенному повышению локальной температуры и, как следствие, к изменению энергетических характеристик полупроводника (ширины запрещённой зоны и т.п.). В результате изменится спектр катодолюминесцентного излучения материала, что необходимо учитывать при проведении количественных измерений.

В настоящей работе для оценки нагрева однородного полупроводникового материала электронным зондом решалась стационарная задача теплопереноса для функции Грина с дельта-функцией в правой части дифференциального уравнения

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} G = -\delta(x - x_0, y - y_0, z - z_0)$$

и граничными условиями:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} G = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} G = 0, \quad \lim_{y \rightarrow -\infty} G = 0, \quad \lim_{y \rightarrow +\infty} G = 0,$$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} G = 0, \quad k \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{z=0} = \alpha G \quad x, y, 0 \text{ .}$$

В результате проведённых расчётов получено выражение, позволяющее находить искомое распределение температуры в полубесконечном однородном полупроводниковом материале как функцию расстояния от точки падения электронов зонда на образец. Некоторые возможности метода для проведения практических расчетов проиллюстрированы на примере классических полупроводниковых материалов, широко используемых в электронной технике.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011), а также Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 12-02-97519).

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ГЕТЕРОГРАНИЦ НА ОСНОВЕ ПЕРЕДОВЫХ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ И УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ В НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Андреева А.В., Деспотули А.Л.

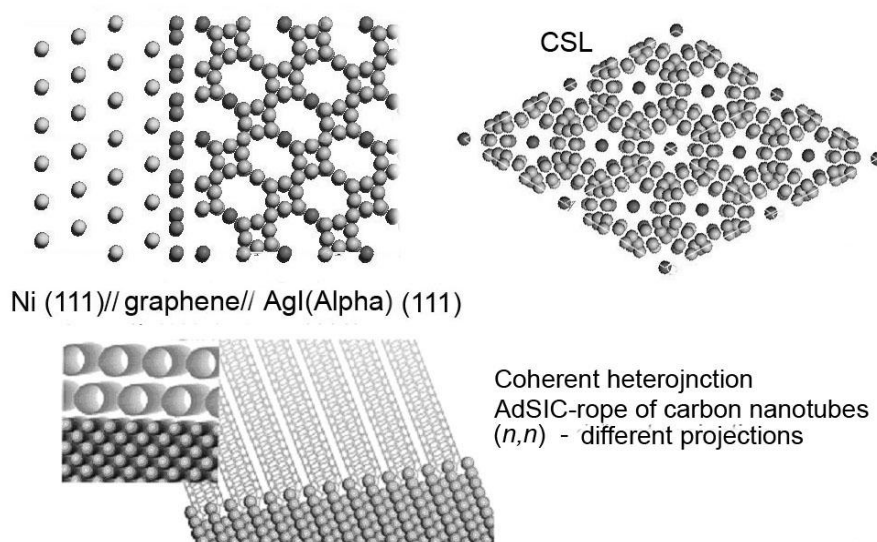
Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых веществ, Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия

andreeva@iptm-hpm.ac.ru

Работа сфокусирована на применении передовых суперионных проводников (ПСИП) и углеродных наноструктур (пучки нанотрубок, графен и др.) при конструирования твердотельных суперконденсаторов (СК) микронных размеров с высокими частотно-емкостными характеристиками.

Эффективность работы СК зависит от ряда факторов: размерности прибора, активности материалов электрода и электролита и их взаимодействия между собой, структурного качества гетерограницы и др. Эти параметры тесно взаимосвязаны и их обоснованный выбор определяет высокие характеристики конечного прибора. Для конструирования СК выбраны: ПСИП – твердые электролиты (ТЭ), с низкой энергией активации движения ионов ($\sim 0,1\text{эВ}$), структура которых близка к оптимальной для БИТ и перспективные материалы для блокирующих электродов на основе низкоразмерных углеродных наноструктур. Однако условия для БИТ могут нарушаться на гетеропереходах ТЭ/электронный проводник (ЭП) – основных элементах приборов микроэлектроники, поэтому становится важным конструирование гетерограниц с минимальными нарушениями структуры ПСИП вблизи гетероперехода. Показано, что при использовании в архитектуре СК гибридных электродов (включающих низко-размерные углеродные материалы последовательно с ультравысокой емкостью ДЭС в ПСИП) квантовая емкость в углеродном материале может быть определяющей в случае низкой плотности состояний на уровне Ферми. Предложены модели гибридных электродов, включающих графен и пучки одностенных углеродных нанотрубок (n, n) с $n=3q$ определенной симметрии, которые наряду с использованием уникальных преимуществ низкоразмерных углеродных материалов обладают высокой квантовой емкостью.

В работе выполнен ряд оценок характеристик СК и представлены атомарные модели высокочастотных когерентных гетероструктур с БИТ на основе ПСИП и углеродных материалов с высокой квантовой емкостью.



Кинетика роста из раствора кристаллов йодата лития при вытягивании за пределы зоны роста

Антипов В.В., Портнов О.Г.

vvantip@yandex.ru

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва. Российская федерация*

При росте из растворов йодата лития морфология пирамидальных и призматических поверхностей является решающим фактором, определяющим совершенство кристалла. Возникающие элементарные ступени или дислокационные холмы на поверхности растущего кристалла определяют скорость перемещение различных участков рельефа грани. Стабильность роста будет зависеть от постоянства пересыщения по всей поверхности, что не гарантируется в традиционных растворных методах т.к. формируются две системы граней с различными механизмами и режимами роста. В этих условиях добиться баланса скоростей подвода вещества из раствора и захвата его растущими различными гранями невозможно. Измерение нормальных и тангенциальных скоростей перемещения различных участков рельефа растущих граней обычно затруднительно и неизвестно.

Оптимально необходимо найти условия кинетических режимов роста граней т.е. условия независимости скорости роста от интенсивности перемешивания раствора т.е. от скорости потока раствора, омывающего растущие грани (лимитирующий фактор в этом случае-механизм роста, встраивание атомов в кристаллическую решетку). Необходимо добиться баланса скоростей подвода вещества из раствора и поглощение его растущими гранями кристалла. При стандартных методах это условие обычно не реализуется и рост зависит от скорости потоков раствора. Необходимо найти методы в которых удастся ограничить или прекратить рост отдельных систем граней. Тогда одни грани будут отвечать за качество кристалла, а другие за его морфологию. Контроль роста граней с одним механизмом роста облегчит задачу управления однородностью чистых и легированных кристаллов.

Оптимизировать процесс роста стало возможным при непрерывном вытягивании выросшей части кристалла из раствора, т.е. его эвакуации за пределы зоны роста. В растворе остается лишь одна система плоскостей – пирамидальная, которая не меняет своей площади и положения в кристаллизаторе, что позволяет оптимизировать распределение концентрационных потоков и стабилизировать условия роста т.к. все медленно растущие призматические грани окажутся вне зоны роста и не будут влиять на динамику роста и вхождение примесей. Фактически создаются условия роста по одному механизму т.е. один фронт кристаллизации, аналогичный методам вытягивания монокристаллов из расплава. Это позволяет существенно облегчить создание программы автоматизации системы управления ростом на базе данных о скоростях прироста граней и изменения пересыщения в растворе и добиться синхронизации скорости кристаллизации граней со скоростью вытягивания из раствора. Программа учитывает, что автоматизированный рост возможен только после начального формирования пирамидальных плоскостей заданной площади для выбранной кристаллографической ориентировки затравки.

АЛМАЗ - КРИСТАЛЛ XXI ВЕКА

Аранчий С.М.¹, Ашкинази Е.Е.², Большаков А.П.², Конов В.И.², Ральченко В.Г.²,
Рогалин В.Е.¹

¹ ОАО «НЦЛСК «Астрофизика», 125424, Москва, Волоколамское ш., д. 95), РФ,

² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,

119991, Москва, ул. Вавилова, 38, РФ

e-mail: v-rogalin@mail.ru

Данное сообщение о кристалле, известном с древнейших времён – алмазе, технологиях его получения и перспективах некоторых новых применений. Его уникальные свойства определяются сильной ковалентной связью в сочетании с малым атомным весом. В XX веке созданы промышленные технологии получения искусственных алмазов при высоких давлениях, настолько широко применяемых, что экономический потенциал развитых государств в значительной мере стали связывать с использованием ими алмазов.

В настоящее время активно развиваются методы синтеза алмаза из газовой фазы. Получены пластины поликристаллических алмазов $\varnothing 200 \times 2$ мм, сверхчистые монокристаллы размером ~ 10 мм [1]. Такие алмазы перспективны для изготовления приборов, работающих в экстремальных условиях [2]. При массовом производстве сравнительно дешёвые алмазы (исходное сырьё – метан и водород) коренным образом изменяют облик силовой оптики, электроники и микроэлектроники.

Алмаз отличается [1, 2]:

- самая высокая механическая твердость (до 90 ГПа) и износостойкость,
- прочность на изгиб - 360-600 МПа,
- низкий коэффициент трения $\sim 0,02$,
- наивысший модуль упругости - $1,2 \times 10^{12}$ Н/м²,
- теплопроводность при 300 К - 2×10^3 Вт/м \times К (в 5 раз выше, чем у меди),
- низкий коэффициент теплового расширения при 300 К - 10^{-6} К⁻¹ (как у инвара),
- прозрачность в диапазоне от УФ- до мм (кроме 2 – 6 мкм),
- термооптический коэффициент, dn/dT - 10×10^{-6} К⁻¹,
- высокое значение сечения вынужденного комбинационного рассеяния,
- наивысшая скорость распространения звука - 17,5 км/с,
- удельное сопротивление при 300 К - 10^{13} Ом \times см,
- высокая электрическая прочность - напряжения пробоя $\sim 10^7$ В/см,
- при легировании - полупроводник с шириной запрещенной зоны - 5,4 эВ,
- химическая и биологическая инертность.

Резюмируя, можно констатировать, что алмаз значительно превосходит материалы для различных высокотехнологичных применений, а существующие уже сегодня возможности позволяют разрабатывать и создавать уникальные конструктивные элементы, причем, на их основе, после практической апробации, возможна разработка качественно новых приборов следующего поколения.

Применение алмазов экономически оправданно и при ныне существующих ценах. После создания экономически эффективного промышленного производства алмазов и изделий из них ожидается предполагаемая потребность современной науки и техники на уровне сотен и тысяч килограмм в год.

Библиографический список

1. Ральченко В., Конов В. «CVD-алмазы: применение в электронике». Электроника: Наука, технологии, бизнес. 2007, №4, с. 58-67.
2. Рогалин В.Е., Аранчий С.М. «Поликристаллические алмазы; новые перспективы силовой оптики и электроники», «Интеграл», 2012 г., №5 (67), с.7 – 9.

ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Артемьев И.В*., Вьюненко Ю.Н.

*ООО «Оптимикст Лтд», Санкт-Петербург, Россия
СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Исследования термоэлектрических явлений в материалах с мартенситными превращениями проведены на сплавах TiNi [1-3] и FeMn [4]. Результаты показали значительную зависимость термоэлектродвижущей силы как от химического состава [1], так и от температуры [2, 4]. Этот факт дает возможность использовать эффект Пельтье для изучения эволюции температурных полей в протяженных изделиях из материалов с ЭПФ при неравномерном нагреве.

Определяли зависимость разности потенциалов ΔU в контрольных точках от времени, их расстояния от зоны нагрева и взаимоположения на проволочных образцах. Было обнаружено, что со временем ΔU может монотонно расти, приближаясь к некоторому предельному значению. В некоторых случаях фиксировали максимум разности потенциалов.

Для выяснения причин в различии полученных результатов был проведен эксперимент на проволочном образце, изогнутом таким образом, что контрольные точки оказались по разные стороны зоны изгиба. Максимум на временной зависимости ΔU наблюдали в тех случаях, когда в ходе эксперимента происходило восстановление первоначальной формы проволоки.

В рамках математической модели механизма остаточных напряжений ЭПФ [5] провели исследование влияния различных факторов на эволюции температурного поля. Численные эксперименты показали, что максимум на временной зависимости разности температур в контрольных точках появляется в случае прогрева зоны контрольных точек до высокотемпературного состояния. Кроме этого, оказывается существенным завершение фазового превращения по всей длине изделия.

Список литературы

1. Василевский Р.Дж. Эффект запоминания формы в сплаве системы TiNi как один из аспектов, вызванных напряжением мартенситного превращения //Эффект памяти формы в сплавах. - М.: Металлургия, 1979. – С. 205-230
2. Hanlon J.E., Butler S.R., Wasilewski R.J. Effect of martensitic transformation on the electrical and magnetic properties of TiNi //Trans.Metallurg. Soc. AIME, 1967.- Vol.239, N 9.- P.1323-1327
3. Шушкевич В.Л., Рубаник В.В., Рубаник В.В. мл., Термоэлектронные явления в TiNi // Матер. 43 Межд. конф. «Актуальные проблемы прочности», Витебск, 2004.– С. 345-346
4. Shumann H. Verhalten der paramagnetischen γ/ϵ - Umwandlung von 16% igem Manganstahl //Neue Hutte, 1964.- Bd.9, Hf.20.- S. 116-118.
5. Вьюненко Ю.Н. Механизм эффекта памяти формы, обусловленный эволюцией поля остаточных напряжений. //Материаловедение, 2009. - №12.- С.2-6

О РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ В ТОНКИХ АМОРФНЫХ ПЛЕНКАХ И ПРИНЦИПЕ ГЮЙГЕНСА

Багмут А.Г.

Национальный технический университет “ХПИ”, Харьков, Украина
bagmut@kpi.kharkov.ua

На основании систематических электронографических и электронно-микроскопических исследований виды кристаллизации тонких аморфных пленок по структурно-морфологическим признакам распределены между слоевой полиморфной кристаллизацией [СПК], островковой полиморфной кристаллизацией [ОПК], дендритной полиморфной кристаллизацией [ДПК] и жидкофазной кристаллизацией [ЖФК] [1]. Это позволило адекватно расклассифицировать многообразие кристаллизационных процессов, протекающих в пленках.

Одной из причин реализации определенного вида кристаллизации является характер сил связи между атомами элементов. Там, где преобладают ковалентные связи, чаще реализуется механизм СПК. Металлическая связь инициирует действие механизма ОПК.

При СПК продвижение линии кристаллизации можно рассматривать по аналогии с продвижением фронта световой волны по принципу Гюйгенса (рис.1). В этом случае к кристаллизации тонких пленок применим термин “когерентная” кристаллизация, поскольку монокристалльность слоя обеспечивается одинаковой ориентировкой (т. е. “когерентностью”) вторичных центров кристаллизации. В тоже время СПК является аналогом слоевого роста пленки на подложке из паровой фазы (рост по Франку и Ван дер Мерве). В результате фазового превращения по механизму СПК формируется кристаллическая пленка, где размеры плоских зерен в тангенциальном направлении на порядки превышают ее толщину.

Островковая полиморфная кристаллизация не является “когерентной” кристаллизацией. Она является аналогом островкового роста пленки на подложке из паровой фазы (рост по Фольмеру и Веберу). В результате фазового превращения формируется мелкодисперсная поликристаллическая пленка.

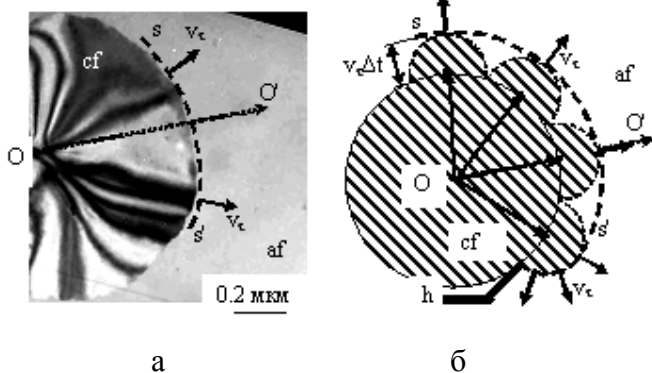


Рис. 1. Кристаллизация аморфных пленок в соответствии с принципом Гюйгенса. (а) – слоевая полиморфная кристаллизация аморфной пленки Cr_2O_3 , инициированная электронно-лучевым воздействием в точке О. (б) – схема когерентной кристаллизации этой пленки. af аморфная фаза. cf – кристаллическая фаза.

1. Bagmut A.G. Classification of the Amorphous Film Crystallization Types with Respect to Structure and Morphology Features // Technical Physics Letters.- 2012.- V.38, № 5.- P. 488–491.
2. Bagmut A.G. Structural and morphological features of crystallization reactions of amorphous films according to the electron microscopy data // Functional Materials.- 2012.- V.19, № 3.- P. 370– 377.

СОЗДАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ФОТОПРИЕМНИКОВ ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНОГО ДИАПАЗОНА ОТ 400 ДО 600 нм МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ

Базалевский¹ М.А., Кольцов¹ Г.И., Казаков² И.П.

¹НИТУ «МИСиС», Москва, mishanyabaz@gmail.com

²Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук

Фотоприемники для видимого диапазона широко применяются в сфере компьютерных технологий и коммуникации, автомобильной промышленности. Так же полупроводниковые фотоприемники являются перспективными приборами для контроля параметров ионизирующего излучения.

В данной работе для изготовления фотоприемников была выбрана гетероструктура AlGaAs/GaAs. Несмотря на интерес к GaAs как материалу для ИК-устройств, исследователи не уделяли большого внимания на использование GaAs для обнаружения видимого (VIS) или УФ (UV)-излучения. Одной из возможных причин является наличие широкозонных материалов для УФ-области и Si и InGaAs для видимой области. Однако для удобства работы и проведения экспериментов существует необходимость создания такого прибора, который будет иметь высокую чувствительность в широком диапазоне (от УФ до видимого и ближнего ИК).

Структуры фотоприемников были изготовлены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на базе лаборатории в физическом институте РАН (ФИАН). На n⁺ подложке GaAs были выращены структуры фотоприемников (рисунок 1). Во время роста производился контроль состояния поверхности с помощью дифракции быстрых электронов (RHEED) и метода спектроскопии анизотропного отражения (RAS). Данные RHEED и RAS показали, что выращенная структура имеет резкие гетерограницы и атомарно-гладкую поверхность.

Фотоприемники с мезаструктурой были изготовлены по стандартной технологии на НПП «Пульсар». В процессе изготовления были измерены ВАХ приборов. На готовых приборах были измерены электрофизические и фотоэлектрические характеристики.

p ⁺ GaAs (Be)	2·10 ¹⁸ см ⁻³	45 нм
p ⁺ AlAs (Be)	2·10 ¹⁸ см ⁻³	50 нм
p Al _{0,35} Ga _{0,65} As (Be)	5·10 ¹⁷ см ⁻³	500 нм
n Al _{0,35} Ga _{0,65} As (Si)	5·10 ¹⁷ см ⁻³	500 нм
Буфер n ⁺ GaAs (Si)	2·10 ¹⁸ см ⁻³	200 нм
Подложка n ⁺ GaAs (Si)	(1-2)·10 ¹⁸ см ⁻³	400 ± 20 мкм

Рисунок 1 Поперечный разрез структуры фотодиода.

ФОТО- И МЕХАНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ МИКРОЧАСТИЦ ЛЮМИНАФОРА $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$ В МАТРИЦЕ ФОТОПОЛИМЕРА И СОЗДАНИЕ СЕНСОРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕХАНИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

А.Ф.Банишев, А.А.Лотин, А.А.Банишев

Федеральное Государственное бюджетное учреждение науки, Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук, 140700, Московской обл. г.Шатура, ул.Святоозерская-1, тел. раб.: (8-496-45)_-259-12-доб.160, E-mail: banishev@mail.ru

В работе исследовались низкотемпературная ($T=15\div 300\text{K}$) фотолюминесценция и механолюминесценция композитных материалов на основе фотополимеризующейся смолы и мелкодисперсного порошка $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$. Для возбуждения фотолюминесценции использовался гелий кадмиевый лазер ($\lambda=337\text{ nm}$). Регистрация спектров фотолюминесценции проводилась с помощью полихроматора с CCD матрицей. Возбуждение МЛ проводилось в результате воздействия импульсных механических напряжений.

Показано, что спектр фотолюминесценции $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$ при низкой температуре ($T=15\div 200\text{K}$) представляет собой две широкие частично перекрывающиеся полосы с максимумами $\lambda_{1\text{max}}\approx 520\text{ nm}$, $\lambda_{2\text{max}}\approx 455\text{ nm}$. Установлено, что коротковолновая полоса люминесценции ($\lambda_{2\text{max}}\approx 455\text{ nm}$) испытывает температурное тушение и при $T\geq 200\text{ K}$ полностью затухает.

На основе полученных результатов дано объяснение низкотемпературной перестройки спектральных полос люминесценции люминофора $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$ и предложен механизм длительного свечения (фосфоресценции) исследованных материалов. На рис.1,2 показаны соответственно низкотемпературные спектры фотолюминесценции и предполагаемая схема энергетических уровней исследуемого материала. На рис.3 показан сигнал механолюминесценции возбуждаемый при воздействии механического удара

Показано, что фотолюминесцентные и механолюминесцентные свойства (спектральные и энергетические) люминофора $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$ практически не меняются при внедрении его в матрицу фотополимерной смолы (олигоэфиракрилата), что позволяет использовать композит созданный на основе указанных материалов для изготовления механолюминесцентных сенсорных элементов.

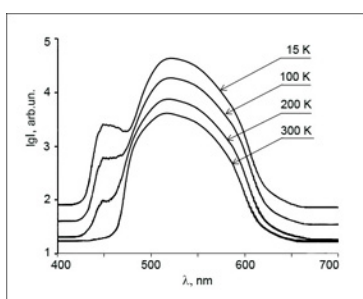


Fig.1

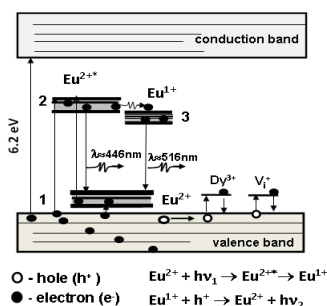


Fig.2

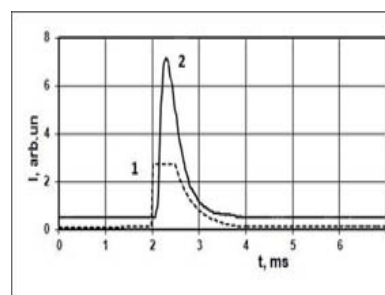


Fig.3

Рис.1. Низкотемпературные спектры фотолюминесценции порошка $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$

Рис.2. Схема энергетических уровней и переходов ионов Eu^{2+} в $\text{SrAl}_2\text{O}_4:(\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+})$

Рис.3. Механолюминесценция композитного материала: 1-форма механического удара, 2- сигнал механолюминесценции композитного материала

**ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО НАВОДОРОЖИВАНИЯ
НА ИЗМЕНЕНИЕ КАРТИН ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ МАЛОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ**

**Баранникова С.А., Косинов Д.А.*, Надежкин М.В., Лунев А.Г.,
Дербичева Н.С.*, Зуев Л.Б., Громов В.Е.***

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, Томск,

E-mail: bsa@ispms.tsc.ru

*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

E-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

Выполнены исследования по влиянию водорода на картины локализации пластической деформации на разных стадиях кривых нагружения при одноосном растяжении для стали 08 пс. Испытания на растяжение были выполнены на плоских образцах в форме двойной лопатки с размерами рабочей 50×10×2 мм. Образцы растягивались на универсальной испытательной машине «Instron-1185» при комнатной температуре с постоянной скоростью перемещения подвижного захвата $V_m = 0,5$ мм/мин. Для исследований макроскопической локализации пластического течения использовалась техника двухэкспозиционной спекл-фотографии.

Исследования микроструктуры показали, что в исходном состоянии после горячей прокатки (1) средний размер зерна в поперечном сечении образца составил $\sim 13,2 \pm 6,2$ мкм, а в продольном сечении $\sim 15,3 \pm 6,4$ мкм. Результаты механических испытаний на растяжение при комнатной температуре образцов стали 08 пс показали, что в исходном состоянии (1) и после электролитического насыщения водородом в течение 24 часов (2) наблюдается снижение прочности и пластичности на 9%.

Распределения локальных удлинений в образце стали 08пс после электролитического насыщения водородом в течение 24 часов на площадке текучести протяженность до 4,8 % представляли собой две зоны локализованной деформации. На протяжении всей площадки текучести два фронта пластической деформации перемещались от захватов навстречу друг другу со скоростями $1,5 \cdot 10^{-5}$ м/с и $5,5 \cdot 10^{-5}$ м/с. На стадии линейного деформационного упрочнения протяженностью от 10,5% до 12,5 % с постоянным коэффициентом деформационного упрочнения ($\theta = 430$ МПа) распределения локальных деформаций представляет собой расположенных на одинаковых ($7,0 \pm 1$ мм) расстояниях зон локализации деформации с более сложной структурой. На протяжении стадии линейного деформационного упрочнения эти зоны локализации перемещались с постоянной скоростью $V_H = 3,0 \cdot 10^{-5}$ м/с. На стадии параболического деформационного упрочнения картина локализации пластической деформации имела вид стационарной системы очагов пластического течения с пространственным периодом волн локализации деформации $7,5 \pm 1,0$ мм.

Можно заключить, что главные качественные закономерности эволюции картин распределения локальных деформаций в процессе нагружения определяются только сменой стадий деформационного упрочнения моно- и поликристаллов, и не зависят от типа их кристаллической решетки (ГЦК, ОЦК), химического состава сталей и механизмов водородного охрупчивания, поскольку водородное охрупчивание является результатом образования микротрещин (приводящих к хрупкому разрушению) в металле, содержащем водород. Однако водород оказывает на количественные параметры картин локализации пластической деформации: длину волны и скорость волн локализации пластической деформации.

В случае пластического деформирования например прокатки структура стали характеризуется следующим: зерна сильно деформируются и принимают вид волновых полос, линии скольжения отсутствуют, упрочнении происходит за счет пластической деформации зерна, глубина упрочнения составляет 5-7 мм, хотя степень деформации достигает 60% и более.

После высокоскоростного нагружения выявлены особенности микроструктуры:

- деформации зерен не наблюдается, т.е. после нагружения зерна имеют такую же форму что и до нагружения;
- направление и ориентировка линий скольжения изменяется с увеличением расстояния от поверхности нагружения (Рис.1.);
- в микроструктуре образца наблюдается преимущественно множественное скольжение;
- при поверхностном слое интенсивность линий скольжения максимальна, а по мере удаления интенсивность падает.
- Микротвердость в приповерхностном слое составляет 310-350HV.

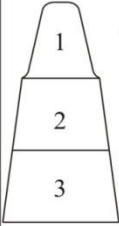



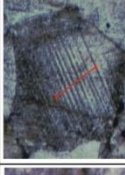
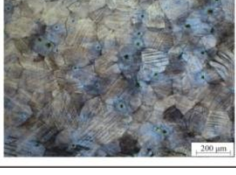

Образец	Зона	Структура	Твердость	Зерно	Количество линий скольжения на 100 мкм	Преимущественный угол наклона линий скольжения
	1		450 HV		26	~0, 90°
	2		300 HV		13	~45, 135°
	3		250 HV		12	Разориентировка

Рис.1 Микроструктура образца

В результате исследований выявлено: количество линий скольжения на обработанном взрывом образце имеет прямопропорциональную зависимость от величины ударно – волнового нагружения.

1. Гуськов А.В., Милевский К.Е., Петров А.Ф., Тушинский Л.И. Влияние высокоскоростной ударной волны на микроструктуру и механические свойства стали Гадфильда 110Г13Л.- Вестник НГТУ, 2006 г., № 4
2. Дерibas А.А., Матвеев Ф.И., Соболенко Т.М. Упрочнение взрывом высокомарганцевистой стали. - Физика горения и взрыва, 1966, т. 2, №3, с. 87-94
3. Власов В.И., Комолова Е.Ф. Литая высокомарганцевистая сталь. - М.: Государственное научно-техническое издательство машиностроительной литературы, 1963. - 196 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И СТРУКТУРЫ НОВЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ ПОДШИПНИКОВЫХ СПЛАВОВ

Белов Н. А.¹, Курбаткин И. И.², Муравьева Т. И.², Столярова О. О.²

*1 Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»
г. Москва, Россия.*

*2 Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского Российской академии наук,
г. Москва, Россия.*

В последнее время в подшипниках скольжения всё чаще применяются антифрикционные алюминиевые материалы. Это связано с их высокими эксплуатационными показателями и низкой стоимостью изготовления. Основным принципом, используемым в их работе заключается в том, что при фрикционном взаимодействии, на контактной поверхности образуется плёнка вторичных структур (ВС), которая создаётся за счёт массообмена, между двумя материалами [1]. Одним из основных способов решения поставленной задачи является создание специальных металлических материалов с заданными структурными составляющими, имеющие определённое функциональное назначение (триботехнические свойства). Выбор элементов для их легирования был проведен на базе качественного анализа многокомпонентных фазовых диаграмм систем Al-Cu-Si-Sn-Pb и Al-Cu-Sn-Pb [2]. Для проведения исследований экспериментальных материалов была разработана методика по определению трибологических свойств, состоящая из трех этапов: оценка прирабатываемости образца, его абразивной износостойкости и задиростойкости. Данная методика была реализована на трибометре Т-10 по схеме «стержень – диск». Для металлографического исследования образцов использовались оптический микроскоп «Neophot-2» с системой визуального наблюдения и анализа изображения в цифровом и цветном формате «Image Scope Color», сканирующий электронный микроскоп «Philips SEM 505» с системой «Image Scope» и рентгеновского микроанализа «Genesis 2000 XMS 60 SEM». Анализ структуры поверхности и её микро и нанорельеф проводились на сканирующем зондовом микроскопе марки «SmartSPM™». На основании проведенных исследований определены сплавы для дальнейших исследований.

В работе проведены трибологические и структурные исследования и установлен химический состав контактной поверхности. Показано, что при проведении приработочных испытаний и испытаниях на износ в условиях граничной смазки, на контактной поверхности реализуется механизм выделения мягкой фазовой составляющей, которая работает как твердая смазка. При создании условий задира происходит срывание пленки вторичных структур с поверхности контакта.

Работа проведена при поддержке гранта РФФИ 12-08-00411-а, 12-08-01171 и Гранта поддержки ведущих научных школ России Президента РФ НШ-2611.2012.1.

1. И.И. Курбаткин, Т.И.Муравьева Процессы образования вторичных структур и их влияние на трибологические свойства подшипников скольжения. // Трение и смазка в машинах и механизмах №1, 2012, с.38-44.

2. Миронов А. Е., Котова Е. Г. Разработка новых марок литейных алюминиевых антифрикционных сплавов для замены бронз в узлах трения.// Изв. Самарского научного центра РАН. 2011. Т. 13, №4, вып.3. С. 1136 – 1140.

РЕЗОНАНСНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ПУЧКОВ В КРИСТАЛЛАХ РАЗЛИЧНЫХ СИНГОНИЙ

Бессонов Д.А., Альшиц В.И., Любимов В.Н.

В работе [1] предложен новый принцип резонансного концентрирования энергии в акустических волнах, полностью основанный на анизотропии кристаллов. Описано резонансное возбуждение интенсивной упругой волны с помощью незеркального отражения в кристалле специальной волны накачки, когда энергия из падающего пучка волны накачки попадает в приповерхностный узкий отраженный пучок. Таким образом, явление резонанса основано на уменьшении ширины одного из отраженных пучка по отношению к ширине падающего. Выбор плоскости и угла падения обусловлен требованием близости отраженной волны к собственной объемной моде с потоком энергии вдоль границы. При отражении падающего пучка ширины D_i один из двух отраженных пучков распространяется под малым углом β_r к поверхности, и потому сильно сужается до ширины d_r . Коэффициент K^{ex} усиления пучка, очевидно, оценивается величиной порядка $\eta D_i/d_r = \eta \sin \alpha_i / \sin \beta_r \gg 1$. Интенсивность отраженного пучка увеличивается с его сужением, но по мере этого сужения, конечно, растет и его дифракционная расходимость. Тем не менее, при достаточно высоких частотах можно повысить интенсивность пучка в 5-10 раз, сохранив его расходимость на приемлемом уровне. Особенность данного отражения в том, что доля энергии «сжатого» пучка η остается конечной при его сужении. Аналогичное сужение пучка в изотропных структурах вблизи угла полного внутреннего отражения ни к какому усилению его интенсивности не приводит: в этом случае доля η энергии в сужающемся пучке стремится к нулю по мере уменьшения его ширины.

При резонансном отражении кристалл и геометрию распространения можно выбрать так, чтобы доля энергии η , попадающая в «сжатый» пучок из падающего, была преобладающей и даже достигла 100%. Таким образом, для нас желательно сочетание явлений сужения пучка вблизи существования особой объемной волны (резонансное отражение) и конверсии. В общем случае выбор кристаллов близких к конверсии определяется двумя условиями на упругие модули. Это существенно осложняет поиск подходящих кристаллов. Однако привлечение элементов симметрии позволяет сократить число условий до одного. Для перехода к единственному условию на конверсию достаточно одного элемента симметрии, а именно плоскости симметрии, расположенной параллельно поверхности кристалла. Таким образом, даже в геометрии распространения с моноклинной симметрией существенно облегчается поиск кристалла с оптимальными параметрами. Рассмотрение более симметричных кристаллов, например, ромбических или гексагональных, позволяет выявить несколько ориентаций, в которых существует резонанс, и выбрать оптимальные параметры для каждой из них [1, 2].

Список литературы

1. Альшиц В.И., Бессонов Д.А., Любимов В.Н. Резонансное возбуждение интенсивных акустических волн в кристаллах// ЖЭТФ 143. #6. 1077-1096. 2013
2. Альшиц В.И., Бессонов Д.А., Любимов В.Н. Возбуждение интенсивных акустических волн в гексагональных кристаллах// Кристаллография том 58, № 6, с. 881–890. 2013

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ ЦТС НА ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ Ir/YSZ/Si, ПОЛУЧЕННЫЕ КАТОДНЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Бешенков В. Г., Знаменский А. Г., Марченко В. А.

ФГБУН Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

andrew@iptm.ru

В работе проведено исследование процессов кристаллизации пленок ЦТС на гетероструктурах Ir/YSZ/Si. На подложки кремния диаметром 76 мм методом высокочастотного магнетронного распыления стехиометрических мишеней при температуре 700°C напылялся буферный слой YSZ толщиной 20-40 нм, на который без разрыва вакуума при температурах 650-725°C напылялся Ir толщиной 20-40 нм [1]. Пленки ЦТС толщиной 200-500 нм напылялись на такие гетероструктуры методом высокочастотного катодного распыления керамической мишени стехиометрического состава [2]. Напыление производилось при разных температурах подложки и в разных газовых атмосферах. Пленки ЦТС, напыленные при невысоких температурах 250-350°C, недостаточных для кристаллизации сегнетоэлектрической перовскитной фазы в процессе осаждения, далее проходили термическую обработку на воздухе в разных режимах. Пленки ЦТС, напыленные при температурах 550-650°C, термической обработке не подвергались.

Показано, что кристаллизация пленок ЦТС при высоких температурах в процессе роста наблюдается при условии проведения процесса напыления в атмосфере аргона, без добавления кислорода. Если при высоких температурах подложки напыление происходит в смеси аргона с кислородом, образуется другая фаза, не обладающая сегнетоэлектрическими свойствами. Это связано с окислением поверхности Ir в атмосфере кислорода, что подтверждается данными РСА. Однако, распыление керамической мишени в атмосфере аргона приводит к постепенной деградации ее поверхности, повышает вероятность образования дуговых разрядов, приводящих к локальному разрушению мишени. Показано, что *in situ* рост пленок ЦТС в перовскитной фазе наблюдается также, если начало напыления проводить в атмосфере аргона, а далее напылять в смеси аргона с кислородом. Это увеличивает срок службы мишени и позволяет получать сегнетоэлектрические пленки ЦТС с величиной остаточной поляризации 15-20 мкКл/см².

Показано, что термообработка на воздухе при температурах 600-650°C пленок ЦТС, полученных при пониженных температурах в атмосфере аргона или в двухстадийном процессе, приводит к формированию сегнетоэлектрической фазы с величиной остаточной поляризации 20-25 мкКл/см².

1. Beshenkov V.G., Fomin L.A., Irzhak D.V., Marchenko V.A., Nikolaichik V.I., Znamenskii A.G., "Heteroepitaxy of Ir films on silicon with a ceria/yttria stabilized zirconia buffer layer.", *Thin Solid Films*, V520, N23, с.6888, **2012г.**
2. Бешенков В.Г., Знаменский А.Г., Марченко В.А., "Сравнительный анализ катодного и магнетронного методов получения пьезоэлектрических пленок Pb(TiZr)O₃.", *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.*, V, N9, с.65, **2010г.**

ВЛИЯНИЕ СОБСТВЕННЫХ И ПРИМЕСНЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУЛЬФИДОВ ОЛОВА

Блецкан Д.И., Блецкан М.М., Фролова В.В.

Ужгородский национальный университет, 88000, г. Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина, e-mail: crystal_lab457@yahoo.com

Моно- (SnS) и дисульфид олова (SnS₂) принадлежат к слоистым полупроводникам, обладающих комплексом уникальных свойств, обусловленных особенностями их кристаллической структуры. Открывающиеся возможности практического использования интеркалированных литием слоистых кристаллов SnS₂ для создания высокоэффективных литий-ионных аккумуляторов [1], элементов памяти на эффекте изменения фазового состояния [2] и солнечных ячеек [3] на базе моносulfида олова стимулируют дальнейшее изучение их свойств. Независимо от метода выращивания, реальные кристаллы SnS всегда содержат большое количество (до 10¹⁸ см⁻³) катионных вакансий (V_{Sn}), а в кристаллах 2H-SnS₂ одновременно присутствуют как катионные, так и анионные вакансии (V_S), поскольку монослои олова заполнены только на 78 % и серы – на 72 % [4]. Будучи электрически заряженными, собственные точечные дефекты существенно влияют на физические свойства этих кристаллов. Введение других типов точечных дефектов, например, примесных атомов III, V, VII групп Периодической системы является эффективным способом модификации физико-химических свойств сульфидов олова.

В настоящей работе приводятся результаты расчета методом функционала плотности (DFT) в приближении суперячейки электронной структуры, полной и парциальных плотностей состояний, пространственного распределения заряда бездефектных кристаллов SnS и SnS₂, а также кристаллов, содержащих катионные и анионные вакансии, примеси замещения M→Sn (M = In, Ga, Sb, Bi), X→S (X = I, Cl). Результаты расчетов зонной структуры используются для объяснения экспериментальных спектров фотопроводимости и фотолюминесценции специально нелегированных и легированных слоистых кристаллов SnS и SnS₂.

Установлено, что наличие вакансий V_{Sn} и V_S, а также примесей замещения в кристаллических решетках SnS и SnS₂ приводит не только к смещению электронного энергетического спектра как целого и уровня Ферми, но и к перестройке всего энергетического спектра электронов. Так, электронные состояния катионной вакансии в SnS размещаются в глубине валентной зоны вблизи верха полосы 3s-состояний серы при -11.5 эВ. Кроме того, в запрещенной зоне SnS вблизи верха валентной зоны V_{Sn} формируют локальный акцепторный уровень с глубиной залегания 0.16 эВ. В случае SnS₂ анионные вакансии создают в запрещенной зоне донорный уровень, ионизация которого приводит к появлению полосы фотопроводимости с максимумом $h\nu_1 = 1.42$ эВ. Примеси замещения Sb (Bi)→Sn в SnS приводят к образованию донорных уровней, компенсирующих акцепторные состояния, вызванные катионными вакансиями, что приводит к резкому увеличению удельного темнового сопротивления и интегральной фоточувствительности.

1. Seo J.W., Jang J.T., Park S.W., Kim C. *et. al.* // Adv. Mater. 2008. V. 20. P.4269–4273.
2. Chung K.M., Wamwangi D. *et. al.* // J. Appl. Phys. 2008. V.103, № 8. P.083523.
3. Antunez P.D., Buckley J.J., Brutchey R.L. // Nanoscale. 2011. V.3, №.6 P. 2399–2411.
4. Palosz B., Steurer W., Schulz H. // Acta Cryst. B. 1990. V.46, № 4. P.449–455.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СУПЕРИОНИКА Ag_2SiS_3

Блецкан Д.И., Вакульчак В.В.

Ужгородский национальный университет, 88000, г. Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина, e-mail: crystal_lab457@yahoo.com

Среди известных материалов с высокой ионной проводимостью, которые используют в качестве твердотельных электролитов, особое место занимают стеклообразные халькогениды кремния, модифицированные M_2S ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Ag}$) [1]. Однако природа аномально высокой ионной проводимости этих материалов не получила еще надлежащего объяснения. Учитывая, что в псевдобинарных системах $\text{M}_2\text{S}-\text{SiS}_2$ образуются тройные соединения типа M_2SiS_3 , имеется возможность более подробно исследовать природу ионной проводимости в этом классе соединений. В качестве начального шага необходимо провести расчеты электронной структуры этих соединений.

В настоящей работе приведены результаты расчета методом функционала плотности энергетической зонной структуры Ag_2SiS_3 , кристаллизующегося в моноклинной структуре с параметрами решетки: $a = 6.6709$, $b = 6.656$, $c = 13.174$ Å, $\beta = 118.68^\circ$, пр. гр. $P2_1/c$, $Z = 16$ [2]. Основными элементами структуры Ag_2SiS_3 являются изолированные вдвоенные тетраэдры $[\text{Si}_2\text{S}_6]$, между которыми находятся атомы серебра в двух неэквивалентных положениях.

Проанализировано дисперсию энергетических уровней и вклад парциальных составляющих в полную плотность электронных состояний. Проведено сравнение рассчитанного спектра полной плотности состояний Ag_2SiS_3 с имеющимися в литературе экспериментальными XPS спектрами Ag_2S и SiS_2 .

Согласно выполненным расчетам, кристалл Ag_2SiS_3 является непрямозонным полупроводником-суперионом, поскольку абсолютный минимум зоны проводимости находится в точке Γ зоны Бриллюэна, а вершина валентной зоны в точке E. Вычисленное значение непрямой ширины запрещенной зоны равно $E_{\text{gi}} = 1.13$ эВ. Валентная зона, общей шириной 14.66 эВ, состоит из четырех четко разделенных подзон. С точки зрения ионного транспорта, наибольший интерес представляет валентная подзона, размещенная в энергетическом интервале $-5.77 \div 0$ эВ. Этот участок спектра плотности электронных состояний тройного соединения Ag_2SiS_3 определяется резонансным характером взаимодействия $4d$ -состояний серебра с $3p$ -состояниями серы, наблюдавшимся ранее в бинарном соединении Ag_2S . Особенности этой части спектра проявляются в расщеплении p -зоны серы на две компоненты и расталкивании последних в обе стороны от положения d -полосы серебра с ярко выраженным пиком при -3.11 эВ. Структура трех нижних валентных подзон обусловлена, главным образом, взаимодействием в вдвоенных тетраэдрах $[\text{Si}_2\text{S}_6]$ с преимущественно ковалентной связью.

В рамках метода функционала плотности вычислена также электронная плотность заряда для соединения Ag_2SiS_3 . Исходя из анализа кристаллической структуры и карт распределения валентной плотности Ag_2SiS_3 , по проводимости это соединение можно отнести к соединениям с Ag-ионным транспортом внутри сети полиэдров с выраженными каналами транспорта в плоскости XY.

1. Peng H., Machida N., Shigematsu T. // J. Mater. Chem. 2002. V. 12. № 4. P.1094–1098.
2. Zhdankov O., Fedorchuk A., Kityk I., Olekseyuk I., Parasyuk O. // J. Alloys Comp. 2011. V. 509. № 12. P.4372–4374.

ВЛИЯНИЕ СОСТОЯНИЯ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ НА ЛАЗЕРНУЮ СТОЙКОСТЬ ЩЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Блистанов А.А., Кугаенко О.М., Васильева Л.А.

¹НИТУ «МИСиС», Москва, crystalxxi@misis.ru

*Посвящается памяти Марианны Петровны Шаскольской,
которая являлась идейным вдохновителем данных исследований*

Представлены результаты исследования влияния примеси Sr на разрушение кристаллов хлористого калия под действием лазерного излучения. Совокупность экспериментальных данных объясняется фотохимической моделью лазерного разрушения.

Широкая область прозрачности щелочногалоидных кристаллов обуславливает их применение в оптике. Отсюда интерес к их механической прочности, которая повышается с введением щелочноземельных примесей, и к влиянию этих примесей на оптическое качество кристалла, в частности оптическую стойкость.

Концентрацию дефектов, инициирующих разрушение, оценивали из экспериментальных зависимостей вероятности пробоя от интенсивности лазерного излучения $P(I/I_n)$ где I_n - минимальное значение интенсивности лазерного излучения, вызывающего разрушение образца.

Оценки концентрации центров, инициирующих оптическое разрушение, проведенные по экспериментальным зависимостям $P(I/I_n)$ дают для исследуемых образцов значения от 10^8 до 10^{10} см⁻³ при увеличении содержания примеси от 10^{-2} до 10^{-1} мол.% соответственно. Данная концентрация превышает предел растворимости примеси. Наблюдается хорошая корреляция между концентрацией примеси в равновесном состоянии достаточно крупных агрегатов размерами 0.2 – 0.4 мкм и концентрацией центров, инициирующих разрушение.

Примесные рассеивающие центры представляют собой крупные агрегаты примесно-вакансионных диполей. Под действием лазерного излучения в них протекают фотохимические реакции, накопление продуктов которых может приводить к разрушению.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ФОРМИРОВАНИЯ КОНТАКТА МЕЖДУ СДАВЛИВАЕМЫМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ ТЕЛАМИ НА ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНОЙ СТАДИИ

Бойко Ю.И., Волосюк М.А., Кононенко В.Г.

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина,
Харьков, Украина, marina_andreevna@inbox.ru*

Формирование контакта (ФК) между кристаллическими телами обсуждается в связи с диффузионной сваркой и спеканием [1, 2], используя модель типа «клин-плоскость». Нами рассматривается изменение геометрии контакта «клин-плоскость» в ходе опыта при $T = 0,8T_m$, приводящее к образованию полостей в контактной зоне (рис. 1) и изменению механизма ФК. При смятии клина в кристалл выталкиваются дислокационные призматические петли (ДПП) внедрения, но при $S = W/W_0 \geq 0,5$ (на заключительной стадии) образовавшиеся полости, залечиваясь под нагрузкой $\langle \sigma \rangle$, генерируют вакансионные ДПП. Области кристалла с петлями разного чередуются. Возникают встречные потоки дефектов разного знака, которые рекомбинируют, приводя к растворению петель обоих типов, залечиванию полостей и ФК. Уравнение кинетики роста контакта, контролируемого растворением ДПП внедрения за счет создаваемого полостями пересыщения вакансиями:

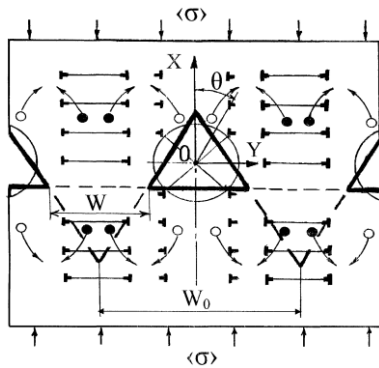


Рис.1. Схема потоков точечных дефектов на заключительной стадии формирования контакта (○ – вакансии, ● – межузельные атомы)

$$S - S_{st} = \frac{4\pi^2 (1-\nu) D_V \Delta C_V}{[Gb - 2\pi (1-\nu) \gamma] \cdot b \cdot \ln 8R_l/b} \langle \sigma \rangle (t - t_{st}),$$

где S , S_{st} – относительная ширина контакта в моменты времени t и t_{st} соответственно, t_{st} – время формирования квазистационарного дислокационного ансамбля, D_V – коэффициент диффузии вакансий при температуре T , ΔC_V – пересыщение вакансиями вдали от петель внедрения, $\langle \sigma \rangle = P/W_0$ – среднее напряжение в контакте, P – нагрузка на единицу длины клина, ν – коэффициент Пуассона, G – модуль сдвига, b – вектор Бюргерса, $\gamma = Gb/10$ – удельная поверхностная энергия, R_l – радиус ДПП. Экспериментальные данные, полученные на образцах меди

при $T = 0,8T_m \approx 800^\circ\text{C}$ и представленные с использованием приведенного уравнения, близки к линейным по $\langle \sigma \rangle$ и t . Оценка по угловым коэффициентам прямых дает $\Delta C_V \approx 10^{-9}$. Оценка вакансионного пересыщения $\Delta C_R = 2\gamma\omega/RkT C_0$ [4] (ω – атомный объем, C_0 – равновесная концентрация вакансий) вблизи полостей ($R \approx 3 \cdot 10^{-5}$ м) равна: $\Delta C_R \approx 3 \cdot 10^{-9}$ и близка к оценке ΔC_V . Это означает, что предлагаемый механизм ФК реален.

1. А. В. Люшинский. Диффузионная сварка разнородных материалов. М.: Академия, 2006. – 208 с.

2. В. Г. Кононенко, В. С. Гостомельский, Е. В. Кононенко, М. А. Волосюк, *Металлофизика* **13**, 12, 13 (1991).

3. П. Г. Черемской, В. В. Слезов, В. И. Бетехтин. Поры в твердом теле. М.: Энергоатомиздат, 1990. – 375 с.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛАНИНСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Большакова Н.Н., Пугачева Н.А.

Тверской государственной университет, г. Тверь, Российская Федерация, эл. адрес:
41_antares_26@mail.ru

Цель работы – исследование влияния примеси L- α -аланина на диэлектрические свойства и процессы переполяризации кристаллов триглицинсульфата (ТГС).

Измерение емкости образцов проводилось с помощью моста E7-4. Процессы переполяризации кристаллов триглицинсульфата изучены с помощью схемы, предложенной Сойером и Тауэром. Установлено, что при $T=25^{\circ}\text{C}$ величины диэлектрической проницаемости для монокристаллов АТГС колеблются от 5 до 60, переключаемой поляризации – от 1,3 до 3,1 мкКл·м⁻². С увеличением концентрации примеси величины диэлектрической проницаемости, переключаемой поляризации, полей смещения и коэффициента униполярности имеют тенденцию к уменьшению. Величины коэрцитивных полей колеблются от 500 до 900 В·см⁻¹, при этом однозначной концентрационной зависимости не прослеживается. При $T=25^{\circ}\text{C}$ для беспримесного кристалла ТГС петля диэлектрического гистерезиса прямоугольна и практически не искажена. В случае образцов АТГС симметрия петель нарушается: они униполярны и смещены по координатным осям. Это свидетельствует о преимущественной ориентации доменов одного из направлений вектора P_s . В интервале температур от 24 до 50 $^{\circ}\text{C}$ кривая $\varepsilon(T)$ монотонно возрастает. С дальнейшим увеличением температуры кривая $\varepsilon(T)$ резко возрастает и проходит через максимум при $T = 52^{\circ}\text{C}$. Увеличение концентрации L- α -аланина способствует повышению искажения петли гистерезиса кристаллов АТГС. С увеличением температуры от 20 до 48 $^{\circ}\text{C}$ петли диэлектрического гистерезиса уменьшаются по площади и при дальнейшем нагревании до 52 $^{\circ}\text{C}$ вырождаются в прямую линию. Ход зависимостей $P(T)$ и $E_c(T)$ существенно не отличается от известных в литературе для фазовых переходов второго рода.

L- α -аланин является наиболее эффективной органической примесью замещения. Молекулы глицина и L- α -аланина имеют сходную структуру. При изоморфном замещении части молекул глицина молекулами L- α -аланина в решетке ТГС появляется большое число необратимых диполей. Молекула L- α -аланина больше молекулы глицина, и ее вхождение в решетку создает локальное поле напряжений. Доменная структура кристаллов АТГС представлена линзовидными доменами и монодоменными блоками. Внутри монодоменной матрицы одного направления вектора P_s встречаются также домены противоположной ориентации вектора P_s , не имеющие определенной формы. Появление большого числа необратимых диполей при замещении молекулы глицина молекулой L- α -аланина приводит к выключению части доменов из процесса переполяризации, вследствие чего наблюдается уменьшение переключаемой поляризации и увеличение коэрцитивного поля с ростом концентрации примеси в кристалле.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ, ПЛОТНОСТИ, ТРЕЩИНОСТОЙКОСТИ КРИСТАЛЛОВ ЧАСТИЧНО СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ (ЧСЦ) В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОДЕРЖАНИЯ Y_2O_3

М.А.Борик¹, В.Т.Бублик², А.В.Кулебякин¹, Е.Е.Ломонова¹, Ф.О.Милович²,
В.А.Мызина¹, И.В.Самофалова², С.В.Серяков², Н.Ю.Табачкова².

¹Институт общей физики РАН, Москва, Россия

²Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»

Материалы на основе диоксида циркония обладают целым комплексом уникальных физико-химических, электрических и механических свойств, таких как высокая прочность, твердость, ударная вязкость, износостойкость, низкий коэффициент трения, высокая температура плавления, химическая инертность, низкая теплопроводность, биосовместимость. Эти свойства обуславливают широкий спектр различных применений, простирающихся от износостойких подшипников до медицинских хирургических инструментов и имплантатов.

Свойства, такого ценного материала как частично стабилизированный диоксид циркония, зависят от его фазового состава и структуры, поэтому актуальными являются исследования, направленные на выявление корреляции "состав - структура - свойства".

В данной работе методами рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии изучен фазовый состав и морфология двойниковой структуры кристаллов диоксида циркония стабилизированных Y_2O_3 в диапазоне концентраций 2.8 – 4.0 мол.%. Проведены измерения трещиностойкости методом микроиндентирования в зависимости от количества стабилизирующей примеси Y_2O_3 . Рассмотрены процессы, связанные с кислородной нестехиометрией, количеством вакансий и их зарядовым состоянием, которые могут влиять на механические свойства кристаллов ЧСЦ.

Показано, что с увеличением концентрации стабилизирующей примеси Y_2O_3 , изменяется характер двойниковой структуры и увеличивается количество нетрансформируемой t' фазы. Сравнение рентгеновской плотности образцов с плотностью измеренной методом гидростатического взвешивания показало, что в кристаллах ЧСЦ с ростом стабилизирующей примеси увеличивается количество кислородных вакансий.

Наиболее устойчивый к образованию трещин, оказался образец с наименьшей концентрацией стабилизирующей примеси Y_2O_3 , что можно объяснить содержанием в нем большого количества тетрагональной фазы t , обеспечивающей трансформационный механизм упрочнения материала и более многоуровневым характером двойникования.

РЕНТГЕН-ТОМОГРАФИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ОБЪЕМНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ В ИЗОМОРФНО- СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛАХ.

Бочаров С.Н., Крючкова Л.Ю., Вихарев А.Е.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия,
bocharovsergei@mail.ru

Процессы кристаллизации в многокомпонентных системах, по сравнению с ростом в бинарных и однокомпонентных системах, характеризуется рядом специфических особенностей, определяемых реакцией изоморфного обмена между кристаллом и раствором, а также изоморфным обменом между разными участками кристалла. Обмен происходит через раствор посредством синхронно протекающих процессов растворения неустойчивых по составу участков кристалла и роста устойчивых. Участки роста и растворения, по данным АСМ и оптической микроскопии, хаотически чередуются на поверхности кристалла, непрерывно меняют свою локализацию и варьируют в размерах от нанометров до сотен микрон. При этом сохраняется монокристаллическая структура индивида, но кристалл приобретает сложное строение, определяемое пространственным распределением микро и наноразмерных кластеров разного химического состава.

Для изучения подобной структуры нами, впервые в мире, был привлечен метод компьютерной рентгеновской томографии, основанный на различной величине поглощения рентгеновских лучей областями разного химического состава. Рентгеновские лучи формируют на CCD-детекторе двумерное теневое изображение образца. Массив теневых изображений, полученных при вращении кристалла на малый угол, реконструируется компьютером в объемное распределение коэффициентов поглощения в образце. Смешанные кристаллы изучались нами на рентгеновском микротомографе SkyScan 1174 (пространственное разрешение до 6 мкм) и нанотомографе SkyScan 2011 (пространственное разрешение до 300 нм).

Анализ полученных томографических изображений проводился как на качественном (выделение дефектности в виде включений, трещин, зональности-секториальности), так и на количественном уровне (гистограммы распределения томографической плотности, кривые изменения плотности по профилю, размер кластеров и т.д.). Исходя из количественного анализа, нами выявлена взаимосвязь между полуширинами гистограмм распределения плотности по объему кристалла и составами соответствующих исходных растворов: минимальные значения характерны для чистых веществ, а максимальные для смешанных кристаллов, выращенных из растворов промежуточного состава. Изучение профилей распределения плотности построенных по нормали к граням кристалла позволяет оценить степень фракционирования раствора, время начала фракционирования (по точке перегиба усредненного тренда профиля), а также его скорость (по углу наклона линии тренда). Сопоставление данных полученных на разных приборах, с разным пространственным разрешением, позволило оценить средний размер кластеров микрокомпозиционной неоднородности в 10 мкм. Полученные закономерности соблюдаются как в модельных смешанных соединениях – $K(Cl,Br)$, $(Ba,Pb)(NO_3)_2$, $(Co,Ni)K_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$, $(Co,Ni)(NH_4)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$, $(K,Rb)HC_8H_4O_4$, $Na(Cl,Br)O_3$; так и в природных минералах переменного состава (гранат, турмалин, апатит). Таким образом, привлечение рентгеновской томографии позволяет получить данные важные для понимания генезиса смешанных кристаллов различной природы.

Исследования поддержаны грантами РФФИ (12-05-00876 и 13-05-12053) и проводились в РЦ «Геомодель» СПбГУ.

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССА РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЭКСТРУДИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ХАЛЬКОГЕНИДОВ Bi и Sb

В.Т.Бублик¹, М.Г.Лаврентьев², В.Н.Мурашев¹, А.И.Сорокин²,
И.В.Самофалова¹, В.П.Панченко², В.Б.Освенский², Н.Ю.Табачкова¹

¹Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»

²Государственный научно-исследовательский и проектный институт
редкометаллической промышленности «Гиредмет»

Одним из важных преимуществ экструдированных термоэлектрических материалов на основе Bi_2Te_3 является более высокая механическая прочность по сравнению с материалами, полученными кристаллизацией из расплава. Механические свойства играют особую роль при использовании материала в термогенераторных модулях, ветви которых испытывают более высокие термические напряжения вследствие большой разности температур на модуле. Поскольку экструзия обычно проводится при достаточно высоких температурах, структура экструдированного материала является результатом пластической деформации с участием нескольких систем скольжения, в результате которого формируется текстура деформации. При этом ориентация зерен преимущественно такова, что параллельно оси экструзии устанавливаются, с наибольшей вероятностью, плоскости спайности. Одновременно протекают процессы возврата и, возможно, различных стадий рекристаллизации, в последнем случае текстура деформации может разрушаться. Формирование структуры в процессе горячей пластической деформации сопровождается также дефектообразованием.

В данной работе проведено исследование изменения тонкой структуры, плотности и текстуры термоэлектрического материала р-типа проводимости в зависимости от температуры и коэффициента вытяжки экструзии.

Сопоставление данных о свойствах, структуре и плотности материала позволило определить в работе температуру начала первичной рекристаллизации, которая ухудшает текстуру. Кроме того, при движении границ в процессе первичной рекристаллизации изменяется концентрация носителей заряда: с одной стороны, происходит отжиг деформированных дефектов, дающих донорные уровни, с другой стороны – генерация точечных дефектов при движении высокоугловых границ в ходе рекристаллизации. Мы полагаем, что донорные уровни связаны с образованием дефектов в процессе пластической деформации, когда происходит пересечение дислокаций,двигающихся в разных системах скольжения.

Изменение плотности и текстуры хорошо отражают интенсивность рекристаллизации и позволяют разобраться в происходящих процессах в термоэлектрическом материале при экструзии.

НЕРАВНОВЕСНЫЙ НОРМАЛЬНЫЙ РОСТ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА С ПСЕВДОКУБИЧЕСКОЙ ОГРАНКОЙ И ИХ ПРОЧНОСТЬ

Бульенков Н.А., Желиговская Е.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия,
lmm@phycbe.ac.ru*

Изучение методами секционной рентгеновской топографии и фрактографии внутренней морфологии пирамид роста кристаллов природного алмаза в виде октаэдров и кубоидов, а также синтетических кристаллов алмаза с октаэдрическим и кубооктаэдрическим габитусом, полученных под давлением, показало, что сектора их роста $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ имеют тонковолокнистое фибриллярное строение [1, 2]. Теми же методами показано [3], что балласовидные кристаллы также имеют тонковолокнистое строение, причем в монокристаллических частях их секторов роста $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ фибриллы параллельны и направлены вдоль осей их пирамид роста $\langle 100 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$, а в остальном объёме фибриллы направлены вдоль радиусов, как в балласах.

Изучение внутренней морфологии природных кристаллов алмаза разновидности III (по Орлову [4]) с несовершенным кубическим габитусом показало, что все их сектора роста $\langle 100 \rangle$ образованы грубыми пластинами $\{110\}$ толщиной 6–10 мкм [5]. На микрофотографиях скелетных форм синтетических кристаллов алмаза с кубооктаэдрическим габитусом, полученных из газовой фазы, видно, что они также состоят из пластин $\{110\}$. Можно предположить, что эти пластины образованы фибриллами, ветвящимися в плоскости $\{110\}$ каждой пластины в двух направлениях $\langle 111 \rangle$, пересекающихся под углом $109,5^\circ$. Этот угол отчетливо виден на секционных топограммах сечений $\{110\}$ и фрактограммах сколов кристаллов разновидности III [5].

Был предложен геликоидальный механизм роста фибрилл структуры алмаза в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, но так как винтовые дислокации в структуре алмаза в этих направлениях невозможны, встал вопрос о структуре осей этих геликоидов. Оказалось, что для геликоидов с направлением $\langle 111 \rangle$ в качестве оси можно взять спираль $(30/11)$, полученную путём диспирационного преобразования $(+60^\circ, \frac{1}{2} a_{\langle 0001 \rangle})$ канала с направлением $\langle 0001 \rangle$ в структуре типа вюртцита. 12 таких спиралей можно объединить в T -кластер [6] около их общей точки с индексами осей спиралей $(30/11) \langle \tau^2 \tau 1 \rangle$ в кубических координатах кластера. Другие 6 спиралей (с формулой $(40/9)$ и индексами осей $\langle \tau^2 1 0 \rangle$), представленные в T -кластере, являются раскрученными на один виток спиралью структуры алмаза вдоль кристаллографических осей 4_1 и 4_3 [6]. Фибриллы вдоль $\langle 100 \rangle$ могут состоять из таких спиралей. Так как эти спирали могут пересекаться под углом 90° и легко встраиваться в структуру алмаза, они могут стать зародышами пластин $\{100\}$, наблюдаемых в тонких пленках алмаза, выращенных при определенном температурном режиме из газовой фазы [7].

Пластинчатое внутреннее строение монокристаллов алмаза разновидности III определяет то, что они раскалываются по нехарактерным для этого плоскостям (110) и (100) , а не по плоскости спайности (111) , энергия раскалывания по которой наиболее низкая (11330, 13880, 19630 эрг/см² по (111) , (110) , (100) , соответственно [4]). На поверхностях сколов этих кристаллов также видны следы грубых пластин $\{110\}$ [5].

[1] Ю.Л. Орлов, Н.А. Бульенков, В.П. Мартовицкий // Докл. АН СССР. 1980. Т.252. С. 703. [2] В.П.Мартовицкий, Б.И.Заднепровский, Н.А.Бульенков, М.И.Самойлович // Кристаллография. 1985. Т.30. С.1203. [3] В.П. Мартовицкий, Н.А. Бульенков, Ю.П. Солодова // Изв. АН СССР. Сер. геол. 1985. № 6. С. 71. [4] Ю.Л.Орлов. Минералогия алмаза. М.: Наука, 1973. [5] Yu.L. Orlov, N.A. Bulienkov, V.P. Martovitsky // Phys. Chem. Min. 1982. V. 8. No. 3. P. 105. [6] N.A. Bulienkov // Fields Institute Monographs. Vol. 10. Quasicrystals and Discrete Geometry. Ed. by J.P. Patera. Providence: Am. Math. Soc., 1998. P. 67. [7] Б.В. Спицын, А.Ф. Белянин, Н.А. Бульенков, В.М. Ривилис // Техника средств связи, сер. ТПО. 1987. Вып. 1. С. 61.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННОЙ ЗОНЫ ПРИ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ СТАЛЕЙ

Буравлев Ю.М., Милославский А.Г., Иваницын Н.П.

Донецкий национальный университет, Донецк, Украина, alta7@ukr.net

Данная работа посвящена исследованию особенностей комбинированного насыщения (КХФО) поверхностных слоёв сталей Ст3 и У8 азотом и углеродом из газовой фазы при температурах 600 и 950 °С с использованием традиционного печного метода. Источником азота служил газ аммиак, а углерода – пропан-бутан.

Величина микротвёрдости поверхностной ϵ -фазы в Ст 3 изменяется в широких пределах 150-300 кг/мм², что связано с её пористостью, то есть микротвёрдостью межпористого материала и пор, заполненных атомарным азотом, углеродом, водородом. Основной вклад в увеличение микротвёрдости после КФХО вносит γ' -фаза (твёрдый раствор на основе нитрида железа Fe₄N) – примерно 300 кг/мм². Однако следует отметить, что толщина диффузионного слоя после КФХО практически не изменяется по сравнению с диффузионным слоем азотированной стали.

При повышении температуры азотирования до 950°С слой ϵ -фазы практически отсутствует.

Следует отметить, что согласно литературным данным, углеродный потенциал насыщения атмосферы пропан-бутан составляет 1,01 атм. Кроме того, растворимость углерода в α -железе составляет 0,02% при 727°С, поэтому при температуре 600°С не приходится ожидать насыщения Ст 3 углеродом из-за его ничтожно малой растворимости и малого градиента концентрации в α -железе, приводит к образованию на поверхности Ст 3 слоя углерода.

Однако, в данной ситуации науглероживанию подвергался не однородный слой α -железа, а пористая ϵ -фаза, поры которой находятся под давлением ~ 30 атм, поэтому процесс азотирования продолжается, так как поры в данном случае являются депо для диффузионно подвижного атомарного азота и углерода в межпористом пространстве, что и способствует дальнейшему процессу азотирования даже в отсутствии аммиачной атмосферы.

При увеличении температуры до 950°С содержание углерода в поверхностных слоях гораздо выше, чем при температуре 600°С, что вызывает повышение микротвёрдости.

При насыщении углеродом стали У8 (950, 600°С) в течение 8 часов в атмосфере пропан-бутана микротвердость диффузионной зоны по ее глубине составляет примерно 250 кг/мм² и не отличается от величины микротвердости основы стали.

Повышение микротвердости стали У8 после КХФО в атмосфере пропан-бутана и аммиака по-видимому, связано с образованием слоя карбонитрида железа (5,7-6,1% N), обладающего в два раза большей величиной микротвердости, чем высокоазотистая ϵ -фаза (8-11,2% N).

Обобщая экспериментальные результаты влияния газового азотирования, цементации, последовательного азотирования и цементации, цементации и азотирования на формирование фазового состава и прочности поверхности двух сталей Ст 3 и У8 при температурах 600 и 950°С, следует отметить определяющую роль азота, который насыщает внешнюю фазу, являющуюся источником азота для диффузии в глубь материала, и создает слой нитридов и карбонитридов, повышающих микротвердость.

ОСОБЕННОСТИ АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛА SBN-61 С ПРИМЕСЬЮ КОБАЛЬТА В ОБЛАСТИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

¹Бурханов А.И., ¹Шейкин О.П., ²Ивлева Л.И.

¹ Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет, Россия, Волгоград

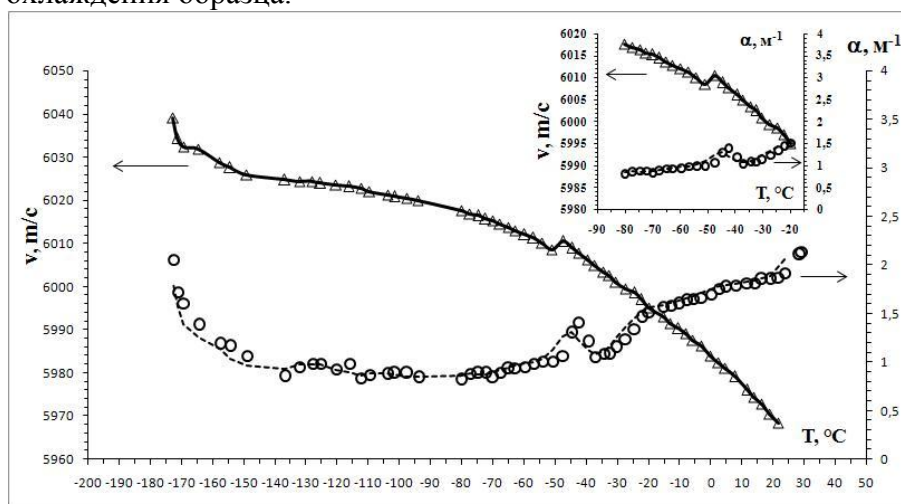
² Институт общей физики РАН, Россия, Москва

Sheykin-Oleg@yandex.ru

Ранее в [1] нами были исследованы температурные зависимости диэлектрических и акустических свойств $\text{Sr}_{0,61}\text{Ba}_{0,39}\text{Nb}_2\text{O}_6:\text{Co}^{3+}$ (SBN-61+0.01at.%Co) в области размытого фазового перехода (РФП). Было установлено, что как диэлектрический, так и акустический отклик является типичным для релаксорных материалов в области РФП.

Целью настоящей работы является изучение акустических параметров данного образца при температурах ниже T_m (температуры, соответствующей максимуму диэлектрической проницаемости). Образец монокристалла SBN-61+0,01Co был изготовлен в виде бруска ($19 \times 3 \times 3 \text{ мм}^3$). На грани, перпендикулярные полярной оси c , с серебряными электродами подавалось смещающее поле $E=3 \text{ кВ/см}$. Далее образец нагревали до температуры выше T_m , а затем охлаждали до комнатной температуры с последующим отключением E . Измерения скорости (v) и затухания (α) ультразвука осуществлялось резонансным методом как в процессе охлаждения, так и в процессе нагрева с постоянной скоростью $1,5^\circ\text{C/мин}$.

Рисунок иллюстрирует температурные зависимости $v(T)$ и $\alpha(T)$ полученные в процессе охлаждения образца.



Видно, что при общем характере поведения $v(T)$ и $\alpha(T)$ в монокристалле SBN-61 [1,2], на кривой $v(T)$ проявляется скачок (врезка) при $T \approx -47^\circ\text{C}$, а на кривой затухания $\alpha(T)$ при этой температуре возникает небольшой максимум (в сравнении с основным максимумом $\alpha(T)$ в области T_m [1,2]). Примерно такой же вид имеют аномалии $v(T)$ и $\alpha(T)$ и при нагреве образца. Обнаруженные в настоящей работе особенности в поведении акустических параметров при $T < T_m$ согласуются с характерными температурными зависимостями параметров решетки (a , c) в SBN-61 установленными в [3], где при $T \sim -40 - -50^\circ\text{C}$ отмечается перегиб кривой $c(T)$.

Список литературы:

- [1] Burkhanov A.I., Sheykin O.P., Ivleva L.I., //Abstracts of The International Workshop on RelaxorFerroelectrics. St. Petersburg, Russia, July 1 -6, 2013. P.161.
- [2] Пилипенко А.С., Бурханов А.И., Ивлева Л.И.// ФТТ. 2009. Т.51. Вып.3. С.543-546.
- [3] S. Schaniel, Thesis, ETH Zurich, 2003, <http://e-collection.ethlib.ethz.ch>.

ПОЛУЧЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРО- И ТЕПЛОПЕРЕНОСА В КОНГРУЭНТНО ПЛАВЯЩИМСЯ ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $Pb_{1-x}Cd_xF_2$ СО СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА

Бучинская И. И., Каримов Д. Н., Сорокин Н. И., Сульянова Е. А.,
 Попов П. А.*, Соболев Б. П.

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия
 *Брянский государственный университет, Брянск, Россия
 e-mail: fluorides@ns.crys.ras.ru

Твердый раствор $Pb_{1-x}Cd_xF_2$ со структурой флюорита (CaF_2) при $x \sim 0.33$ характеризуются конгруэнтным плавлением, что позволяет выращивать однородные по составу монокристаллы. Они получены из расплава методом Бриджмена во фторирующей атмосфере (продукты пиролиза тефлона) и измерены их электропроводность σ и теплопроводность k . Прозрачные однородные монокристаллические булы не содержали мелкодисперсных частиц. Состав кристаллов $Pb_{1-x}Cd_xF_2$, ($x = 0.33 \pm 0.01$) найден из концентрационной зависимости параметра элементарной ячейки $a(x)$ [1] ($a = 5.75963(7)$ Å). Измерения σ выполнены методом импедансной спектроскопии в диапазоне частот $1 - 10^7$ Гц и температур $132 - 873$ К в инертной атмосфере (N_2) и в вакууме ($\sim 10^{-3}$ Па). Измерения k проведены стационарным методом теплового потока в интервале $50 - 300$ К.

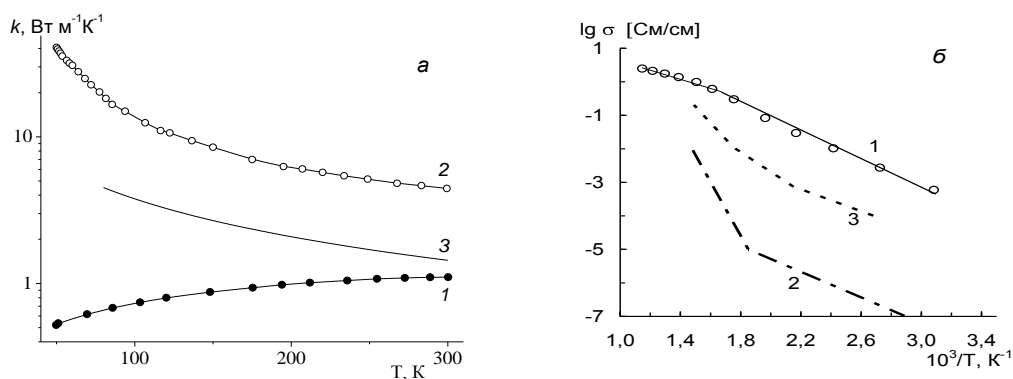


Рис. 1. Зависимости $k(T)$ (а) и $\sigma(T)$ (б) кристаллов $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ (1), CdF_2 (2) и PbF_2 (3).

Кристаллы $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ имеют высокую фтор-ионную (суперионную) проводимость ($\sigma = 2 \times 10^{-2}$ См·см $^{-1}$ при 293 К), низкую энтальпию активации ионного транспорта ($\Delta H = 0.3 - 0.4$ эВ), низкую теплопроводность ($k = 1.1$ Вт·м $^{-1}$ ·К $^{-1}$ при 300 К). Измеренная впервые, температурная зависимость $k(T)$ характеризуется типичным "стеклообразным" поведением. Эта особенность теплопереноса в кристаллах $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ взаимосвязана с их суперионной проводимостью. Ранее эта корреляция прослеживалась для гетеровалентных твердых растворов $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ ($M = Ca, Sr, Ba; R - PЗЭ$) [2]. Процессы тепло- и электропереноса в кристаллах $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ обусловлены [3] позиционным разупорядочением анионной подрешетки (дефицит ионов фтора в решеточных позициях равен 25 ± 2 %) и статистическими смещениями (0.5 Å) катионов при замещениях Pb^{2+} на Cd^{2+} .

- [1] Сорокин Н.И., Бучинская И.И., Соболев Б.П. // ЖНХ. 1992. Т. 37. № 12. С. 2653;
 [2] Иванов-Шуц А.К., Сорокин Н.И., Арутюнян С.Р. и др. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 4. С. 1235; [3] Trnovcova V., Fedorov P.P., Ozvoldova M. et al. // J. Optoelectronics and Advanced Materials. 2003. V. 5. № 3. P. 627.

МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ ТЕПЛОВЫДЕЛЯЮЩИХ ПОКРЫТИЙ Ti/Al

Бычкова М.Я.¹, Петржик М.И.¹, Левашов Е.А.¹, Кирюханцев-Корнеев Ф.В.¹,
Цыганков П.А.²

¹НИТУ "МИСус", Москва, Россия, marina_sof@rambler.ru

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Многослойные наноструктурные тепловыделяющие покрытия представляют собой чередующиеся наноразмерные слои элементов или соединений, способных к экзотермическому взаимодействию с выделением тепла. Они применяются для получения неразъемных соединений при пайке трудно совместимых материалов, а также для защиты информации, хранящейся в электронных устройствах.

В работе исследованы механические и трибологические свойства многослойных покрытий на основе известной бинарной системы Ti/Al. Полученные многослойные покрытия состояли из разного количества (от 8 до 280) чередующихся слоев, толщина слоя для разных образцов составляла от 3,8 до 125 нм. Общая толщина покрытия во всех случаях равнялась 2 мкм. Покрытия были осаждены методом магнетронного распыления элементных мишеней на подложки из монокристаллического кремния (для исследования состава и структуры) и на подложки из плавленого кварца, сапфира, микро- (м/с) и наноструктурированного (н/с) титана (для изучения механических и трибологических свойств).

Сравнительный анализ данных наноиндентирования позволил установить, что для всех образцов с покрытиями, осажденными на подложки из плавленого кварца, малые нагрузки на индентор, соответствующие глубинам погружения индентора менее 100 нм, дают относительно низкие значения твердости (<4,5 ГПа). При увеличении нагрузок в интервале глубин погружения индентора 130–300 нм твердость каждого из образцов практически не меняется (в пределах ошибки измерений). При дальнейшем увеличении нагрузки (следовательно, и глубины погружения индентора) наблюдается повышение твердости покрытия, связанное с влиянием подложки из плавленого кварца, твердость которого 9,8 ГПа. Влияние подложки становится менее заметным с уменьшением толщины отдельного слоя. Найдено, что зависимость твердости многослойных покрытий Ti/Al от толщины слоя имеет характер, схожий с кривой Холла–Петча, т.е. с уменьшением толщины отдельного слоя твердость многослойных покрытий Ti/Al увеличивается [1].

Результаты трибологических испытаний показали, что на относительно твердых оксидных подложках происходит полное истирание покрытия после примерно 200 оборотов. Об интенсивности этого процесса свидетельствует повышенная амплитуда коэффициента трения в начале эксперимента. Резкое уменьшение амплитуды свидетельствует о контакте контртела с твердой полированной оксидной подложкой. Амплитуда коэффициента трения покрытий на металлических подложках примерно одинакова в течение всего испытания, что свидетельствует о том, что покрытие сохраняется до конца испытания. Согласно экспериментальным данным, наибольший приведенный износ характерен для покрытия на подложке из сапфира, а наименьший – на титановых подложках, что обусловлено более высокой адгезией покрытия к металлическим (титановым) подложкам [1].

1. Левашов Е.А., Петржик М.И., Тюрина (Бычкова) М.Я., Кирюханцев-Корнеев Ф.В., Цыганков П.А., Рогачев А.С. Многослойные наноструктурные тепловыделяющие покрытия. Получение и аттестация их механических и трибологических свойств // *Металлург. - М.*, 2010. - №9. - С.66-74.

OPTIMAL DEFECTS IN POLYCRYSTALLINE COLLAGEN FIBRILS PACKING

Wojnar R.

IPPT PAN, Warsaw, Poland, rwojnar@ippt.gov.pl

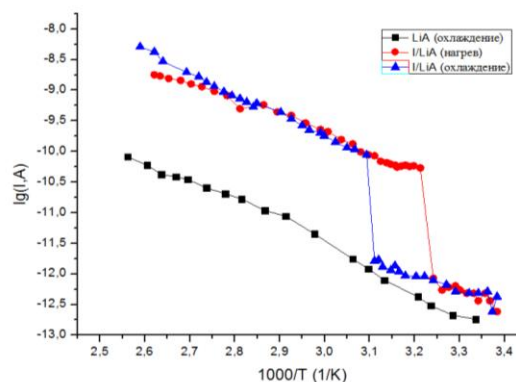
Polycrystalline structure of type 1 collagen fibrils dense packing is now not well described. Search for optimal defects in it is proposed for Symposium honoring remarkable similar experiences of Marianna Petrovna Shaskolskaya with polycrystal defects: dislocations ... Tropocollagen molecules (TC ~300 nm long) spontaneously self-assemble, with regularly staggered ends, into larger arrays known as fibrils. In most abundant fibrillar collagens of type 1, TC are staggered from each other by about 67 nm, a distance that is referred to as D-period and changes depending upon the hydration state of the aggregate. Each D-period contains approximately 4.4 TC. Therefore, there is a part containing 5 molecules in cross-section (called "overlap") and a part with 4 TC. TC subunits are organized in such a way that in perpendicular plane of cross-section they form polycrystalline quasi-hexagonal packing (T.J. Wess 13 papers 1995-2007 and my: "Bone and cartilage—its structure and physical properties" in: "Biomechanics of hard tissues" Wiley 2010 and "Piezoelectric phenomena in biological tissues" Chapter 6 in: "Piezoelectric Nanomaterials for Biomedical Applications" Springer 2012) with vacancies, edge dislocations, grain boundaries (GB). Graphene advances may help for the best representation of this packing. Emerging pattern of 5-,Hexa-,7-gonal close-packing (5H7) in polycrystalline graphene will soon confirm new understanding of 2D polycrystal. Triple junctions (TJ) of GB in graphene must contain additional pentagonal or heptagonal disclination, recently investigated as crack's centers by Boris Yakobson (Nano Lett. 13:1829 Apr 2013). Against repeatedly assumed von Neumann – Mullins model of 2D grains growth with closed GB loops around any grain, expected are more rich configurations of GB, TJ with penta- or hepta-gonal disclinations, 5/7 edge dislocations, vacancies, interstitials. Misorientation between neighboring grains G1 and G2 (G1/G2) is rotation angle $A_{12} < 60^\circ$ transferring nearest axes G1 to G2 clockwise. $A_{21} = 60^\circ - A_{12}$ is misorientation regarded from opposite direction of GB (of G1/G2) between G1 and G2. Sum of 3 GB angles in TJ is $< 180^\circ$, because each GB angle is $< 60^\circ$. Such sum could be only 60° or 120° , because it must be integer $\cdot 60^\circ$. Proof: Angle inside grain, between axes-borders of both GB, is integer $\cdot 60^\circ$. Three such angles together with three GB angles sum up to $6 \cdot 60^\circ = 360^\circ$ around flat TJ, so sum of 3 GB angles in TJ also must be integer $\cdot 60^\circ$. GB of G1/G2, fully embedded into G3, and of G1/G3 (G2/G3) make loop around two-sided G1 (G2). At G1/G3/G2 and G2/G3/G1 alternating opposite TJ have sums: $TJ_{132} = A_{13} + A_{32} + A_{21} = (60^\circ - A_{31}) + (60^\circ - A_{23}) + (60^\circ - A_{12}) = 180^\circ - A_{23} - A_{31} - A_{12} = 180^\circ - TJ_{231}$, so reveal the simplest and most fundamental chirality of reflected triangles. Simulated atomistic 2D polycrystal also exhibits only two possible TJ with additional disclination: 5 for 60° or 7 for 120° , preferably alternating along GB, but rarely forming closed loops around grains. Colorful animation clips could present: moving TJ of coincident GB with $\sigma = 7, 13, 19, 91, 133, 247$; GB with partial disclinations changing misorientation; recrystallization of simulated atomistic 2D polycrystal with only two opposite TJ, GB with alternating TJ, GB not closing into loops around grains, 5/7 edge dislocations, disclinations, vacancies, interstitials etc. represented by 5H7. John Werner Cahn in 1965 first described 5/7 edge dislocation in 5H7. Also GB and TJ in 5H7 during his lecture "Euler Law and penta-hepta defects" at MIT (1970) biological conference "Shaping of tissue by deviation from hexagonal close-packing of cells", inspired by Bragg-Nye model of recrystallization in dense packing of small equal bubbles.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ЦЕОЛИТОВ LiA И НАНОКОМПОЗИТОВ I/LiA

Вейсман В.Л., Лукин А.Е., Соловьев В.Г., Трифонов С.В., Цема Г.С.

Псковский государственный университет

Цеолит типа А часто используется в качестве регулярной матрицы для создания нанокпозиционных материалов, поскольку его каркас обладает трехмерной системой пересекающихся каналов [1,2]. В данной работе в качестве матрицы нанокпозиционирован цеолит А в литиевой форме. Идеализированный состав элементарной ячейки цеолита LiA: $Li_{12} [(AlO_2)_{12}(SiO_2)_{12}] \cdot 27H_2O$ [3]. Нами впервые (судя по литературным данным) был создан наноккомпозит I/LiA путем введения вещества – «гостя» в процессе прогрева цеолитной матрицы – «хозяина» в парах молекулярного йода по методу В.Н. Богомолова [4]. Для этого, отоженные образцы LiA помещали в стеклянную ампулу вместе с кристаллами йода. Введение йода осуществлялось в вакуированной ампуле при температуре 582 К в течении 12 часов, при этом парциальное давление паров йода 0,35 МПа. В результате введения йода образцы приобретали темно-коричневую окраску. Электрические свойства микрокристаллов LiA и наноккомпозитов I/LiA, имеющих форму куба с длиной ребра 50 мкм исследовались с помощью прижимных контактов [1,2]. Ток измерялся электротрометром на базе прибора СП-1М «Кактус» с точностью $5 \cdot 10^{-14}$ А. На рисунке представлена температурная зависимость силы тока, протекающего через образцы при постоянном напряжении в 15 В. Ранее нами было показано [5], что в дегидратированных образцах цеолита типа А основными носителями постоянного тока являются катионы металлов. Однако, характер полученных кривых ($\lg(I) = f(10^3/T)$) для наноккомпозита I/LiA (см. рис.) резко отличается от подобной зависимости для цеолита LiA. Можно предположить, что данный эффект обусловлен суперионностью наших композитов [6]. Для выяснения физического механизма перехода наноккомпозита в суперионное состояние нами в дальнейшем будут проведены дополнительные исследования.



Работа поддержана АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» Министерства образования и науки России.

1. Соловьев В., Кумзеров Ю., Ханин С. Физика регулярных матричных композитов. – Saarbrücken: LAMBERT Academic Publishing, 2011. – 368 с.
2. Solovyev V.G., Ivanova M.S., Pan kova S.V., Trifonov S.V., Veisman V.L. Handbook of Zeolites: Structure, Properties and Applications / Ed. T.W. Wong, New York: Nova Science Publishers, 2009, Chapter 5, P. 77-99.
3. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976.
4. Богомолов В.Н. // УФН. – 1978. – Т. 124. – 1. С. 171 – 182.
5. Вейсман В.Л., Марков В.Н., Николаева Л.В., Панькова С.В., Соловьев В.Г. // ФТТ. 1993. 35. С. 1390-1393.
6. Иванов-Шиц А.К., Мурун И.В. Ионика твердого тела. – Т. 1. – СПб: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2000. – 616 с.

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Векилов Ю.Х.

НИТУ «МИСус», Москва, yuri.vekilov@gmail.com

Квазикристаллы-объекты с аперiodическим дальним атомным порядком и симметрией, запрещенной для периодических структур. Открыты в Априле 1982 г., первая публикация появилась в Ноябре 1984г. В 2011 году за открытие квазикристаллов Д.Шехтману присуждена Нобелевская премия. Значение открытия оказалось огромным.

Во первых, пришлось пересмотреть сложившиеся представления о строении кристаллов и отказаться от взглядов, что периодичность структуры и дальний атомный порядок-синонимы, и в 1992г Международный союз кристаллографов принял новое, более общее определение кристаллов "как твердых тел, дифракционная картина которых представляет набор резких пятен", и в смысле этого определения квазикристаллы классифицируются как подкласс кристаллов. Во вторых ,был открыт новый класс твердых тел с неизвестной ранее структурой и необычными свойствами. Квазикристаллы - сплавы металлических элементов, но их свойства отличаются от свойств соответствующих металлических и аморфных фаз. Специфичны и электронный, и тепловой транспорт, термодинамические характеристики, магнитные и механические свойства. Особенности имеют и электронный спектр и спектры возбуждений решетки. Все это дало повод многочисленным спекуляциям при интерпретации свойств, однако практически все объясняется в рамках известных представлений современной теории твердого тела. В докладе рассказывается о поведении электросопротивления, оптической проводимости, о возможности перехода металл-изолятор, температурной зависимости теплопроводности, теплоемкости, о магнитных свойствах, механических характеристиках. Кратко внимание уделяется практическим приложениям и новым, искусственно созданным материалам со структурой, аналогичной структуре квазикристаллов-квазикристаллическим материалам.

СОВМЕСТНОЕ ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВОГО ПОЛЯ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ Si

Велиханов А.Р.

ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия,
e-mail: art677@mail.ru

Важной областью применения деформационных эффектов в технике является исследование устойчивости полупроводниковых приборов к перегрузкам. Во многих устройствах полупроводниковые приборы подвергаются действию больших нагрузок и ускорений, которые приводят к нарушениям в работе [1]. Обработка полупроводника в условиях совместного действия постоянных тепловых и электрических полей позволит, вероятно, использовать такой кристалл для создания полупроводниковых приборов устойчивых к действию нагрузок, перегрева и кратковременных токов, протекающие в приборе во время действия нагрузки.

Пластичность близкая к металлической указанная [2,3], наступала в кремнии при температуре выше $0,6 \cdot T_{пл}$ (горячая пластическая деформация – ГПД), где $T_{пл}$ – температура плавления. В предложенном новом способе деформирования воздействие теплового поля наряду с прохождением постоянного электрического тока через образец (комбинированная пластическая деформация – КПД) в условиях сжатия полупроводника, позволяет проводить испытания при $0,5 \cdot T_{пл}$.

Объектом исследования служили образцы монокристаллов Si p - типа с удельными сопротивлением $\rho = 5 \text{ МОм} \cdot \text{см}$, легированные мышьяком, в виде параллелепипедов с размерами $14 \times 8 \times 4 \text{ мм}^3$, ребра которых совпадали с кристаллографическими направлениями [101], [100], [110] соответственно. Деформация в условиях КПД проводилась в течение 30 мин. Образцы сжимались вдоль направления [110] при различных температурных испытаниях от 700°C до 800°C и плотностях тока от 80 А/см^2 до 100 А/см^2 . Приложенное механическое напряжение σ менялось от 0 до 20 МПа при скорости нагружения 6 г/с. Целью исследования являлось выяснение влияния КПД на прочностные, пластические и электрические свойства кремния.

Проведенные исследования, выявили ряд преимуществ КПД перед ГПД. Предложенный способ, позволил значительно снизить предел пластического течения, как по температуре, так и по приложенному механическому напряжению. Кроме того, использование в этом способе направленного потока электронов в качестве дополнительного параметра воздействия позволяет генерировать в монокристалле кремния более упорядоченную и однородно ориентированную дислокационную структуру.

Дополнительные измерения показывают, что чем больше растет величина пластической деформации полупроводника, тем заметнее уменьшается его величина удельного сопротивления по сравнению с величиной удельного сопротивления исходного образца.

Литература

- [1] А.Л. Полякова, Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов, Энергия, Москва (1979).
- [2] В.Г. Говорков // Кристаллография 1961, т.5, в.6, с.789 - 791.
- [3] С.С. Горелик, М.Я. Дашевский. Материаловедение полупроводников и диэлектриков (М., Металлургия, 1988) с. 574.

РОСТ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА $ZnGeP_2$ И СТРУКТУРА ЕГО ДЕФЕКТОВ.

Г. А. Верозубова¹, А.О. Окунев², А.И. Грибенюков¹, А.Ю. Трофимов¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт мониторинга климатических и экологических систем

Сибирского отделения Российской Академии наук, Томск, 634055, Россия,

² Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования Новгородский университет им. Ярослава Мудрого,

173003 Великий Новгород, Россия

E-mail: verozubova@mail.tomsknet.ru

$ZnGeP_2$, полупроводник с тетрагональной структурой типа халькопирита из группы $A^2B^4C^5_2$, имеет широкий диапазон прозрачности в средней ИК области (0.7-12 мкм), высокий нелинейно-оптический коэффициент (75 пм/В), двулучепреломление, достаточное для фазового согласования (0.04) и относительно высокую теплопроводность (0.35 В/см·К). Эти свойства делают материал чрезвычайно привлекательным для параметрической генерации света в области 3-8 мкм при накачке мощным лазерным излучением с длиной волны около ~ 2.06 мкм.

Вблизи края фундаментального поглощения во всех кристаллах $ZnGeP_2$ в состоянии “as-grown” наблюдается ослабление интенсивности света, связываемое с поглощением собственными точечными дефектами, обусловленными нестехиометрией расплава из-за высокой летучести двух компонентов, Zn и P. Точечные дефекты в $ZnGeP_2$ изучены относительно хорошо. Однако, структурные дефекты более высокой размерностью, потенциально способные влиять на ослабление света в $ZnGeP_2$, изучены весьма слабо и еще меньше исследовано их взаимодействие с точечными дефектами.

В представленной работе исследованы структурные дефекты, возникающие в кристаллах $ZnGeP_2$, выращенных из расплава методом Бриджмена в вертикальном варианте на затравки. Дефекты в монокристаллах “as-grown” изучались методами просвечивающей рентгеновской топографии на основе эффекта Бормана (метод РТБ), сканирующей электронной микроскопии, микроанализа (EDAX), кривых дифракционного отражения (КДО) и оптической прозрачности.

Уширение КДО выращенных монокристаллов составляет, как правило, 13-35 угловых секунд, что является показателем высокого структурного совершенства $ZnGeP_2$, и зависит от месторасположения образца в слитке. Методом РТБ выявлены дислокации различной природы, в среднем их плотность падает от начала слитков к концу от $2 \times 10^3 \text{ см}^{-2}$ до $2.5 \times 10^2 \text{ см}^{-2}$, микродефекты, полосы роста, вогнутые в сторону твердой фазы, а также включения вторых фаз. Найдено, что в номинально стехиометрическом монокристалле $ZnGeP_2$ в начале слитка формировались включения с составами, лежащими на разрезе $ZnGeP_2$ - GeP_2 , а в конце слитка включения - лежащие на разрезе $ZnGeP_2$ - ZnP_2 с размерами 1-3 мкм. Включения в начале слитков состава $ZnGeP_2$ - GeP_2 были обнаружены впервые. Плотность включений зависит от отклонений от стехиометрического состава расплава.

В состоянии “as-grown” кристаллы имеют, как правило, оптическое поглощение ~ 0.3 - 0.4 см^{-1} на длине волны 2.06 мкм для *o*-луча. После термического отжига поглощение можно уменьшить до 0.1 - 0.07 см^{-1} . Более сильное уменьшение поглощения достигается за счет облучения образцов $ZnGeP_2$ электронами с энергией более 4 MeV, до 0.02 - 0.04 см^{-1} .

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ СЦЕПЛЕНИЯ СЛОЕВ В КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ С МДО-ПРОКРЫТИЕМ

Вольхин А.М., Малышев В.Н.

Российский государственный университет нефти и газа имени И.М.Губкина, Москва, Россия, volkhinam@yandex.ru

Одним из способов повышения триботехнических свойств материалов для узлов трения является создание композиционных материалов, удачно сочетающих свои наилучшие качества. В РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина на основе метода микродугового оксидирования были созданы новые антифрикционные композиционные покрытия.

Данные покрытия отличаются от традиционных МДО-покрытий тем, что содержат дополнительный верхний защитный слой, в качестве которого использован сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ). Данный материал обладает наиболее подходящими свойствами для создания модифицированного дополнительного защитного слоя (высокой прочностью, стойкостью к удару и растрескиванию, износостойкостью, антифрикционностью, способностью сохранять свои свойства в широком интервале температур и т.д.). В результате проведенных исследований были получены композиционные покрытия «МДО + СВМПЭ», которые обладают высокими антифрикционными свойствами.

Величина прочности сцепления СВМПЭ с МДО-покрытием и механизм адгезионного взаимодействия этих слоев имеют важное значение для работы композиционного материала. Поэтому целью данной работы было определение прочности сцепления дополнительного слоя из СВМПЭ с МДО-покрытием.

Как известно, на величину адгезии существенно влияют степень шероховатости поверхности, наличие окисной пленки, наличие полярных групп в полимере, его молекулярный вес, величина поверхностного натяжения расплава полимера с подложкой.

Для изучения прочности сцепления была разработана специальная методика, реализация которой показала, что прочность сцепления СВМПЭ к МДО-покрытию может характеризоваться наличием как адгезионных, так и когезионных связей и их сочетанием. Обсуждается механизм сцепления полимерного слоя к МДО-покрытию, суть которого сводится к увеличению механической составляющей адгезионного взаимодействия за счет значительного увеличения площади контакта полимерного покрытия с поверхностью покрытия, в виду специфики формирования МДО-покрытий.

Кратерообразная пористая структура МДО-покрытия, при достаточной текучести полимера в расплавленном состоянии, обеспечивает высокую адгезию полимера к покрытию за счет заполнения им порового пространства и механического «анкерования» его в неровностях покрытия.

**СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ,
КОНТАКТИРУЮЩЕЙ С ТВЕРДОКСИДНЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ ПРИ 950°C**
**Воронова Л.М.^{1*}, Дегтярев М.В.¹, Чухарев В.Ф.², Чашухина Т.И.¹,
Красноперова Ю.Г.¹**

¹ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²РФЯЦ, г. Снежинск, Россия

*E-mail: highpress@imp.uran.ru

Исследовано изменение структуры и перераспределение легирующих элементов в аустенитной стали 10X23H18 после работы при 950°C в течение 8800 часов в контакте с La-Sr-Mn-O электролитом с целью установления причин деградации поверхностного слоя токового коллектора твердооксидного топливного элемента (ТОТЭ) при длительной эксплуатации.

Методом сканирующей электронной микроскопии и анализа спектров рассеяния энергии на приборе QUANTA-200 Philips с ускоряющим напряжением 30 кВ получили данные о морфологии, толщине и составе оксидных слоев и перераспределении легирующих элементов в стали. Методом электронной просвечивающей микроскопии на приборе JEM-200CX изучали тонкую структуру материала на расстоянии 0.5 мм от наружной поверхности.

После работы при 950°C в течение 8800 часов на поверхности стали образовалась плотная пленка оксида хрома Cr₂O₃ толщиной 10-15 мкм, на внешнем слое которой наблюдается повышенная концентрация Mn. Возможно, Mn осаждается из электролита или диффундирует из стали. Образовавшийся поверхностный слой MnCr₂O₄ имеет вид «щетки» и подобен защитному покрытию из Mn-Co-шпинели, который специально наносится на токовые элементы из ферритных сталей. Формирование шпинели является термодинамически предпочтительным, поскольку диффузия ионов марганца намного быстрее, чем ионов хрома в Cr₂O₃. Образование шпинели носит положительный характер, так как предотвращает испарение хрома и увеличивает электрическую проводимость слоя.

Под пленкой оксида хрома образовался рыхлый пористый слой толщиной 10 мкм, в котором на границах пор повышена концентрация Si и O, а глубже по сечению наблюдаются полунепрерывные пленочные выделения оксида кремния по границам зерен стали. Такие выделения распространяются на глубину до 50 мкм. Также по границам выделяются частицы оксида алюминия. В ферритных нержавеющей сталях образование непрерывного слоя оксидов Al и Si, вследствие его низкой электрической проводимости, ведет к нежелательному увеличению контактного сопротивления.

Перераспределение легирующих элементов стали в процессе работы в течение 8800 часов происходит на глубине до 200 мкм. Диффузия хрома, углерода и азота к поверхности приводит к образованию слоя с пониженным содержанием частиц (карбидов и карбонитридов).

Обнаружено немонотонное изменение коэффициента линейного термического расширения (КЛТР) стали в интервале температур от 450 до 850°C, связанное, вероятно, с растворением частиц вторых фаз и перераспределением легирующих элементов. При температуре 800°C значение КЛТР превышает $20 \cdot 10^{-6}$ 1/К, что может оказаться критическим при эксплуатации ТОТЭ.

Работа выполнена по теме «Структура» № г.р.01201064335 и при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ №13-03-00641-а. Электронно-микроскопическое исследование выполнено в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ РАВНОВЕСНЫХ КЛАСТЕРОВ В КРИСТАЛЛЕ НИОБАТА ЛИТИЯ

В. М. Воскресенский, О. Р. Стародуб, Н. В. Сидоров, М. Н. Палатников,
академик В. Т. Калинин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им.
И.В.Тананаева Кольского научного центра РАН, г.Апатиты

E-mail: ol_star@mail.ru

Работа поддержана грантом НШ-1937.2012.3

Ранее нами было выполнено моделирование тонких особенностей структуры при формировании в процессе роста сегнетоэлектрической фазы кристалла ниобата лития (LiNbO_3) энергетически равновесных кислородно-октаэдрических кластеров в зависимости от отношения Li/Nb [1,2]. При этом полученные результаты были сопоставлены с данными вакансионных сплит-моделей в рамках полуклассической атомистической модели. В данной работе выполнено моделирование структурных искажений кристаллической структуры при формировании в кристалле LiNbO_3 лития стехиометрического состава ($\text{Li/Nb}=1$), в процессе роста кристалла, энергетически равновесных дипольных кислородно-октаэдрических кластеров.

При выполнении условия электронейтральности в идеальной структуре количество ионов кислорода, использованных в системе для построения такого кластера равно количеству октаэдров. Однако, в зависимости от способа объединения кислородных октаэдров, количество употребленных ионов кислорода на каждый октаэдр может быть уменьшено. В качестве приближения была взята структура сетки в виде параллелограмма, что существенно упрощает расчеты из-за того, что параллелограммы, составленные из прямых и обратных треугольников зеркально симметричны. В результате была получена функция, описывающая зависимость количества кислородных октаэдров от количества кислородных слоев кластера структуры ниобата лития. Показано, что функция имеет минимум, что позволяет определить минимальный наиболее энергетически выгодный размер кластера в структуре.

1. V.M. Voskresenskiy, O.R. Starodub, N.V. Sidorov, M.N. Palatnikov, K. Bormanis. Modelling of Cluster Formation in Optically Nonlinear Lithium Niobate Crystal. Integrated Ferroelectrics, 2011, 123, 66-74.

2. В.М.Воскресенский, О.Р.Стародуб, Н.В.Сидоров, М.Н.Палатников, Б.Н. Маврин. Моделирование кластерообразования в нелинейнооптическом кристалле ниобата лития//Кристаллография. 2011. Т. 56. № 1. С. 26-32.

ОБ АНОМАЛИЯХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА, ПРОВОДИМОСТИ И ПОСЛЕДЕЙСТВИЯ В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА КРИСТАЛЛОВ ТИТАНАТА БАРИЯ

Н.М. Галиярова

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
Волгоград, Россия

В работе проведено сравнительное исследование спектров комплексной диэлектрической проницаемости ϵ^* , диэлектрического модуля β^* и электропроводности σ^* двух кристаллических образцов титаната бария (ТБ). Первый образец в исходном состоянии был полидоменным, второй – монодоменным с более высокой проводимостью. Спектры действительной и мнимой составляющих ϵ^* обоих образцов были измерены в диапазоне частот $10^{-1} - 10^4$ Гц слабого измерительного поля при нагревании от комнатной температуры до 150°C . В полярной фазе выявлено различие типов дисперсии ϵ^* (Рис. 1) и σ^* в указанных образцах. Изучены закономерности эволюции диэлектрических спектров в диапазонах высоких, низких и инфранизких частот (ВЧ, НЧ и ИНЧ). В спектрах проводящего образца обнаружена смена прыжковой проводимости на сквозную и ряд аномалий в области фазового перехода в неполярную фазу. В частности, обнаружены скачки электропроводности и критическое замедление частоты ретардации в области фазового перехода.

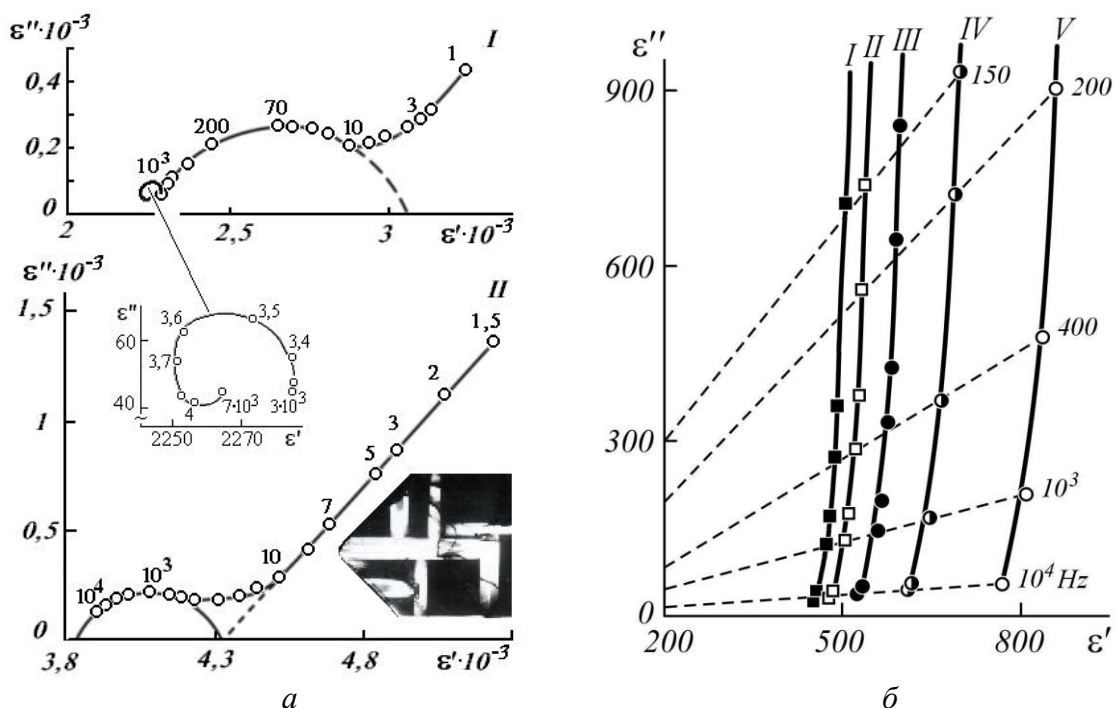


Рис. 1. Эволюция спектров комплексной диэлектрической проницаемости ϵ^* :
a - диэлектрический образец при $123,5^\circ\text{C}$: *I* – до отжига при нагревании; *II* – после отжига при охлаждении. На врезках: резонансная область дисперсии ϵ^* в увеличенном масштабе и фрагмент микрофотографии образца; *b* – проводящий образец при нагревании: *I* – $36,44$; *II* – $52,11$; *III* – 73 ; *IV* – $83,54$; *V* – $94,22^\circ\text{C}$. Цифры – частоты измерительного поля в Гц.

Интерпретация дана в рамках теории [1, 2].

1. Межзонная модель сегнетоэлектрика. ЛГПИ. Л. (1983).
2. Э.В. Бурсиан. Нелинейный кристалл (титанат бария). Наука, М. (1974).

ПРОСТЕЙШАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ТИПОВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА, ПРОВОДИМОСТИ И ШУМОВ И ЕЕ ФРАКТАЛЬНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ

Н.М. Галиярова

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
Волгоград, Россия

На основе модификации уравнений Ланжевена дробно-дифференциальными выражениями выполнен анализ процессов, отвечающих за спектральные закономерности диэлектрического отклика, шумов и проводимости, а также проявления в них фрактальных свойств. Тип шума, динамику процесса, спектральные свойства и диапазоны наблюдения определяют доминирующие в уравнениях силы.

Как известно, белый шум создается независимыми случайными марковскими (не зависящими от предыстории) процессами, когда доминантной является диссипативная сила – линейное вязкое трение. Остальные шумы зависят от предыстории, они порождаются немарковскими процессами в условиях действия сил, сохраняющих память. В частности, в работе обращается внимание на тот факт, что память о предыстории коричневого шума создает сила инерции, черного шума – сила самодействия, фликкер-шума – упругая сила.

Память о предыстории фрактальных шумов сохраняется частично.

Дробно-дифференциальные уравнения Ланжевена дают полную картину их эволюции, выявляя наиболее общие причины спектрального отклика. Статистическая природа процессов обуславливает глобальную универсальность шумов в различных системах.

Существенно, что существует согласованность различных подходов (теории локализации, представлений об иерархической структуре дипольного стекла, фрактальной динамики и статистики случайных процессов), которые с разных сторон раскрывают физические механизмы процессов, протекающих в сложной системе.

Приводятся результаты экспериментов, иллюстрирующие эволюцию диэлектрических спектров и смену типов шумов. В частности, это наблюдения перехода к почти идеальному фликкер шуму, возникающему в фазе дипольного стекла в кристаллах дигидрофосфата цезия и в кристаллитах сегнетокерамики на основе титаната-цирконата свинца в области морфотропной фазовой границы.

Предложено модельное уравнение процесса, приводящего к фликкер-шуму и характерной для неэргодической фазы дипольного стекла платообразной дисперсии ϵ^* . Экспериментально продемонстрирована эволюция платообразной дисперсии ϵ^* при размораживании неэргодической фазы дипольного стекла, сопровождаемая сменой фликкер-шума фрактальными шумами.

Выявлено критическое изменение параметра неэргодичности в области замораживания. Высказано предположение, что процессы поляризации и проводимости протекают согласованно, порождая единый кооперативный иерархический процесс, фрактальную самоорганизацию системы и соответствующие шумы.

О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ФРЕТТИНГА В ЗАПОРНОЙ АРМАТУРЕ

Гантимиров Б.М., Елагина О.Ю.

РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина, г. Москва, Россия, elaguina@mail.ru

Основной функцией запорной арматуры является управление газовыми потоками путем изменения площади проходного сечения, в частности, для перекрытия потока рабочей среды с определенной герметичностью. В зависимости от места расположения и условий работы запорная арматура может эксплуатироваться в двух положениях: «открыто – закрыто» и при перестановке затвора. Так запорная арматура, расположенная на перемычках или байпасных линиях постоянно находятся в закрытом положении, а на линейных участках газопровода в положении «открыто». Периодичность срабатывания запорного узла в таких условиях не превышает 1-2 раз в год. Аналогичным образом работает запорная арматура свечных обвязок, которая срабатывает при опорожнении газопровода перед проведением ремонтных работ. Вместе с тем за счет пульсации перекачиваемой среды возникает вибрация элементов газотранспортной системы и имеют место микросмещения контактирующих деталей запорной арматуры.

Наличие микросмещений в зоне контакта уплотнительных поверхностей запорной арматуры в течение длительного времени приводит к развитию фреттинга или фреттинг-коррозии. Эти виды изнашивания являются причиной повреждений контактирующих поверхностей и заклинивания запорного узла при его перестановке после длительного периода эксплуатации.

В работе представлены результаты экспериментального исследования изнашивания при фреттинге для различного сочетания материалов, полученные по методике ГОСТ 23.211-80 и отмечены сложности применения данной методики.

Анализ данных, полученных при проведении испытаний на фреттинг, показывает, что применение разнородных сталь-фторопластовых и сталь-полиуретановых пар характеризуется весьма низким, а в некоторых случаях и практически полным отсутствием развития процессов фреттинг-изнашивания. Однако, определение линейного износа по разнице положения средней линии профиля, как это рекомендуется в данном стандарте, не всегда возможно. Особенно это касается металл-полимерных пар трения, когда имеет место перенос пленок полимера на металлическое контртело.

ЭФФЕКТ СТАБИЛИЗАЦИИ РАЗМЕРОВ НАНОКРИСТАЛЛОВ

В АМОРФНО-НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

Глезер А.М., Пермякова И.Е., Шурыгина Н.А.

ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина»,

Институт металловедения и физики металлов, Москва, Россия, inga_perm@mail.ru

В настоящее время контролируемая кристаллизация аморфных сплавов (АС) является одним из перспективных способов получения нанокристаллических структур. Важной задачей является детальное изучение особенностей структурных состояний сплавов, закаленных из расплава, и претерпевающих эволюцию в процессе отжига.

Для сплавов $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$, обнаружен эффект стабилизации размеров нанокристаллической γ -фазы ($D = 20$ нм) в широком интервале параметров термической обработки, аналогичный тому, что наблюдается в сплавах типа «Finemet» ($Fe_{73,5}Si_{13,5}B_9Nb_3Cu_1$). Найденный эффект находит свое объяснение в рамках структурной модели «Crystallization & Stop», предложенной в работе [1]. В соответствии с ней торможение нанокристаллов, растущих в аморфной матрице, возможно при выполнении трех следующих условий: 1) наличие в АС хотя бы одного активного легирующего элемента, который повышает температуру кристаллизации аморфной матрицы; 2) необходимость, чтобы активный легирующий элемент плохо растворялся в решетке образующихся нанокристаллов; 3) в аморфной матрице должны существовать условия для зарождения большого количества нанокристаллов.

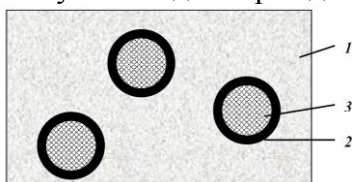


Рис. 1 Схема, демонстрирующая торможение роста наночастиц:

1 – аморфная матрица,

2 – слой аморфной фазы, обогащенный бором,

3 – нанокристалл.

Нам представляется, что именно такая же ситуация складывается в сплавах $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$, где роль компонента, плохо растворяющегося в кристаллической решетке растущих наночастиц, играет бор. Более того, повышенная концентрация атомов бора в областях, граничащих с растущими нанокристаллами, повышает стабильность аморфной матрицы Fe-Ni-B и создавая тем самым барьерный эффект (рис. 1).

Таким образом, образование в процессе кристаллизации при отжиге в аморфной матрице очень высокой объемной плотности нанокристаллов, которые в дальнейшем практически не увеличивают своих размеров, не является характерным признаком сплава «Finemet» и присущ значительному числу аморфных сплавов. Ранее этот эффект был зафиксирован и для сплава $Ni_{44}Fe_{29}Co_{15}B_{10}Si_2$ [2].

Кроме того, установлено, что при испытаниях на изгиб (U-метод) критерий пластичности ε в сплаве $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$ претерпевает существенные изменения, падая до 20 %, лишь при температуре вязко-хрупкого перехода совпадающей с температурой начала первичной кристаллизации. Данный факт близкого совпадения этих температур соответствует редкому для АС явлению, при котором они не переходят в хрупкое состояние вплоть до протекания ранних стадий кристаллизации.

1. Chin T.-S., Lin C.Y., Lee M.C., Huang R.T., Huang S.M. Bulk nanocrystalline alloys // Materials Today. 2009. V. 12. № 1-2. P. 34-39.

2. Глезер А.М., Манаенков С.Е., Пермякова И.Е., Шурыгина Н.А. Влияние нанокристаллизации на механическое поведение аморфных сплавов на основе Fe-Ni // Деформация и разрушение материалов. 2010. № 8. С. 1-10.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант мол_а № 12-02-31600)

ВЫРАЩИВАНИЕ НОВЫХ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ SrI₂, ЛЕГИРОВАННЫХ ДВУХ- И ТРЕХВАЛЕНТНЫМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ, И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ.

Голошумова А.А., Исаенко Л.И., Пашков В.М., Елисеев А.П.,

Огородников И.Н., Пустоваров В.А.

*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия
alingol-nsk@yandex.ru*

В настоящее время сцинтилляционные кристаллы имеют множество применений. В связи с этим не прекращаются попытки получить качественный материал для высокоэффективной регистрации ионизирующего излучения. SrI₂:Eu обладает прекрасными сцинтилляционными характеристиками: высоким световыходом (>120 000 ф/МэВ) и превосходным энергетическим разрешением (2.6%) [1, 2]. Однако при этом время затухания составляет 1200 нс, что характерно именно для ионов Eu²⁺ [3, 4]. Поэтому одной из задач в работе с данным материалом является получение более короткого времени затухания при сохранении прочих параметров. Как правило, наименьшие величины свойственны матрицам, легированным трехвалентными ионами редких земель, например церием. Последний позволяет значительно сократить время затухания для SrI₂ (32 нс), но при этом значительно ухудшаются световыход и энергетическое разрешение [1, 2].

В настоящей работе описаны методики получения кристаллов иодида стронция, легированных ионами Eu²⁺, Nd³⁺ и Pr³⁺. Для получения чистых иодидов применялся метод мокрого синтеза с последующим плавлением в динамическом вакууме и направленной кристаллизацией. Методом Бриджмена были выращены кристаллы SrI₂:Eu, SrI₂:Nd и SrI₂:Pr с чистой частью, достигающей размеров 15x20 мм.

Для кристаллов SrI₂:Eu была определена структура и установлено положение в ней ионов Eu²⁺, а также впервые получены оптические спектры пропускания. Для всех выращенных кристаллов были получены спектры фотолюминесценции. Было установлено, что ионы неодима и празеодима входят в матрицу SrI₂ в состоянии (3+), при этом наличие компенсатора заряда (Na⁺) позволяет значительно увеличить степень вхождения. Исследования кинетики затухания показали, что введение трехвалентного редкоземельного иона действительно позволяет значительно сократить время затухания (до 20 нс). Благодаря этому область применения кристаллов SrI₂:REE может быть расширена при условии сохранения основных сцинтилляционных характеристик.

1. C. M. Wilson et al//Proc. of SPIE 7079 (2008) 707917.
2. N. Cherepy et al//Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1164 (2009) 1164-L11-04.
3. Кашин Д.В., Пустоваров В.А., Выпринцев Д.И., Голошумова А.А., Исаенко Л.И.//МСНТ «Проблемы спектроскопии и спектрометрии» вып.26, стр 166-177 (43), 2010
4. V.A. Pustovarov, I.N. Ogorodnikov, A.A. Goloshumova, L.I. Isaenko, A.P. Yelissejev//Optical Materials 34 (2012) 926–930.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $ZnGeP_2$ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ОПТИКИ

Грибенюков А.И.¹, Филиппов М.М.², Гинсар В.Е.¹, Трофимов А.Ю.¹

¹*Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск,
пр. Академический 10/3, loc@imces.ru*

²*Томский политехнический университет, г. Томск, пр. Ленина 30, nauka@tpu.ru*

В работе представлены результаты исследований монокристаллов $ZnGeP_2$ до $\varnothing 50$ мм полученных направленной кристаллизацией из расплава предварительно синтезированного соединения.

Показано, что контролируемая вынужденная конвекция расплава $ZnGeP_2$ позволяет разрушить условия формирования включений в центральной части кристалла, особенно на начальном этапе роста, и подавить образование преципитатов в центральной части кристалла. Применение вынужденной конвекции, создаваемой за счет радиального градиента температуры ($0,2$ °C/см) способствует отеснению сверхстехиометрических компонент в периферийные области, кристаллизующиеся в последнюю очередь, при этом большая часть полученного кристалла имеет высокое структурное совершенство и оптическое качество, позволяющее их использование для решения прикладных задач нелинейной оптики.

В области численного моделирования процессов выращивания кристаллов $ZnGeP_2$ завершен и апробирован пакет программного обеспечения для реализации методики стабилизации осевой скорости роста кристалла, основанной на непрерывной коррекции температурного поля в рабочем объеме установки с использованием для оценок скорости роста кристалла пакета калибровочных математических моделей, учитывающих текущее положение ростового контейнера.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕЛЬСОВОЙ СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ УСТАЛОСТИ

**Гришунин В.А., Коновалов С.В., Воробьев С.В., Иванов Ю.Ф.*,
Комиссарова И.А., Целлермаер В.Я., Громов В.Е.**

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

E-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

**Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск,
Россия*

E-mail: yufi55@mail.ru

Целью работы является исследование структурно-фазовых состояний в рельсовой стали Э76Ф, подвергнутой электронно-пучковой обработке, приводящей к увеличению усталостной долговечности. Обработку поверхности стали осуществляли электронным пучком субмиллисекундной длительности в следующем режиме: энергия электронов $E = 18$ кэВ; длительность импульса воздействия пучка $\tau = 50$ мкс; количество импульсов $N = 3$; частота следования импульсов $f = 0,3$ с⁻¹; плотность энергии пучка $E_S = 10-25$ Дж/см².

Предварительная термическая обработка стали привела к формированию поликристаллической структуры, представленной преимущественно зернами перлита пластинчатой морфологии. В стали присутствуют зерна феррита, свободные от включений карбидной фазы, и зерна феррита, в объеме и вдоль границ которых располагаются частицы цементита глобулярной формы. В ферритных прослойках перлита наблюдается дислокационная субструктура в виде хаотически распределенных дислокаций ($\rho \sim 2,8 \cdot 10^{10}$ см⁻²). Зерна феррита и «псевдоперлита» содержат дислокационную субструктуру в виде сеток и хаотически расположенных дислокаций ($\rho \sim 4 \cdot 10^{10}$ см⁻²).

ЭПО стали сопровождается формированием на поверхности облучения микрократеров, количество которых на единицу площади поверхности снижается с ростом плотности энергии пучка электронов от 10 Дж/см² до 20 Дж/см². Плавление стали (толщина расплавленного слоя при $E_S = 10$ Дж/см² составляет единицы микрометра, при $E_S = 20$ Дж/см² достигает ~ 12 мкм) и последующая высокоскоростная кристаллизация привели к формированию в приповерхностном слое разномасштабной структуры. В объеме зерен наблюдается субзеренная структура – ячеистой кристаллизации. С ростом плотности энергии пучка электронов средний размер ячеек увеличивается от 330 нм при 10 Дж/см² до 387,5 нм при 20 Дж/см². Охлаждение стали привело к закалке поверхностного слоя. В объеме ячеек кристаллизации формируется мартенситная структура преимущественно пакетной морфологии. По границам и в стыках границ ячеек кристаллизации выявляются частицы округлой формы. Методами СЭМ и ПЭМ установлено, что данные частицы являются графитом. Размеры частиц графита изменяются от 70 до 145 нм. При обработке рельсовой стали электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 10 Дж/см² в поверхностном слое формируется неоднородная структура. Наряду со структурой ячеистой кристаллизации, содержащей наноразмерные кристаллы мартенсита, в поверхностном слое выявляются зерна со структурой пакетного мартенсита, поперечные размеры кристаллитов которых изменяются от 85 до 220 нм.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 гг.» (Соглашение №14.В37.11.0071).

ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ SnS

Гусейнов Дж.И.¹, Годжаев Э.М.²

¹АГПУ, Азербайджан, г. Баку, *cih_58@mail.ru*

²АТУ, Азербайджан, г. Баку, *geldar-04@mail.ru*

В настоящей работе излагаются результаты расчета энергетического спектра и оптических функций соединения SnS . Для расчетов был использован метод псевдопотенциала. При расчете зонной структуры данного соединения экранирование ионного заряда, а также обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках диэлектрического формализма по модели Хаббарда-Шема с некоторым выборочным распределением заряда вокруг каждого иона. Использовано около 2500 плоских волн в разложении волновой функции. При этом максимальная кинетическая энергия учитываемых плоских волн составляла $20 R_y$.

Как видно из рис. 1 валентная зона SnS состоит из трех групп зон. Характерное по парное расположение валентных зон является следствием слоистости кристалла. Анализ волновых функций валентных состояний показывает, что самая нижняя группа, отдаленная от основной группы валентной зоны широким энергетическим зазором около 6 eV, происходит из s - состояний аниона. Следующая группа, состоящая из четырех зон и расположенная около -7 eV, связана с s - состояниями Sn. Самая верхняя группа из двенадцати зон, расположенная в области от 0 до -5 eV, обязана своим происхождением p - состояниям катиона и аниона. Анализ происхождения валентных состояний хорошо согласуется с данными фотоэлектронной эмиссии. Ширина запрещенной зоны, вычисленная по зонной структуре хорошо согласуется с экспериментально определенным ее значениям.

Известно, что экспериментально оптические свойства SnS изучены недостаточно. В связи с этим необходимо теоретическое исследование некоторых оптических свойств данного соединения. С этой целью нами были проведены расчеты мнимой и реальной частей комплексной диэлектрической проницаемости, при поляризациях параллельной и перпендикулярной оптической оси.

А также вычислены спектральные зависимости показателя преломления, коэффициента отражения, реальной $\sigma_r(\epsilon)$ и мнимой части $\sigma_i(\epsilon)$ оптической электропроводности, характеристической функции потерь энергии электронов и эффективной плотности состояний $g_{эфф}$ для соединения SnS при поляризациях $\mathbf{E}||\mathbf{c}$ и $\mathbf{E}\perp\mathbf{c}$. При поляризации $\mathbf{E}||\mathbf{c}$ $g_{эфф}$ в интервале 5,82- 6,83 эВ слабо увеличивается, наблюдаются размытые максимумы при энергиях 3,28 и 5,36эВ и минимум при 5,82эВ. На кривой зависимости $g_{эфф}$ от энергии при $\mathbf{E}\perp\mathbf{c}$ поляризации наблюдается плечо в интервале 3 – 3,4 эВ, максимум при энергии 4,67 эВ и минимум при 5,95 эВ, сильный рост в интервале 6 – 6,5 эВ и слабое уменьшение $g_{эфф}$.

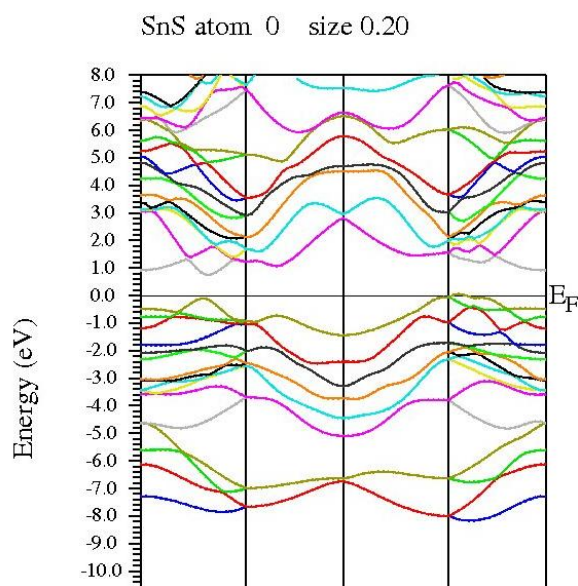


Рис. 1. Зонная структура соединения SnS

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ Dy_2SnSe_4

Гусейнов Дж.И.¹, Мургузов М.И.¹, Годжаев Э.М.²

¹АГПУ, Азербайджан, г. Баку, *cih_58@mail.ru*

²АТУ, Азербайджан, г. Баку, *geldar-04@mail.ru*

Комплексными методами физико-химического анализа: дифференциально-термического (ДТА), рентгенофазового (РФА), микроструктурного (МСА) анализов, а также измерением микротвердости и плотности изучен характер взаимодействия в системе $SnSe-Dy_2Se_3$ и построена диаграмма состояния. Изучены температурная зависимость электропроводности и термо-э.д.с. сплавов системы. Установлено, что при введении Dy_2Se_3 в состав $SnSe$ образуются твердые растворы и изменяются некоторые физико-химические свойства.

РФА проводили на рентгеновском приборе модели D-2 PHSER с использованием CuK_α -излучение Ni-фильтр. На основании экспериментально вычисленных межплоскостных расстояний и интенсивностей линий идентифицированы исходные соединения и полученные новые фазы. Дифракционные максимумы и межплоскостные расстояния новых фаз отличаются от таковых для исходных соединений. Результаты РФА подтвердили, что при взаимодействии $SnSe$ и Dy_2Se_3 в соотношении 1:1 образуется химическое соединения состава Dy_2SnSe_4 .

Индексированием рентгенограмм порошков установлено, что это соединение кристаллизуется в гексагональной сингонии с параметрами решетки: $a=12,88$; $c=14,38$ Å, $c/a=1,1164$; $Z=11$, $V=2066$ Å³, плотность $\rho_{\text{пик.}}=6,55$ г/см³, $\rho_{\text{рент.}}=6,71$ г/см³. Установлено, что твердые растворы на основе $SnSe$ при комнатной температуре достигают до 3 мол. % Dy_2Se_3 . С увеличением содержания диспрозия в составе параметры решетки увеличиваются, при этом объем ячейки растет, а количество молекул, приходящихся на ячейку, остается неизменным. Нами был исследован рельеф поверхности монокристалла $SnSe$ методом сканирующих зондовых микроскопов в атомно-силовом режиме.

Совокупность результатов ДТА, МСА, РФА, значений микротвердости и плотности позволили построить диаграмму состояния системы $SnSe-Dy_2Se_3$. Установлено, что система - квазибинарная, эвтектического типа с образованием инконгруэнтно плавящегося соединения $DySnSe_2$ при 920°C. Оно с α - твердыми растворами на основе $SnSe$ образует эвтектику, содержащую 10 мол. % $DySe$ и плавится при 780°C.

Для соединения Dy_2SnSe_4 изучены температурные зависимости удельной электропроводности, коэффициентов Холла, термо-э.д.с. и теплопроводность в температурном интервале 80-900 К. Электропроводность Dy_2SnSe_4 увеличивается с ростом температур до 480 К. А в узкой области температур (480-550 К) наоборот, происходит уменьшение и приобретает металлический ход проводимости. С увеличением температуры от 550 К до 770 К, электропроводность вновь возрастает. С ростом температуры дальнейшее увеличение электропроводности связано с тем, что по видимому в это время происходит процесс термоэлектронной эмиссии и концентрация носителей тока увеличивается и растет электропроводность. Коэффициент термо-э.д.с. от комнатной до температуры перехода собственной проводимости увеличивается, затем уменьшается от 220 до 80 мкВ/К.

Эти изменения термо-э.д.с. и электропроводности характерны для примесных полупроводников со сложной зонной структурой

ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ NaCl(Ni) И NaCl(Ca) В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ И В СХЕМЕ ЭПР РАДИОДИАПАЗОНА

Даринская Е.В., Альшиц В.И., Колдаева М.В., Петржик Е.А., Шведченко Д.О.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия
darin@ns.crys.ras.ru

Обнаружено резонансное увеличение пробегов краевых дислокаций в кристаллах NaCl под воздействием скрещенных магнитных полей в схеме ЭПР – постоянного магнитного поля Земли $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$ (~50 мкТл) и поля накачки $\tilde{\mathbf{V}}$ (~1 мкТл), создаваемого проводником с током частоты $\nu \sim 1$ МГц. Исследуемые два типа кристаллов (NaCl(Ca) и NaCl(Ni)) содержали примесь Ca с одинаковой концентрацией, не превышающей 10 ppm. При этом второй тип дополнительно содержал малую добавку примеси Ni в концентрации 0.06 ppm. Установлено, что амплитуда резонанса в этих двух типах кристаллов по-разному зависит от параметров эксперимента. Проведён сравнительный анализ полученных данных с результатами предыдущих экспериментов в постоянных магнитных полях ~1 Тл на этих же кристаллах.

В NaCl(Ca) и NaCl(Ni) наблюдались острые пики дислокационных пробегов с максимумом на одной и той же частоте $\nu = 1.38$ МГц в условиях, когда линии дислокаций \mathbf{L} были ортогональны как $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$, так и $\tilde{\mathbf{V}}$. Частота резонанса отвечала классическому условию ЭПР при $g = 2$. Эксперименты проводились в двух геометриях: поле накачки $\tilde{\mathbf{V}}$ ориентировалось либо ортогонально, либо параллельно $\mathbf{V}_{\text{Earth}}$. При смене ориентации поля накачки относительно поля Земли от ортогонального к параллельному амплитуда резонансного пика по-разному изменялась в зависимости от типа образцов: для NaCl(Ni) она резко уменьшалась, опускаясь почти до уровня фона, а для NaCl(Ca) уменьшение составляло ~20% процентов.

Установлено, что высота резонансного пика для обоих типов кристаллов линейно зависит от квадрата магнитного поля накачки \tilde{B}^2 , а коэффициент пропорциональности для кристаллов NaCl(Ca) в 1.75 раз больше, чем для NaCl(Ni). В постоянных магнитных полях средний пробег дислокаций тоже линейно нарастал $\propto \tilde{B}^2$, однако коэффициент наклона для кристаллов NaCl(Ni) был, наоборот, в два раза больше.

Для обоих типов кристаллов обнаружена пороговая амплитуда поля накачки \tilde{B} , ниже которой в условиях резонанса движение дислокаций не наблюдается. Оказалось, что значение этого порога для кристаллов NaCl(Ni) примерно в два раза меньше, чем для NaCl(Ca). В экспериментах в постоянных магнитных полях уровень порога совпадал для обоих типов кристаллов.

Причины различий магнитопластичности, обнаруженных в кристаллах NaCl(Ni) и NaCl(Ca) при магнитной обработке в постоянном магнитном поле и в условиях ЭПР пока объясняются на гипотетическом уровне. Их окончательное выяснение потребует новых исследований.

Работа частично поддержана Президиумом РАН (Программа № 24) и РФФИ (грант №13-02-00341).

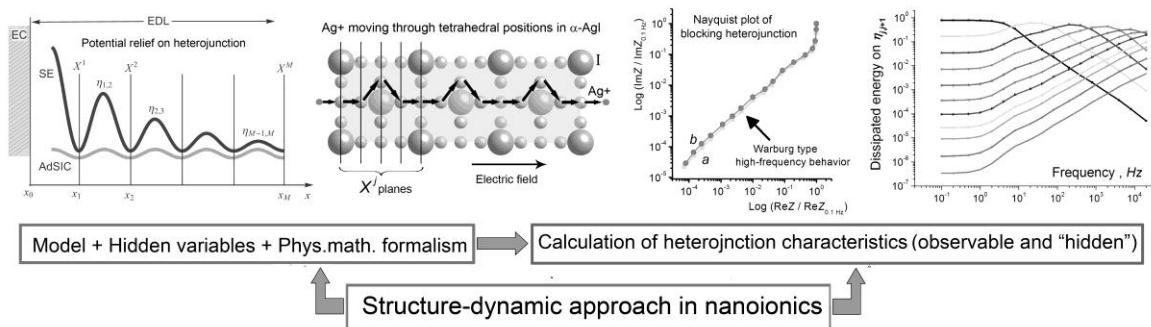
СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД В НАНОИОНИКЕ И ПРИБОРЫ С БЫСТРЫМ ИОННЫМ ТРАНСПОРТОМ В НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ И МИКРОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКЕ.

Деспотули А.Л., Андреева А.В.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых веществ, Российской академии наук, г Черноголовка, Россия

despot@iptm-hpm.ac.ru

В наноионике для детального описания ион-транспортных процессов в нерегулярном потенциальном рельефе (прямая задача) и интерпретации ион-транспортных свойств и характеристик наносистем (обратная задача) выдвинут новый структурно-динамический подход [1-2]. На его основе выполнено численное моделирование процессов в области идеально поляризуемых гетеропереходов твердый электролит/электронный проводник (ТЭ/ЭП). Подход включает: (i) - структурно-динамическую модель, которая связывает скорость релаксации двойного электрического слоя с движением ионов в кристаллическом потенциальном рельефе, искаженном на ТЭ/ЭП; (ii) выбор «скрытых» переменных состояния, позволяющий описывать процессы и решать обратные задачи в терминах концентраций подвижных ионов на кристаллографических плоскостях ТЭ в области пространственного заряда; (iii) физико-математический формализм, который оперирует «скрытыми» переменными, базируясь на принципе детального равновесия и кинетическом уравнении в форме закона сохранения частиц. Результаты моделирования частотно-временного поведения емкости и импеданса ТЭ/ЭП в терминах «скрытых» переменных сопоставлены с известными экспериментальными данными. Предложенный подход может найти применение при разработке новых типов приборов, например, суперконденсаторов микронных размеров со структурно-упорядоченными гетеропереходами на основе передовых суперионных проводников, необходимых для развития глубоко суб-вольтовой наноэлектроники и микросистемной техники.



1. Деспотули А.Л., Андреева А.В. Модель, метод и формализм для описания ионного транспорта на блокирующих гетеропереходах твердый электролит/электронный проводник // Нано и микросистемная техника, 9 (2012) 16 -21.
2. Деспотули А.Л., Андреева А.В. Компьютерное моделирование на субнанометровом масштабе ион-транспортных характеристик блокирующих гетеропереходов электронный проводник/твердый электролит // Нано и микросистемная техника, 11 (2012) 15-23.

НОВЫЙ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЙ МОНОКРИСТАЛЛ $Zn_{(x)}Mg_{(1-x)}WO_4$, ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА

Дубовик А.М.¹, Баумер В.Н.², Зеня И.М.¹, Литический В.А.¹,
Спасский Д.А.³, Тупицына И.А.¹, Якубовская А.Г.¹

¹Институт сцинтилляционных материалов НАНУ, 61001, Харьков, пр. Ленина 60

²Институт монокристаллов НАНУ, 61001, Харьков, пр. Ленина 60

³Институт физики Тартуского университета, 51014, Тарту, Эстония;
Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета, Россия

Оксидные монокристаллы вольфраматов находят своё применение в качестве сцинтилляционных детекторов для регистрации ионизирующего излучения, томографии и интроскопии. В последнее время идёт активный поиск новых материалов с улучшенными сцинтилляционными характеристиками. В ряде работ показано, что у монокристаллов твёрдых растворов замещения сложных оксидов наблюдается заметное увеличение световыхода [1,2,3].

В работе сообщается о впервые выращенных монокристаллах цинк-магниевого вольфрамата, исследовании их структурных, оптических и сцинтилляционных параметров. Монокристаллы твёрдых растворов выращивали методом Чохральского на воздухе. Синтез шихты проводили методом высокотемпературного спекания оксидов, взятых в заданном соотношении. Чистота исходных оксидов составляла $\geq 99,995$ % масс.

По результатам РФА и РСА монокристаллы имеют моноклинную сингонию со структурой вольфрамита. Полученные образцы прозрачны в области собственной люминесценции, максимум спектра рентгенлюминесценции находится на длине волны ~ 480 нм. Время высвечивания монокристаллов $Zn_{(x)}Mg_{(1-x)}WO_4$ изменяется от 27 мкс до 33 мкс при уменьшении x от 0,9 до 0,5. Величина светового выхода сцинтиллятора $Zn_{0,5}Mg_{0,5}WO_4$ превышает на 45 % световыход монокристалла вольфрамата цинка (рис.1).

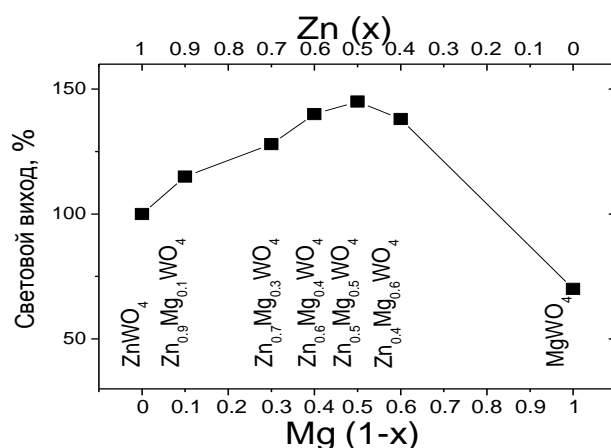


Рис. 1

Полученные результаты показывают перспективность применения монокристаллов твёрдых растворов $Zn_{(x)}Mg_{(1-x)}WO_4$ в сцинтилляционной технике.

1. Belsky et al., IEEE TNS 48 (2001) 1095.
2. H Kraus. et al., Nuclear Physics B 173 (2007) 168–171.
3. O. Sidletskiy, et al., Materials Research Bulletin, 47 (2012) 3249-3252.

Выращивание и спектрально-люминесцентные свойства монокристаллов $\text{SrMoO}_4:\text{Pr}^{3+}$

Е.Э. Дунаева, Л.И. Ивлева, И.С. Воронина, П.Г. Зверев, М.Е. Дорошенко, А.В. Нехороших

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики
им. А.М. Прохорова Российской академии наук, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38,
edynaeva@rambler.ru*

В настоящее время актуальной задачей является создание полностью твердотельных источников лазерного излучения, работающих в различных спектральных диапазонах на фиксированных длинах волн. Одним из путей решения этой задачи является преобразование излучения известных лазерных ионов с использованием эффекта вынужденного комбинационного рассеяния света (ВКР). Показано [1], что эффективными ВКР-преобразователями излучения являются кристаллы шеелитов, в частности, SrMoO_4 , который обладает высокими нелинейно-оптическими свойствами, большим коэффициентом ВКР усиления и ВКР-активной модой с частотой 888 см^{-1} . Матрица шеелитов позволяет введение редкоземельных ионов в концентрациях, достаточных для лазерной генерации. Ранее была получена лазерная генерация и ВКР-преобразование излучения в кристаллах шеелитов, легированных неодимом [2, 3]. Введение ионов Pr^{3+} в кристалл SrMoO_4 позволит создать лазер, работающий на новых длинах волн в видимом и среднем инфракрасном диапазоне.

В настоящей работе монокристаллы молибдата стронция, легированные ионами празеодима, были выращены методом Чохральского из расплава стехиометрического состава, празеодим добавлялся в расплав в виде стехиометрической смеси $\text{Pr}_2\text{O}_3+\text{Nb}_2\text{O}_5$. Согласно данным рентгеноспектрального микроанализа, коэффициент распределения Pr^{3+} в матрице молибдата стронция составляет 0.9.

Показано, что разработанная технология позволяет воспроизводимо получать кристаллы $\text{SrMoO}_4:\text{Pr}^{3+}$ хорошего оптического качества. Методами поляризационно-оптической микроскопии и динамической голографии было показано, что кристаллы являются оптически однородными и не содержат ростовых полос, "центрального дефекта" и рассеивающих центров. Исследования коноскопических картин на продольных срезах кристаллов (в направлении оптической оси) свидетельствуют об отсутствии термических напряжений, вызывающих аномальную двуосность. Максимальная величина аномального двупреломления для выращенных кристаллов не превышает $4 \times 10^{-5}\text{ см}^{-1}$.

Спектры поглощения $\text{SrMoO}_4:\text{Pr}^{3+}$, измеренные при 77К и при комнатной температуре, выявляют пики поглощения на 449, 474 и 487 нм, соответствующие энергетическим переходам $^3\text{H}_4 - ^3\text{P}_0$, $^3\text{P}_1$, $^1\text{I}_6$, 1527 и 1546 нм ($^3\text{H}_4 - ^3\text{F}_4$, $^3\text{F}_3$), 1930 нм ($^3\text{H}_4 - ^3\text{F}_2$). При накачке лазерным диодом на длине волны 450 нм был получен спектр люминесценции с максимумом 650 нм, время жизни люминесценции составило 1.5 мкс. Данный материал перспективен для получения лазерной генерации при накачке короткими импульсами.

Данная работа была выполнена при поддержке РФФИ (проект №12-02-31658)

1. Зверев П.Г., Басиев Т.Т., Соболев А.А., Скорняков В.В., Ивлева Л.И., Полозков Н.М., Осико В.В. «Вынужденное комбинационное рассеяние в кристаллах щелочноземельных вольфраматов», Квантовая электроника, 30, №1 стр. 55-59 (2000).
2. Ivleva L. I., Basiev T. T., Voronina I. S., Zverev P. G., Osiko V. V., Polozkov N. M. "SrWO₄:Nd³⁺ – new material for multifunctional lasers", Optical Materials, v.23, p.439-442 (2003).
3. Basiev T.T., Doroshenko M.E., Ivleva L.I., Voronina I.S., Konyushkin V.A., Osiko V.V., Vasiliev S.V. "Demonstration of high self-Raman laser performance of a diode-pumped SrMoO₄:Nd³⁺ crystal", Optics Letters, Washington, p. 1102 – 1104 (2009).

ИМПЛАНТАЦИЯ ПРОТОНОВ В УПРУГО ИЗОГНУТЫЕ КРИСТАЛЛЫ КРЕМНИЯ

Дьячкова И.Г., Новоселова Е.Г., Ополченцев А.М., Смирнов И.С.

Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики",
Москва, Россия, ismirnov@hse.ru

Известно, что образующиеся в процессе ионной имплантации дефекты формируют вблизи поверхности кристалла нарушенный слой с увеличенным параметром кристаллической решетки, что приводит к появлению напряжений и макроизгибу пластин кремния. На практике это означает, что основная доза ионов имплантируется в кристалл с напряженным поверхностным слоем. В зависимости от толщины кристалла часть напряжений компенсируется за счет изгиба пластины.

Авторами исследовано влияние предварительной деформации на процесс накопления радиационных дефектов в кремнии марки КЭФ-4,5, имплантированном протонами с энергией 140-500 КэВ и флюенсом $2,5 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Образцы представляли собой плоскопараллельные пластины толщиной 0,4 мм, которые закреплялись в рабочей камере ускорителя КГ-500 (НИИ ЯФ МГУ) и деформировались путем изгиба. Сравнивались два состояния: в первом случае приповерхностный слой находился в сжатом состоянии, а во втором - в растянутом. Для сравнения в каждой партии имелся также неизогнутый образец. После облучения механические напряжения снимались, остаточный изгиб пластин определялся рентгенодифракционным методом на двухкристальном рентгеновском спектрометре.

Показано, что приложенные к образцу в процессе облучения механические напряжения влияют на величину остаточного изгиба кремниевых пластин. Минимальная остаточная кривизна наблюдалась у образцов, в поверхностном слое которых при облучении создавались напряжения сжатия. Методом моделирования кривых дифракционного отражения построены профили распределения деформаций в образцах, облученных при воздействии механических напряжений разных знаков. Показано, что создание сжимающих напряжений у поверхности пластины приводит к сдвигу максимума деформации в нарушенном слое в сторону поверхности. Методом трехкристальной рентгеновской дифрактометрии исследована зависимость интенсивности главного дифракционного пика от угла отворота образца от брегговского положения. Наблюдалось периодическое изменение интенсивности главного пика, связанное с наличием слоев с параметром решетки, отличающимся от исходного. Для кристалла, имплантированного протонами с энергией 300 КэВ, по периоду осцилляции интенсивности главного пика оценена толщина слоя с положительным значением деформации, которая составила 2,4 мкм, и с отрицательным - 1 мкм. Сделан вывод, что под действием поля механических напряжений в процессе облучения вблизи поверхности формируется тонкий слой с отрицательной деформацией, ниже которого располагается слой с положительной деформацией значительно большей толщины.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ КИСЛОРОДА И АЗОТА НА СОСТАВ ФАЗ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ МЕХАНОСПЛАВЛЕНИИ В СИСТЕМЕ Fe-C

Елькин И.А.^{*}, Волков В.А., Чулкина А.А., Протасов А.В., Елсуков Е.П.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Российская Федерация

*E-mail: Ivan.A.Elkin@gmail.com

Методами рентгеновской дифракции, мессбауэровской спектроскопии, динамической магнитной восприимчивости исследовались процессы фазообразования в сплавах на основе $Fe_{75}C_{25}$ и $Fe_{85}C_{10}$, легированных примесями кислорода и азота, при механосплавлении (МС) в шаровой планетарной мельнице.

Несмотря на большое количество работ по МС в системе Fe-C наблюдаются большие различия по составу образующихся фаз в результатах полученных разными авторами. Вместе с тем эта система имеет большое практическое значение и знание закономерностей формирования фаз в ней важно не только для выяснения механизмов фазообразования в условиях интенсивной пластической деформации, но также для лучшего понимания процессов связанных с получением и термообработкой сталей и чугунов.

Показано, что наличие указанных примесей оказывает значительное влияние на состав и последовательность образования карбидных фаз. Наличие одновременно примесей кислорода и азота в сплаве на основе $Fe_{75}C_{25}$ приводит к формированию в качестве первой карбидной фазы Fe_7C_3 , вместо Fe_3C , образующегося в сплаве без примесей. Цементит образуется только на поздних стадиях МС. На основе анализа изменений содержания углерода в аморфной фазе показано, что аморфная фаза, образующаяся на начальных этапах МС, характеризуется высоким его содержанием. По мере вовлечения в механосплавление новых порций железа аморфная фаза обедняется по углероду. Каждый карбид начинает образовываться при приближении состава аморфной фазы к его составу.

Легирование сплава $Fe_{75}C_{25}$ только кислородом приводит к формированию, кроме цементита, карбида Fe_5C_2 . Из этого можно заключить, что образованию карбида Fe_7C_3 способствует наличие в сплаве азота, а наличие примесей кислорода приводит к появлению Fe_5C_2 .

Сравнение фазового состава МС сплавов $Fe_{85}C_{15}$ и $Fe_{80}C_{10}O_{7,5}N_{2,5}$ показало, что несмотря на более высокое содержание углерода в первом случае, во втором сплаве образуется больше цементита. Вместе с тем, несмотря на значительно более высокое содержание примесей по сравнению со сплавом на основе $Fe_{75}C_{25}$, во втором сплаве не наблюдается образования богатых углеродом карбидов Fe_7C_3 и Fe_5C_2 . Т.е. металлоидные компоненты проявляют в сплавах суммарный эффект – там где выше их содержание образуется большее количество и более богатые по углероду карбиды.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта УрО РАН 12-У-2-1035 и проекта РФФИ_а № 14-03-00044.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИНТОВЫХ СУПЕРДИСЛОКАЦИЙ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В КВАРЦЕ

Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г.Уфа, Россия
emaletd@mail.ru

Важным направлением современного материаловедения является разработка фотонных кристаллов для оптики, оптоэлектроники. В различных кристаллах при выращивании образуются винтовые супердислокации с полыми ядрами. В зависимости от условий выращивания кристалла супердислокации имеют диаметр от 1 Нм до 1 мкм, а их плотность достигает 10^5 см^{-2} . Такая структура позволяет использовать их для получения двумерных фотонных кристаллов для оптоэлектроники. Упругое поле супердислокации будет влиять на оптические свойства такого фотонного кристалла. В работе исследуются оптические свойства периодических структур винтовых супердислокаций - фотонных кристаллов с учетом влияния собственных напряжений на диэлектрическую проницаемость. Для анализа зонной структуры фотонного кристалла использована плоская двумерная модель, представляющая собой набор бесконечных винтовых супердислокаций, расположенных в узлах прямоугольной решетки с заданным шагом и диаметром полого ядра с другой диэлектрической проницаемостью. Для кристалла получено выражение для неоднородной диэлектрической проницаемости, определяемой полем напряжений супердислокаций. Распространение электромагнитного поля в таком кристалле описывается уравнениями Максвелла. Для исследования оптических свойств использованы известные численные методы, а также метод разложения по малому параметру. Построен закон дисперсии для самой нижней ветви (разрешенной зоны) фотонного кристалла. В первом приближении закон дисперсии определяется известными выражениями. На границе зоны Бриллюэна имеются значения частот, задающие положения краёв первой запрещенной фотонной зоны. Интерференция прямой и обратной волн приводит к образованию стоячей волны. При этом распространение фотонов с энергиями, удовлетворяющими условию Брэгга, в идеальном кристалле оказывается невозможным. В этих участках спектра образуются энергетические разрывы – запрещенные зоны. Волновой механизм образования запрещенных зон является общим для всех периодических структур. Приведены оптические спектры отражения, характеризующие параметры фотонных зон, присутствующих в видимой области спектра. Проведено исследование упрощенной модели зонной энергетической структуры фотонных кристаллов, позволяющие в аналитическом виде установить дисперсионные зависимости для групповой скорости фотонов в таком фотонном кристалле. Скорость фотонов (групповая скорость соответствующих электромагнитных волн) становится очень малой вблизи границы зоны Бриллюэна. Если направления векторов групповой и фазовой скоростей совпадают, то показатель преломления является положительным. Если же эти направления взаимно противоположны, то показатель преломления является отрицательным. Учет влияния собственных напряжений супердислокаций производится во втором приближении. Получены оценки изменения закона дисперсии, дисперсионной зависимости для групповой скорости и эффективной массы фотонов от величины вектора Бюргерса супердислокации, радиуса ядра и шага решетки. Таким образом, можно получать двумерные фотонные кристаллы из различных кристаллов на основе периодических решеток супердислокаций.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАРЦА ОТ ПЛОТНОСТИ ВИНТОВЫХ СУПЕРДИСЛОКАЦИЙ

Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г.Уфа, Россия
emaletd@mail.ru

Важным направлением современного материаловедения является разработка фотонных кристаллов для оптики, оптоэлектроники. В различных кристаллах при выращивании образуются винтовые супердислокации с полыми ядрами. В зависимости от условий выращивания кристалла супердислокации имеют диаметр от 1 Нм до 1 мкм, а их плотность достигает 10^5 см^{-2} . Такая структура позволяет использовать их для получения двумерных фотонных кристаллов для оптоэлектроники. Упругое поле супердислокации будет влиять на оптические свойства такого фотонного кристалла. В работе исследуются оптические свойства периодических структур винтовых супердислокаций - фотонных кристаллов с учетом влияния собственных напряжений на диэлектрическую проницаемость. Для анализа зонной структуры фотонного кристалла использована плоская двумерная модель, представляющая собой набор бесконечных винтовых супердислокаций, расположенных в узлах прямоугольной решетки с заданным шагом и диаметром полого ядра с другой диэлектрической проницаемостью. Для кристалла получено выражение для неоднородной диэлектрической проницаемости, определяемой полем напряжений супердислокаций. При действии на кристалл некоторых механических напряжений тензор диэлектрической проницаемости кристалла меняется и принимает значение $\epsilon_{ij} + \Delta\epsilon_{ij}$, где симметричный тензор второго ранга $\Delta\epsilon_{ij}$ – малая добавка, определяемая напряжениями. Так как характеристической поверхностью тензора диэлектрической проницаемости ϵ_{ij} является эллипсоид, то изучаемые эффекты можно наглядно представить себе как результат его деформации под действием приложенного напряжения. В линейном приближении эти изменения выражаются следующим образом: $\Delta\epsilon_{ij} = \pi_{ijkl} \sigma_{kl}$, где π_{ijkl} – пьезооптические коэффициенты; σ_{kl} – тензор упругих напряжений. Для кристаллов тригональной симметрии можно записать выражение для показателя преломления в виде $\Delta n \approx (\pi_{11} - \pi_{12})n^3 \sigma_{11}$. Используя полученные численные решения для полей напряжений винтовых супердислокаций с полым ядром в пластине, можно вычислить изменение показателя преломления вблизи супердислокации. Проведено моделирование распределения показателя преломления вблизи супердислокации в пластине кварца. Построены графики зависимости относительного изменения показателя преломления кварца в зависимости от расстояния до оси супердислокации. Также рассмотрено изменение показателя преломления кварца, содержащего периодический набор бесконечных винтовых супердислокаций, расположенных в узлах прямоугольной решетки с заданным шагом и диаметром полого ядра с другой диэлектрической проницаемостью. Построены графики зависимости относительного изменения показателя преломления кварца в зависимости от расстояния вдоль сетки супердислокаций. Полученные распределения показали, что для пьезооптических показателей кварца влияние собственных напряжений от сетки винтовых супердислокаций с полым ядром не является значительным. Что позволяет создавать двумерные фотонные кристаллы из различных кристаллов на основе периодических решеток супердислокаций.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ АНСАМБЛЯ ВИНТОВЫХ СУПЕРДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛЕ КВАРЦА

Емалетдинов А.К., Талипов Р.Р.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г.Уфа, Россия
emaltd@mail.ru

Винтовые супердислокации с полыми ядрами образуются в при выращивании в различных кристаллах. Диаметр от 1 Нм до 1 мкм и высокая плотность супердислокаций, определяемые условиями роста кристалла, позволяют использовать их для получения фотонных кристаллов для оптоэлектроники. Упругое поле супердислокации будет влиять на оптические свойства кристалла, в частности диэлектрическую проницаемость и показатель преломления. Поэтому описание упругих полей от ансамблей супердислокаций необходимо для анализа оптических свойств такой системы. В настоящее время методом виртуальных дислокационных и дисклинационных петель получены выражения для упругих напряжений от винтовой дислокации в пластине, винтовой супердислокации с полым ядром в полупространстве. В работе проведено моделирование упругих полей напряжений для супердислокации и периодической сетки супердислокаций в свободной пластине. Необходимо решать уравнение равновесия для супердислокации, перпендикулярной поверхности пластины. На поверхностях пластины и полого ядра супердислокации заданы однородные граничные условия. Для получения решения используется метод суперпозиции, изображений и модель виртуальных поверхностных дисклинаций. Для удовлетворения граничных условий вводится плотность виртуальных дисклинационных петель. Используя выражения для упругого поля петли, из граничного условия можно получить интегральное уравнение типа Коши относительно плотности этих петель. Применяя преобразование Фурье, можно решить уравнение для Фурье образа плотности распределения виртуальных дисклинационных петель на поверхности полости супердислокации. С помощью обратного преобразования Фурье можно получить выражения для упругих напряжений супердислокации, в виде интегралов, содержащих специальные функции. В данной задаче при этом нарушаются однородные граничные условия на второй поверхности пластины. Для удовлетворения однородных условий на второй поверхности необходимо ввести дисклинационные петли изображения противоположного знака, удаленных от поверхности на толщину пластины. После этого петли изображения второй поверхности нарушают граничные условия на первой поверхности. Поэтому необходимо опять ввести петли изображения на расстоянии двух толщин для удовлетворения граничных условий на первой поверхности. В результате возникает бесконечный ряд петель изображения противоположного знака, который необходимо вычислить. Проведено численное интегрирование выражений при различных значениях параметров. Рассмотрена задача, когда имеется периодическая система супердислокаций, образующих двухмерную сетку. Точное решение упругой задачи для ансамбля является очень сложным, так как возникает необходимость удовлетворения граничных условий на ядре каждой супердислокации. Поэтому было произведено решение методом разложения по малому параметру. В первом приближении можно считать, что напряжения от данной дислокации создают на ядрах окружающих супердислокаций дополнительные постоянные напряжения, которые необходимо скомпенсировать путем изменения плотности виртуальных дисклинационных петель. Проведено моделирование изменения полей напряжений для ансамбля супердислокаций с различной плотностью.

СЕГНЕТОЖЕСТКАЯ ПЬЕЗОКЕРАМИКА С НИЗКОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ СПЕКАНИЯ

Еремкин В.В., Мараховский М.А., Смотраков В.Г., Панич А.А.
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
smotr@ip.rsu.ru

Многослойная конструкция пьезоэлектрического преобразователя, использующего обратный пьезоэффект, является одной из наиболее распространенных и пригодных к массовому производству. Основанная на методе шликерного литья технология позволяет совместить спекание активных керамических слоев с формированием системы внутренних электродов и получать монолитные преобразователи с пониженным управляющим напряжением. Из-за взаимодействия свинецсодержащей керамики с внутренними Ag-Pd электродами возникает необходимость усовершенствования технологии синтеза известных пьезокерамических материалов с целью снижения температуры их спекания при сохранении функциональных параметров.

В настоящей работе изучено влияние механической активации на условия синтеза и степень дисперсности порошков, режимы спекания, микроструктуру и свойства сегнетожесткой керамики $\text{PbZr}_{0.44}\text{Ti}_{0.44}(\text{Mn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_{0.06}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_{0.06}\text{O}_3$ (I) [1] и $\text{PbZr}_{0.437}\text{Ti}_{0.432}(\text{Mn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_{0.044}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_{0.087}\text{O}_3$ (II) [2]. Проведено сравнение традиционной схемы синтеза из простых оксидов и методики с применением прекурсора, содержащего все элементы, входящие в позицию В перовскитовой ячейки ABO_3 . На различных технологических этапах применялся помол в планетарной мельнице Planetary Mill pulverisette 5 (Fritsch) с барабаном и шарами из стабилизированной иттрием керамики диоксида циркония и частотой вращения 400 об/мин.

Задача по снижению температуры спекания вплоть до 1000 °С решается при использовании обеих схем синтеза. Применение В-прекурсора приводит к заметному уменьшению зерна и снижению пьезоэлектрической активности материала. Такой же эффект вызывает избыток PbO в шихте. В этом состоит существенное различие сегнетожесткой и сегнетомягкой керамики, для которой использование В-прекурсора при синтезе либо не влияет на размер зерна, либо способствует его увеличению. Кроме того, в отличие от сегнетомягкой керамики, у которой повышение температуры спекания сопровождается плавным ростом зерна, для исследованных материалов, независимо от способа получения, характерно отсутствие заметных изменений размера зерна в широком диапазоне температур. Значения k_p , $\varepsilon_{33}^T/\varepsilon_0$ и абсолютной величины d_{31} прямо пропорциональны размеру зерна. Для всех образцов максимум этих параметров достигается при температуре спекания от 1050 до 1100 °С. Из данных по фазовому составу и параметрам перовскитовой ячейки керамики, полученной при температуре спекания 1100 °С, следует, что применение В-прекурсора, либо избыток PbO в шихте, способствуют увеличению концентрации ромбоэдрической фазы, а также уменьшению спонтанной деформации тетрагональной ячейки. Таким образом, одновременно с изменением микроструктуры керамики меняется и структура твердого раствора. Можно предположить, что ионы Mn^{2+} и Zn^{2+} , обладающие относительно большим радиусом, могут частично занимать позицию А перовскитовой ячейки. В таком случае применение В-прекурсора, как и избыток PbO в шихте, должны этому препятствовать. Сравнение материалов I и II, полученных в одинаковых условиях, указывает на близость их пьезоэлектрических свойств, за исключением того, что I обладает меньшими механическими, а II – диэлектрическими потерями. Оба материала пригодны для практического использования.

1. Nishida M., Ouchi H. // GB patent N 1376013. – Publ. 04.12.1974.

2. Смотраков В.Г. и др. // Патент РФ № 2219143. – Оpubл. 20.12.2003.

СЭМ - АСМ: комплексный метод исследования реальной структуры сегнетоэлектрических кристаллов ниобата лития

П.В. Ефремова, Б.Б. Педько, Ю.В. Кузнецова, О.В. Малышкина
 Тверской государственный университет
 e-mail: p-efremova@yandex.ru

Ниобат лития LiNbO_3 (НЛ) — общепризнанный модельный сегнетоэлектрический кристалл, значительная часть практических применений которого связана с широкими возможностями управления оптической однородностью этого материала.

В работе методами АСМ и РЭМ исследована дефектная и доменная структура НЛ, чистого и с примесями Mn, Cr и Ti. Одновременно изучены возможности применения этих методов для создания неоднородного распределения заряда в НЛ с целью формирования оптических изображений, проявляющихся вследствие локального электрооптического эффекта. Методом АСМ исследована реальная структура кристаллов НЛ, подвергнутых облучению пучком электронов РЭМ. Установлено, что сканирование электронным лучом поверхности НЛ изменяет оптическую однородность монокристаллов, связанную с ростовыми и термически наведёнными внутренними локальными электрическими полями. Предварительное воздействие электронным лучом позволяет выявить дефектную, доменную структуру НЛ при последующем изучении поверхности методом АСМ (PFM), которая ранее этим методом не выявлялась.

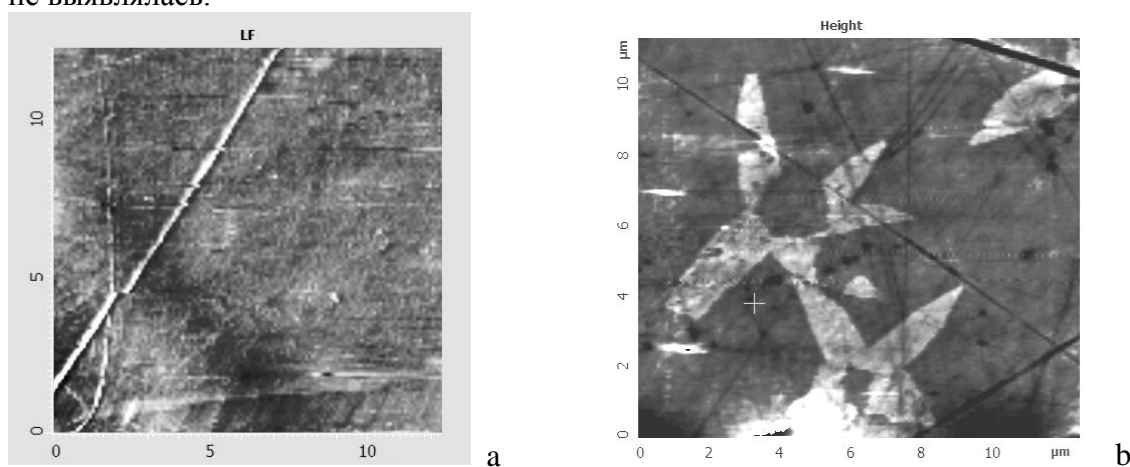


Рис. 1. Изображение поверхности кристалла $\text{LiNbO}_3 + 0,1\text{at}\% \text{Ti}$ (z-срез), полученное методом PFM. а) до воздействия и б) после воздействия электронным пучком растрового электронного микроскопа при разности потенциалов 10кВ в течение 10 мин.

Известно, что неоднородности структуры в НЛ, связанные с заряженными состояниями, сопровождаются появлением локальных электрических полей, которые с течением времени могут быть экранированы неравновесными носителями заряда. В результате воздействия электронного луча изменяются условия экранирования этих полей и указанные структурные дефекты могут наблюдаться методом АСМ. Со временем наблюдаемые картины релаксируют, но изменения микродоменной структуры НЛ после воздействия электронным пучком на полярных срезах может сохраняться длительное время.

КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ТЕЛО КАК УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ГЕНЕРАТОР АВТОВОЛН ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ

Зуев Л.Б.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,
lbz@ispms.tsc.ru*

Обнаружение автоволн локализованной пластической деформации на всех этапах пластического течения [1] открыло путь к установлению общего характера пластичности от предела текучести до разрушения. В ходе экспериментальных исследований около пятидесяти различных материалов выяснилось, что процесс деформации неоднороден во времени и локализован в пространстве. Это выражается в формировании автоволновых картин (паттернов), которые характеризуются:

- скоростью распространения $10^{-5} \dots 10^{-4}$ м/с,
- длиной волны $\sim 10^{-2}$ м,
- частотой $10^{-3} \dots 10^{-2}$ с $^{-1}$.

Наиболее важная особенность развития автоволнового процесса пластической деформации состоит в том, что каждой стадии процесса течения отвечает определенный тип автоволны. Это приводит к правилу соответствия, согласно которому

- стадии легкого скольжения монокристаллов отвечает автоволна переключения,
- стадии линейного деформационного упрочнения отвечает фазовая автоволна,
- стадии параболического деформационного упрочнения соответствует стационарная диссипативная система,
- стадии предразрушения отвечает коллапс автоволновой картины.

Перечисленные закономерности позволяют сделать, по крайней мере, два заключения. Первое из них состоит в том, что многостадийный процесс деформационного упрочнения материалов может рассматриваться как закономерная самопроизвольная смена автоволновых картин (паттернов). Этот вывод следует из анализа большого числа экспериментальных данных. В ходе этой процедуры была установлена однозначная взаимосвязь формы автоволновой картины локализации и действующего на соответствующей стадии механизма деформационного упрочнения.

Второе обстоятельство состоит в том, что реальное деформируемое твердое тело может рассматриваться как универсальный генератор автоволн разных типов. Вообще говоря, в физике, химии и биологии известны генераторы автоволновых процессов, способные порождать разные автоволны [2]. Такое моделирование необходимо для анализа природы процессов самоорганизации, к которым относятся автоволны. В названных науках для генерации определенного типа автоволны необходимо строго выдерживать температурный и концентрационный режимы. Это требует своего собственного реактора для каждого типа автоволны.

В случае деформируемого твердого тела автоволны последовательно рождаются в одном и том же образце при постоянной скорости его растяжения и при постоянной температуре. Такой образец является универсальным генератором автоволновых картин, которые нетрудно наблюдать, используя фото- или видеотехнику.

В результате развития автоволновых представлений о природе пластичности появляется возможность построить автоволновую теорию пластической деформации, в основе которой лежат экспериментальные данные об автоволновых процессах [3].

[1] Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. Новосибирск: Наука, 2008. 327 с.

[2] Васильев В.А., Романовский Ю.М., Яхно В.Г. Автоволновые процессы. М.: Наука, 1987. 240 с.

[3] Zuev L.B. Autowave mechanism of plastic flow in solids // Phys. Wave Phenom. 2012. Vol. 20, 166-173.

АВТОВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ ЛОКАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ И МЕДЛЕННЫЕ ДВИЖЕНИЯ В ГОРНЫХ ПОРОДАХ

Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Надежкин М.В., Горбатенко В.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Томский государственный университет, Томск, Россия

bsa@ispms.tsc.ru

Для решения теоретических и практических задач, возникающих при геомеханическом анализе, требуется знание не только механических свойств горных пород, но и механизмов их деформации, которые следует использовать для оценки эволюции напряженно-деформированного состояния. Развитый нами для анализа пластического течения метод спекл-фотографии выявил главные закономерности процессов макролокализации деформации твердых тел при нагружении и позволил развить автоволновую модель пластичности [1]. Ее проверка на широком круге металлов и сплавов показала, что тип локализации определяется законом пластического течения. Гипотеза о возможности применения этой модели к деформационным процессам в горных породах обусловила интерес к исследованиям характера макронеоднородности деформации квазипластичных горных пород.

С этой целью в настоящей работе исследовали картины локализации деформации образцов горных пород (сильвинит, мрамор и песчаник) размером 25×12×10 мм. Одноосное сжатие образцов производилось на испытательной машине со скоростями перемещения подвижного захвата 0.1, 0.5, 1 и 10 мм/мин. Одновременно с записью диаграмм сжатия с использованием автоматизированного комплекса ALMEC-tv методом цифровых спекл-изображений последовательно регистрировались картины локализации деформации на рабочей грани исследуемых образцов. На кривых нагружения наблюдались участки резкого падения напряжений, соответствующие растрескиванию образцов. Пластическая деформация исследованных горных пород протекает макроскопически локализовано, то есть, в любой момент времени сосредоточена в нескольких зонах макроскопического масштаба, в то время как другие объемы при этом же приросте деформации практически не деформируются. Экспериментально установлен автоволновой характер процесса локализации деформации при сжатии горных пород. Это утверждение основано на экспериментально установленных характеристиках этих процессов, позволяющих отличить их от других, ранее изученных типов волн, также связанных с деформацией: скорость распространения волн локализации деформации лежит в пределах $10^{-5} \dots 10^{-4}$ м/с; области неоднородности деформации имеют макроскопический масштаб, составляющий 3...5 мм и соизмеримый с размерами образцов, используемых для механических испытаний. Поскольку скорости экспериментальных наблюдений «медленных движений» (~1...10 км/год) весьма близки к скоростям волн локализованной деформации (~ $10^{-5} \dots 10^{-4}$ м/с), наблюдавшимся в песчанике, мраморе и сильвините, то можно утверждать, что впервые в лабораторных условиях при одноосном сжатии наблюдалось распространение автоволн локализованной деформации в образцах из горных пород со скоростями, близкими к наблюдаемым в горных пластах после землетрясений и горных ударов так называемым «медленным движениям» [2].

Литература

1. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. Новосибирск: Наука, 2008. 327 с.
2. Гольдин С.В. Дилатансия, переупаковка и землетрясения // Физика Земли. 2004. № 10. С. 37–54.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА КАРТИНЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ГЦК И ОЦК СТАЛЯХ

Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Надежкин М.В., Лунев А.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Томский государственный университет, Томск, Россия

bsa@ispms.tsc.ru

Охрупчивание сталей под влиянием водорода является серьезной практической проблемой, от решения которой зависит безопасность работы конструкций [1]. В связи с этим, в настоящем исследовании предпринята попытка, выяснить влияние водорода на макроскопическую локализацию пластического течения и разрушение ГЦК и ОЦК сталей. Электролитическое насыщение водородом ГЦК монокристаллов аустенитной стали X18H12M2 и поликристаллов низкоуглеродистой стали 08пс осуществляли в трехэлектродной электрохимической ячейке с графитовым анодом при постоянном контролируемом катодном потенциале $U = -500$ мВ, задаваемом относительно хлорсеребряного электрода сравнения, в 1N растворе серной кислоты с добавлением 20 мг/л тиомочевины при температуре 323 К в течение 24 и 70 ч с предварительной продувкой азотом. Вольтамперные кривые фиксировались с помощью потенциостата IPC-Compact. Подготовленные образцы растягивались на испытательной машине «Instron-1185» с одновременной регистрацией полей векторов перемещений $r(x,y)$ точек на рабочей поверхности образцов методом двухэкспозиционной спекл-фотографии [2]. Из анализа картин локализации пластической деформации следует, что при растяжении образцов в исходном состоянии без водорода на стадии линейного деформационного упрочнения пластическая деформация сосредоточена в равноотстоящих друг от друга на расстоянии 4 мм в стали X18H12M2 и 8 мм в стали 08пс зонах локализованной деформации, движущихся с постоянной скоростью $3.5 \cdot 10^{-5}$ м/с в стали X18H12M2 и $5.3 \cdot 10^{-5}$ м/с в стали 08пс. В наводороженных образцах на стадии линейного деформационного упрочнения картина локализации пластической деформации представляет собой совокупность широких зон, состоящих из двух-трех связанных очагов локализованной деформации с характерным расстоянием между ними 5.6 мм в стали X18H12M2 и 6 мм в стали 08пс. Зоны локализации деформации движутся со скоростью $2.5 \cdot 10^{-5}$ м/с в стали X18H12M2 и $8.3 \cdot 10^{-5}$ м/с в стали 08пс. В исходном состоянии и после электролитического наводороживания на стадии параболического упрочнения сформировавшаяся ранее система эквидистантных зон локализации деформации становится стационарной, затем неподвижные очаги локализации пластической деформации начинают согласованное движение с тенденцией к их слиянию в шейке. Главные качественные закономерности эволюции картин распределения локальных деформаций в процессе нагружения определяются только сменой стадий деформационного упрочнения моно- и поликристаллов, и не зависят от типа их кристаллической решетки (ГЦК, ОЦК), химического состава сталей и механизмов водородного охрупчивания. Однако водород усиливает локализацию и меняет протяженность стадий пластического течения и количественные параметры картин локализации пластической деформации: длину волны и скорость волн локализации пластической деформации.

Литература

1. Sofronis P., Liang Y., Aravas N. Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys // J. Mech. A. Solids. - 2001. - №. 20. - P. 857-872.
2. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. - Новосибирск: Наука, 2008. - 327 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЭЛЕМЕНТОВ КАБЕЛЯ ТЕХНИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ СПЛАВА Nb-Ti ПРИ МНОГОСТУПЕНЧАТОМ ВОЛОЧЕНИИ

Зуев Л.Б.^{1,2}, Шляхова Г.В.^{1,3}, Баранникова С.А.^{1,2}, Колосов С.В.¹, Мальцев Ю.А.²

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск,
lbz@ispms.tsc.ru

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, г.
Томск, bsa@ispms.tsc.ru

³Северский технологический институт НИЯУ МИФИ, г. Северск,
shgv@ispms.tsc.ru

Многожильный сверхпроводящий кабель на основе сплава Nb-Ti (Nb-47,5 мас.%Ti) представляет собой трехслойный композит, в котором между медными сердечником и внешней медной оболочкой располагается слой волокон Nb-Ti, размещенных в медной матрице. Такой композит может также содержать резистивные или диффузионные барьеры, стабилизирующие оболочки, и прочные армирующие элементы [1].

В настоящей работе для тонких исследований сечений элементов кабеля использовали атомно-силовую микроскопию с применением контактного метода в режиме “постоянной силы“. В этом случае сигнал рассогласования слабо отображает гладкие участки рельефа (волокна) и с высоким контрастом отображает заметные шероховатости (ниобиевый барьер). В ходе этих исследований вокруг волокон Nb-Ti, размещенных в медной матрице, удалось выявить диффузионный Nb барьер, который проявляется высокоамплитудными максимумами, шириной до 260 нм, разделенных низкоамплитудными линиями рельефа для волокон Nb-Ti и медной матрицы. Исследования слоя волокон на границе с медным сердечником выявили специфический дефект в местах обрыва сверхпроводящих жил [2, 3]. Обнаружены волокна с частичным отсутствием ниобиевого барьера в зоне локализации пластической деформации в местах разрыва волокон Nb-Ti.

Исследования, проведенные с помощью растрового электронного микроскопа Carl Zeiss EVO 50 с приставкой для рентгеновского дисперсионного микроанализа Oxford Instruments, показали, что волокна с частичным отсутствием ниобиевого барьера в зоне локализации пластической деформации в местах разрыва волокон Nb-Ti, расположены в области, прилегающей к медному сердечнику. Обнаруженные зоны локализации указывают на неравномерный характер пластической деформации Nb-Ti волокон по длине кабеля. При сборке композитной заготовки для изготовления многоволоконного провода увеличение количества волокон приводит к уменьшению их размера и, как следствие, к увеличению количества пустот, что приводит к неравномерной деформации и разрыву волокон в зоне локализации.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.К. Шиков, В.И. Панцырный, А.Е. Воробьева и др., Металловедение и термообработка, № 11: 68 (2002).
2. Л.Б. Зуев, С.А. Баранникова, Г.В. Шляхова, С.В. Колосов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 9, № 4: 417 (2012).
3. Зуев Л.Б., Шляхова Г.В., Баранникова С.А., Колосов С.В. Металлы, № 2: 83 (2013).

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований по проекту 11-08-00237-а.

УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛЯРИЗОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ SBN

Иванов В.В., Педько Б.Б.

Тверской госуниверситет, г.Тверь, Россия

Vladimir.Ivanov@tversu.ru

Монокристаллы твердых растворов ниобата бария-стронция(SBN) относятся к классу релаксорных сегнетоэлектриков, физические свойства которых могут быть модифицированы в широких пределах как путем изменения соотношения ионов стронция и бария в составе твердого раствора, так и введением в матрицу SBN примесей редкоземельных и переходных металлов [1,2]. Применение данных материалов в нелинейной фоторефрактивной оптике требует использования монокристаллов образцов, поляризация которых осуществляется путем приложения к кристаллу постоянного электрического поля. Для монокристаллов твердых растворов ниобата бария-стронция, относящихся к кислородно-октаэдрическим сегнетоэлектрикам со структурой тетрагональных калий-вольфрамовых бронз, характерен размытый фазовый переход из сегнетоэлектрической в параэлектрическую фазу. С другой стороны, диэлектрические свойства, процессы поляризации в сегнетоэлектрических кристаллах напрямую зависят от электрической проводимости. В работе [3] приведены результаты исследования температурной зависимости электропроводности с примесями Co, Cr, Se.

В настоящей работе проводятся результаты исследований устойчивости поляризованного состояния в сегнетоэлектрике-релаксоре SBN с примесью европия. Используется комбинированный метод наблюдения тока переключения и эффекта Баркгаузена [4]. Степень распада поляризованного состояния коэффициентом K равным числа скачков Баркгаузена, наблюдаемых при уменьшении при уменьшении поля от максимального значения до нуля к числу скачков Баркгаузена, наблюдаемы при поляризации. Температурная зависимость коэффициента K описывается экспоненциальным законом с энергией активации 0,5 - 0,6 эВ, что совпадает с энергией активации электропроводности [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волк Т.Р., Салобутин В.Ю., Ивлева Л.И., Полозков Н.М., Панкрат Р., Велеке М. Сегнетоэлектрические свойства кристаллов ниобата бария-стронция с примесями некоторых редкоземельных // Физика твердого тела. – 2000, т.42, №11, с. 2066-2074.
2. Блистанов А.А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики // М.: Наука, 2000.
3. Ивлева Л.И., Козлова Н.С., Забелина Е.В. Исследование температурной зависимости электропроводности в кристаллах ниобата бария-стронция с различными примесями // Кристаллография. – 2007, т.52, №2, с. 344-347.
4. Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. – М.:Наука, 248, 1986.

ПОЛУЧЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ИНВЕРТИРОВАННЫХ СТРУКТУР « ТОЧЕЧНЫМ » ОБЛУЧЕНИЕМ ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ В РЭМ

А.И. Ильин, О.В.Трофимов

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
РАН 142432 Черноголовка, Россия, ilin@ipmt-hpm.ac.ru*

В последние годы перспективным становится метод прямой переполаризации в растровом электронном микроскопе (РЭМ). Однако, получить периодические доменные структуры из доменов с латеральным размером элементов менее 1 мкм чрезвычайно сложно, в том числе потому, что до сих пор неизвестно влияние распределения заряда поверхности [1-2] на образование доменов. В данной работе исследовали влияние способа экспонирования электронным лучом (ток луча, напряжение, время стояния луча, расстояние между точками стояния) и геометрии рисунка (заряда поверхности) на формирование доменов и доменных структур в танталате лития (ТЛ) методами РЕМ и АСМ.

В РЭМ экспонировали $-Z$ поверхности полированного кристалла ТЛ толщиной 500 мкм с нанесенной на другой стороне пластины пленкой Al для хорошего стока заряда, а также $127^\circ Y'$ -срезы LiTaO₃. Для создания периодических структур экспонирование проводили сфокусированным электронным лучом ($\varnothing \sim 40-50$ нм) по точкам в растровом электронном микроскопе EVO-50, оборудованном программно-аппаратным комплексом NanoMaker. Изменяемыми параметрами в РЭМ были – ускоряющее напряжение и ток луча, а в программе – шаг и время стояния луча в точке. Экспонировали структуры, состоящие из рядов последовательных точек с разным расстоянием между точками в ряду. Расстояние между рядами составляло семь мкм. После селективного химического травления в горячей плавиковой кислоте в течение 2 минут и промывки, образцы исследовали в оптическом, атомно-силовом микроскопах и РЭМ при низком ускоряющем напряжении (меньше 10 кВ).

Было установлено, что ширина линии периодической доменной структуры зависит от внедренного в точку заряда. При больших значениях заряда в точку (более 2-3 pC) поверхность диэлектрика местами растрескивается, а ряды расширяются до слияния. Минимальная ширина линий из инвертированных доменов составила величину порядка 200 нм. Расстояние между рядами доменов получались в одной структуре не одинаковыми, а инвертирование доменов в структурах зависело не только от дозы заряда в точку, но и расстояния между точками в ряду. При большем расстоянии между точками внедрения заряда в ряду требуется больший заряд в точку для инверсии домена. Соответственно увеличению дозы заряда растет ширина ряда. В точке стояния луча обнаруживается группа доменов, если группы не сливаются. Домены имели, как правило, форму неправильного шестиугольника. При всех способах экспонирования (при изменении напряжения и тока) ширина линий доменов слабо зависела от диаметра электронного луча. На обратной стороне пластины экспонированные линии состояли из отдельных доменов доросших до не облучаемой $+Z$ стороны. При исследовании методами АСМ размеры и форма доменов сохранялись после удаления с поверхности образца проводящей пленки алюминия. Минимальный размер доменов составлял 10-20 нм.

Литература

- [1] С. Restoin , S. Massy, C. Darraud-Taupiac, A. Optical Materials 22 (2003) 193–199
- [2] С. E. Valdivia, a) C. L. Sones, J. G. Scott, S. Mailis, R. W. Eason D., A. Scrymgeour , V. Gopalan, T. Jungk and E. Soergel APPLIED PHYSICS LETTERS 86, 022906 (2005)

ПОЛУЧЕНИЕ КРУПНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ ШЕЕЛИТА И ИХ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Исаев В.А.¹, Лебедев А.В.¹, Плаутский П.Г.¹, Андреева Н.П.², Евстигнеев В.Л.², Митин К.В.², Быкова М.Б.³, Гореева Ж.А.³, Козлова А.П.³, Козлова Н.С.³

¹ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», г.Краснодар, Россия

²ОАО НЦЛСК «Астрофизика», г.Москва, Россия, mitincon@yandex.ru

³НИТУ «Московский институт стали и сплавов», г.Москва, Россия

Недавние исследования открыли новый класс соединений вольфраматов и молибдатов щелочноземельных металлов и свинца со структурой шеелита – перспективных ВКР-активных сред нового поколения. Представляет интерес возможность легирования SrWO_4 и SrMoO_4 редкоземельными ионами в значительно больших концентрациях, чем это позволяет матрица BaWO_4 , благодаря меньшему ионному радиусу катиона Sr^{2+} , что открывает перспективы создания многофункциональных устройств на их основе, таких как ВКР-лазеры, осуществляющие генерацию и преобразование частоты внутри одной и той же активной среды. Исследование твердых растворов со структурой шеелита представляет интерес благодаря возможности тонкого контроля структуры и, в свою очередь, физических параметров материала, посредством варьирования состава твердого раствора. В Кубанском государственном университете на основе модификации метода Чохральского была разработана технология выращивания кристаллов BaWO_4 , SrWO_4 , SrMoO_4 , в которой используется оригинальный активный экран в области кристаллизации и отжига кристалла. В докладе представлены результаты исследования основных характеристик кристаллов BaWO_4 , $\text{SrWO}_4:\text{Nd}$, $\text{SrMoO}_4:\text{Nd}$ – лучевой стойкости и коэффициента ВКР усиления. В качестве источника излучения при проведении исследований использовался импульсно – периодический YAG:Nd – лазер с модуляцией добротности и длиной волны излучения 1,064 мкм. Энергия в импульсе излучения составляла 100 мДж, длительность импульса 4,2 нс. Частота следования импульсов 1 – 10 Гц. В испытаниях использовались образцы кристаллов диаметром 6,3 мм и длиной 65 мм. Лучевая стойкость исследованных образцов BaWO_4 , $\text{SrWO}_4:\text{Nd}$, $\text{SrMoO}_4:\text{Nd}$ составила 2,0 ГВт/см², 1,9 ГВт/см² и 1,3 ГВт/см² соответственно. Коэффициент эллиптичности и остаточный световой поток, при прохождении лазерного луча с длиной волны 0,63 мкм вдоль элементов, составили 93,5 и 0,011 для SrWO_4 и 32,7 и 0,031 для SrMoO_4 соответственно. Кроме того, установлено, что в системе BaWO_4 - BaMoO_4 образуется непрерывный ряд твердых растворов, получены монокристаллы $\text{Ba}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, исследованы их структура, физические свойства и, в частности, ВКР-характеристики, исследованы спектры комбинационного рассеяния в диапазоне температур 300-1750 К. В работе исследованы ВКР-характеристики твердых растворов $\text{Ba}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ в наносекундном режиме, рассчитаны коэффициенты ВКР-усиления на полносимметричных колебаниях $[\text{WO}_4]^{2-}$ и $[\text{MoO}_4]^{2-}$ анионных комплексов для различных x , осуществлено ВКР-преобразование на полносимметричных колебаниях $[\text{MoO}_4]^{2-}$ анионных комплексов в твердых растворах $\text{Ba}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, представляющих новую ВКР-среду со сдвигом 1-й стоксовой компоненты на 889 см⁻¹; В кристаллах $\text{Ba}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ при $x = 0,45$ и $x = 0,5$ осуществлена одновременная ВКР-генерация на двух полносимметричных колебаниях $\nu_1(A_g)$ $[\text{WO}_4]^{2-}$ и $[\text{MoO}_4]^{2-}$ анионных комплексов. Кристалл $\text{Ba}(\text{MoO}_4)_{0,5}(\text{WO}_4)_{0,5}$ посредством ВКР-генерации на $[\text{MoO}_4]^{2-}$ комплексах позволяет осуществлять частотный сдвиг излучения накачки на 889 см⁻¹ при коэффициенте ВКР-усиления 5,5 см/ГВт на длине волны 1064 нм, что делает его перспективной активной средой для создания источников, излучающих на новых длинах волн.

АКЦЕПТОРНЫЙ КОМПЛЕКС В ТЕРМООБРАБОТАННОМ КРИСТАЛЛЕ Ge<Ni,Ga>

Исламзаде Э.М., Агамалиев З.А., Захрабекова З.М., Аждаров Г.Х.

Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, E-mail:zangi@physics.ab.az

Известно, что в кристаллах Ge и Ge-Si, легированных медью и одним из типичных мелких акцепторных примесей (Al, Ga, In), при соответствующей термообработке возникают дополнительные электроактивные центры. Считается, что эти центры являются комплексами, образующимися в матрице из замещающих атомов мелких акцепторных примесей и быстродиффундирующих атомов меди. Никель, как и медь, в германии является быстродиффундирующей примесью. Глубокие акцепторные состояния, наблюдаемые в Ge<Ni>, относят к замещающим атомам этой примеси (Ni_s). Энергии активации этих уровней составляют – E_v+230 мэВ и E_v+450 мэВ. Большая скорость диффузии никеля, как и меди, в германии используется для прецизионного управления концентрацией Ni_s в матрице путём термического отжига образцов при различных температурах. С другой стороны, миграция части примесных атомов никеля при высокотемпературной обработке, как и в случае меди, может привести к образованию новых электроактивных комплексов с другими дефектами решётки, учёт которых необходим для получения материала с заданными электронными свойствами.

В настоящей работе, по данным холловских измерений, исследовано влияние термической обработки в интервале 800-1100К на спектр примесных состояний в кристаллах Ge<Ga, Sb, Ni>. Кристаллы Ge, легированные одновременно Ga и Sb с концентрациями порядка 10^{15} - 10^{16} см⁻³, выращивались методом Бриджмена. Заметим, что сурьму, как мелкий донор в кристаллах, использовали в качестве вспомогательной примеси для управления степенью компенсации акцепторных состояний галлия и никеля в матрице. Это необходимо для проявления в холловских измерениях всех энергетических уровней в запрещённой зоне германия. Образцы Ge<Ga, Sb>, с различным соотношением примесей, легировали никелем диффузионным методом при температуре его максимальной растворимости в германии (~1150 К).

В зависимости от эффективных значений концентраций примесей сурьмы ($N_{Sb}^* = N_{Sb} - N_{Ga}$, $N_{Sb} > N_{Ga}$) и галлия ($N_{Ga}^* = N_{Ga} - N_{Sb}$, $N_{Ga} > N_{Sb}$), в образцах, легированных никелем при ~1150 К, в холловских измерениях проявляются первое или второе акцепторные состояния Ni_s . Последующая термическая обработка этих образцов в интервале 800-1100К показала, что в образцах, закалённых с ~1020 К, возникают дополнительные центры акцепторного действия с энергией $E_v + 75$ мэВ. В измерениях эти уровни обнаруживаются в образцах с N_{Ga} порядка 10^{16} см⁻³ при сильном уровне компенсации акцепторного состояния галлия. На основе анализа полученных результатов считается, что наиболее вероятной моделью для этих акцепторов является комплекс из пары, состоящей из замещающих атомов примесей никеля и галлия ($Ni_s Ga_s$) или межузельного атома никеля и замещающего атома галлия ($N_i Ga_s$).

Показана необходимость учёта генерации дополнительных электроактивных центров при использовании метода прецизионного легирования германия никелем, путём соответствующей термической обработки кристалла.

БЕЗАКТИВАЦИОННАЯ ПРЫЖКОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛЕ TlInS₂

*А.А.ИСМАИЛОВ, **Ф.И.СЕИДОВ, **Г.М.АХМЕДОВ, **А.А.ИСМАИЛОВ

* - Институт Физики НАН Азербайджана, АЗ-1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 33

** - Азербайджанский Технический Университет, г. Баку, пр. Г.Джавида, 25,

e-mail: FAXR47@mail.ru

Монокристаллы TlInS₂ входят в группу A³B³C⁶₂. Облученные электронным интегральным потоком 2×10^{12} и 2×10^{13} эл./см² при температуре 294-111К зависимость электропроводимости от температуры в монокристаллах TlInS₂ была изучена. Было выявлено, что в облученных и необлученных монокристаллах при температуре ≤ 250 К появляется прыжковая проводимость. В необлученных монокристаллах при температуре 142К и облученных электронным интегральным потоком 2×10^{12} и 2×10^{13} эл./см² при температуре 167К данная проводимость заменяется безактивационной прыжковой проводимостью. Были определены нижеследующие параметры уровня прилипания:

Таблица

Параметры локальных уровней монокристалла TlInS₂ необлученного и облученного электронным интегральным потоком 2×10^{12} и 2×10^{13} эл./см²

Монокристалл	Доза облучения, Φ, эл./см ²	T ₀ , К	N _F , эВ ⁻¹ ·см ⁻¹	R _{ср} , Å	ΔE, эВ	N _t , см ⁻³
TlInS ₂	0	$5,676 \cdot 10^6$	$1,214 \cdot 10^{19}$	69,34	0,1184366	$1,43782 \cdot 10^{18}$
	$2 \cdot 10^{12}$	$6,979 \cdot 10^6$	$9,87 \cdot 10^{18}$	71,46	0,1326	$1,297 \cdot 10^{18}$
	10^{13}	$4,553 \cdot 10^6$	$1,51 \cdot 10^{19}$	65,62	0,11299	$1,7 \cdot 10^{18}$

DEFORMATION MECHANISMS CONTROL NUCLEAR AND RADIOACTIVE DECAY, HIGH ENERGY PHYSICS

Kisel V. P.

Institute of Solid State Physics, 142432 Chernogolovka, Moscow district, Russia,
kisel@issp.ac.ru

It is a reasonable assumption that it is just the deformation way Nature behaved. There are a lot of proofs for classical deformation and fracture mechanisms at phase transitions in different types of matter and quantum mechanics including electromagnetic field, biological tissues [1-2], radioactive and nuclear decay and high-energy physics. One of these proofs is the all-scaled hysteresis Bauschinger effect in all materials, where the dependence of this hysteretic deformation (stress) effect $\Delta\epsilon_B(\sigma)$ has the dome-shaped form with the threshold strain (stress) ϵ_{th} and zero values of $\Delta\epsilon_B$ at $\epsilon \leq \epsilon_{th}$ and $\epsilon \gg \epsilon_{th}$ [1-4]. The identical dislocation-like classical mechanisms determine work-hardening along the deformation curves in solids, which are confirmed by the same scaling of plastic flow stresses from atomic to macroscopic scales [2,3] up to macroscopic fracture stresses from ${}^3,{}^4\text{He}$ up to Si at 4.2K and in metal glasses and ceramics. These findings allow to expand the above conclusions down to the scale range of nuclei for the identical well-known experiment by Chien-Shiung Wu et al. [5]. The investigators were able to “polarize” (or to work harden the nuclei) the spins of electrons in nuclei of cobalt-60 along the direction of applied magnetic field at temperatures about 0.01K (by the quasi-synchronized motion and turn of electron spins). They found that during the beta-decay of hardened state (with the so-called *weak* interaction between particles) 40 percent of electrons are more emitted opposite to the collective nuclear spin (the reverse motion of electrons under beta-decay) than along it. The absolutely identical behavior of dislocations is well known for soft crystals in the range of *weak* work hardening [4]. The space symmetry (the parity) of this state of nuclei is called violated.

Deformation mechanisms in high energy physics are confirmed by the scaling of concentration-mass distributions of sub-nuclear fission particles and fracture fragments of solids in a wide range of scale lengths and the scaling of threshold atomic, microscopic and macroscopic flow and fracture stresses in all solids [2-5]. The universality of all-scales Bauschinger mechanism explains the parity conservation at $\Delta\epsilon_B \sim 0$ in radioactive decay of *super heavy (super hard)* nuclei (due to the so-called *strong* interaction between particles) and in *ultra-soft* electromagnetic fields. Parity breaking at beta-decay is concerned with the decay of moderate strengthening of nuclei due to mechanical relaxation ($\Delta\epsilon_B \neq 0$, the so-called *weak* interaction of particles). The general character of the spread of data points at various physical-chemical phase transitions under the movement of the Earth in anisotropic space [6] is due to their common deformation mechanisms under space-oriented cosmic rays and magnetic fields.

1. V.P. Kisel, arXiv.org/abs/0905.4428v1 (2009).
2. V.P. Kisel. Physica Status Solidi (a), 1995, vol. 149, No 1, pp 61-68.
3. N.S. Kissel, V.P. Kisel Mater. Sci. Eng. A, 2001, v. 309-310, pp 97-101.
V.P. Kisel J. Phys. (Paris). 1985, v. 46, Suppl. No 12, p. C10 (529-532).
- 4 V.P. Kisel Mater. Sci. Forum. 1993, v. 119-121, pp 233-238.
V.P. Kisel., S.A Erofeeva., M.Sh. Shikhsaidov. Phil. Mag. (London). 1993, v. 67A, p. 343.
5. C.-S. Wu, E. Ambler, R.W. Hayward et al. Phys. Rev. 1957, v.105, p.1413.
6. S.E. Shnoll. Biofizika. 2013 , v. 58, iss..2, pp 357-376 (in Russian).

GENERAL ROLE OF LOCALIZED DEFORMATION AT PHASE TRANSITIONS

Kisel V.P.

Inst. of Solid State Physics, 142432 Chernogolovka, Moscow distr., Russia,
kisel@issp.ac.ru

P. L. Kapitza confirmed the absolute and principal role of the confined (hard slit) walls for the superfluid flow (and extremely high thermal conductivity) in experiments on $^4\text{HeII}$ phase [1a]. Then L.D. Landau referred to the identical superfluid effect in water [1b] and to the thermo-mechanical effect in water and liquid HeII [2a], where two phase states (water and ice, liquid ^4He and HeII) differ in their density and stiffness (work hardening). Since that times attention was paid to the same properties of matter under work-hardening (WH), in micro- scale geometries [[2a,b]. Confinement of matter flow changes its structural, hydro-dynamical (the viscosity $\eta(300\text{K})$ of glycerin is 10^4 times smaller in nanoporous silica gel than in its bulk counterpart [2b]), ordering, thermal, chemical, diffusion, crystallization, condensation properties, phase transitions (PTs), etc.. For example, supercooling of liquids, melts, the identical superfluidity of water at room temperature has demonstrated in recent works on the floating water bridge phenomenon (which is a freestanding rope-shaped connection of pure liquid), formed under the influence of a high potential difference (~ 15 kV) due to partial water ordering (work hardening) in the form of anisotropic chains of H_2O molecules. This directly prompts to the localized flow of water. The work [3] confirms the close relationship between microhardness and thermal conductivity. The identical states of deformation are present in the superfluid and supersolid ^4He and Bose-Einstein condensates, ultracold gases of atoms, superconductors, cancer cells, nanoscale light confinement with narrow spectral linewidths [4], etc. Their deformation origin determines the domed dependences on interior and external effects due to deformation double cross shears. The energy spectrum for thermal excitations in liquid HeII, where the energy is plotted as a function of momentum ($T_\lambda > T > T = 1.1\text{K}$) [5], designates the atomic-scaled drag of He atom to move in the superfluid ^4He as a function of its displacement under external slow neutron particle. This upper yield point of deformation (before the so-called “roton-hollow” minimum of the energy curve in “quantum” theory of superfluidity [1b,2a]) is typical for high work-hardening stress-strain curves in comparison with softening of the smooth and lower flow stress curves at higher temperatures (liquid ^4He at 4.2K). Recent works directly evidence for all the features of standard jump-like dislocation deformation during superfluidity from cold atoms up to cosmology [C-L Hung et al. 10.1126/science.1237557], $^3\text{He-B}$: i) the peak velocity amplitude V versus the rise of driving force $F > F_0$ beyond its threshold value for a vibrating wire oscillating in $^3\text{He-B}$ increases and then decreases, ii) the oscillating frequency increases and then decreases too (Figs 2, 3); iii) the mechanical work hardening coefficient dF/dV decreases and then increases, iiiii) the length of this quasi-plateau region increases and then decreases (Fig. 3) [6]. Strict analysis of the above data, the key role of deformation localization in the pairing of electrons at low temperatures and the scaling of flow and fracture stresses in crystals from nuclear to global scale lengths from solid helium up to hard ceramics, metallic glasses, etc. confirm the same mechanisms of particle/wave plastic deformation at PTs.

- 1 Kapitza P.L. Zh Eksp. Teor. Fiz. 1941, v. 11, No 1, p. 1(a). Landau L. *Ibid.*, No 6, pp 592-614 (b).
2. Landau L. J. Phys. USSR. 1941, v. 5, p. 71(a); Han A. et al. J Appl. Phys. 2008, v. 104, p. 124908 (b).
3. Zhuze V.P., Kontorova T.A. Zh. Tekhn. Fiz., 1958, v. 28, p 1727.
4. Tsakmakidis K. Nature Materials, 2013, v. 12, No 4, p. 282; doi:10.1038/nmat3614
5. Yarnell, Arnold, Bendt, Kerr. Phys. Rev. Lett. 1958, v. 1, p. 9; Phys. Rev. 1959, v. 113, p. 1379.
6. Bradley D.I., Fisher S.N., Ganshin A. et al. J. Low Temp. Phys. 2013, v. 171, No 5/6, 582-588.

**KEY ROLE OF DEFORMATION IN THE PARADOXES OF QUANTUM
THEORY
Kisel V.P.**

Inst. of Solid State Physics ,142432 Chernogolovka, Moscow distr., Russia,
kisel@issp.ac.ru

So-called theory of quantum mechanics is one of the brightest achievements of mathematical approach in science but one full of physical puzzles and paradoxes. The base experiments of phenomenological quantum mechanics discovered the wave-particle duality of quasi-particles when their motion through double slits fired a wave interference at a distant screen due to their slit-particle-deformation-ways mismatch. But single particles followed only one route or the other but not both, as in the Compton's and photoelectric effects, etc. seem to behave as classical corpuscles [1]. From the very beginning of gradual *quasi-discrete finite* jumps of single dislocation-like shears, slip lines and bands in the body of particles beam are desynchronized (*non-coherent*) in time in front of mobile particles [2], decrease with temperature (T) under the constant external stress which is above the threshold one and increases with pulse duration [2]. This is so-called *locality* of mobile particles [1] at two-dimensional wave state of deformation in the form of random shear path lengths and primary slip plane. The increase of deformation stress and its duration comes up to damping of periodical slip narrow peak values under common external stress thus quasi-synchronizing the all dislocation-like jumps in front of particles (the so-called *non-locality* of mobile particles [1] under quasi-coherent three-dimensional wave state of developed deformation) in finite volume of composites – EMFs-electromagnetic fields, plasma, gases, liquids, solids, etc. with movable particles in the dense dislocation-like slip bands. The incoherent and quasi-coherent states are well described by the wave deformation [3,4], answer to de Broglie's correlation [4] and they are typical for a deformation of any state of matter. It is worth stressing that it is the deformation of any solids, glasses, liquids, plasma and gases, EMFs, etc. with mobile particles, that synchronizes their quasi-coherent (interdependent or the so-called *entanglement* between particles in sample body) wave motion and transforms it into much ordered state of matter. This property of 3D quasi-coherent state of sample body explains the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, the delayed choice gedanken experiments proposed by J.A. Wheeler and the other so-called “quantum” effects of the non-locality [1]. The wave state of deformation motion is inherent to both its initial [3] and developed [2-4] phases, but the initial phase is undeveloped and it is quickly damped [3]. The lowest finite values of dislocation-like deformation (phonons in solids [3b], plasmons in plasma, photons in EMFs) at T=0 determine the so-called “quantum zero-point vibrational energy”, the ultra-low-temperature limits of cryochemical reaction rates [5]. It is worth stressing that the all properties of cryochemical reactions [5] may be explained in the frames of the absence of quantum effects and of the identical mechanisms of deformation localization at low temperatures [3] with regard to urgent plastic deformation before fracture. These corroborate the above model.

1. Greenstein G., Zajonc A.G. The quantum challenge. Sudbury, Jones & Bartlett Publ., 2006
2. Kisel V.P., arXiv.org/abs/0905.4428v1 (2009); arXiv.org/abs/0009246v1 (2000).
3. Kisel V.P., Phys. Stat. Sol. (a). 1995, v. 149, No 1, pp. 61-68;
Kissel N.S., Kisel V.P. Mater. Sci. Eng A. 2001, v. 309-310, pp. 96–101 (b).
4. Zuev L.B., Int. J. Solids Struct. 2005, v. 42, pp 943-949.
5. Kiryukhin D.P., Barelko V.V., Barkalov I.M. Khimia Vysokikh Energii (High Energy Chemistry) 1999, v. 33, No 3, pp 163-176.

NEW EVIDENCE FOR THE KEY ROLE OF DEFORMATION IN BIOLOGY

Kisel V.P.

Inst. of Solid State Physics, 142432 Chernogolovka, Moscow distr., Russia,
kisel@issp.ac.ru

The Hayflick limit describes the fact that normal human cells divide only a finite number of times (around 50 or 60) when grown in a culture dish. This is a manifestation of gradual aging at the cellular level because cultures of normal cells invariably died off. This is in line with a persistent universal trend of amino acid gain and loss in protein evolution at molecular scale length [1] due to the gradual deformation hardening at interatomic/intermolecular successive phase transitions. Stem cells have revealed the greater deformability of cytoskeleton and nucleoskeleton in less differentiated cells, whereby their deformability generally decreases during differentiation to mature cells. This normal cell hardening is confirmed by the successive increase of their Young modulus which directly determines the evolution of species, cell origin, proliferation, differentiation and death due to dislocation-like defects mobility, drag and multiplication at the phase interfaces [2]. This is in line with the decrease of maximal life span and regeneration possibilities of living vegeto-animal species during their evolution due to developing differentiation and aging of body cells [2]. The identical deformation origin of cancer cells growth is confirmed by the same work hardening behavior: first, the matter increases its local Young modulus of matter due to severe work hardening under shrinkage at cooling, hard coating of samples, irradiation, etc., work hardening of biological tissues under stress and aging [2], second, then work softening of matter in sharp localization of flow due to cross-slip of dislocation-like defects at small matrix defects: the Cooper electron pairs in superconductors, the connection of definite (oncogenic) genes in DNA, etc.[2].

Recent work [3] has shown that a functional diversity of heterogeneous tumor cells within colorectal tumors cannot be explained by genetic difference alone. Copy number alterations of stable clones with genetic diversity have shown that dynamics of cancer growth are variable (Fig 2A in [3]):--the wave-growth rate V of fixed volume of tumors is identical to the wave rate of discrete micro- and macroscopic deformation in solids [2], the wave and discrete rate at which stars are forming [4], etc. - the spread of initial data points of V_1 decreases with the rise of V_1 is similar to the dislocations path lengths in solids - the rise of V leads to the growth of maximum jump of V and increase of its frequency which is identical to the initial stepped behavior of deformation in solids -the serial transplantations of fixed number of cancer cells to the new mice of the same lineage are adequate to the wave deformation experiments in on solids and point to the key role of dislocation-like behavior in phase interface of tumor-normal cells [2]. In this case the origin of localized cancer cell growth in normal work hardened cells is concerned with the dome-shaped dependences of double cross-slipped dislocation-like defects in cells on concentration of impurities and defects (their type, size and form), particle and electromagnetic field dose and rate of irradiation, predeformation (aging), etc. [2].

1. Zuckerkandl E., Derancourt J., Vogel H. J. Mol. Biol. 1971, v. 59, pp. 473-490;
2. Kisel V.P., /arXiv.org/abs/0905.4428v1 (2009).
3. Kreso A., O'Brien C.A., van Galen P. et al. Science, 2013, v.339, No 6119, pp 543-548.
4. Wolfe S.A., Pisano D.J., Lockman F.J. et al. Nature, 2013, v. 497, pp 224-226.

ПРЯМОЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ДЕФЕКТОВ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ В ТРЁХМЕРНЫХ И КВАЗИДВУМЕРНЫХ МАГНЕТИКАХ

Кабанов Ю.П.

Институт Физики Твёрдого тела, Черноголовка, Россия

kabanov@issp.ac.ru

Зарождение и движение дефектов различной размерности в спиновой подсистеме кристаллической решётки и их влияние на её макроскопические свойства по-прежнему вызывает большой фундаментальный и технологический интерес. Одним из наибольших интересов является прямое экспериментальное изучение элементарных актов на различных этапах перемагничивания нового класса магнитных многослойных материалов с искусственно созданными граничными условиями на поверхности раздела. Спиновое взаимодействие через интерфейс между слоями гетерофазной квазидвумерной структуры, которые обладают различным магнитным порядком, приводит к нарушению магнитной симметрии с возникновением специфической доменной границы (ДГ) и к образованию однонаправленной анизотропии. Это означает, что противоположные направления спинов энергетически не эквивалентны. Поэтому такие материалы демонстрируют ряд уникальных свойств, которые не наблюдаются в объёмных магнетиках. В частности их процесс перемагничивания характеризуется смещённой и сильно уширенной петлёй гистерезиса. Современная тенденция микроминиатюризации элементов вычислительной техники и различных магнитных датчиков, созданных на основе гетерофазных структур, с уменьшением их до наноскопических размеров, приводит к увеличению влияния роли краевых эффектов на макроскопические характеристики этих устройств и требует более глубокое изучение этого влияния.

В этой работе будут показаны результаты впервые проведённого магнитооптического экспериментального изучения элементарных актов процесса перемагничивания пространственно модулированной гетероструктуры, состоящей из плёнки сплошного ферромагнетика (ФМ) наноразмерной толщины, обменно-связанной с полосами антиферромагнитной (АФМ) плёнки микроскопической ширины, образующими квадратную сетку. Обнаружено, что топологически стабильные ДГ, возникающие в ФМ плёнке вдоль краёв антиферромагнитных полос и связанные с ними магнитоэлектрические поля, обуславливают возникновение ряда новых явлений и не предсказывавшихся теоретически особенностей перемагничивания ферромагнитной плёнки. Показано, что (несмотря на относительно большой период сетки АФМ – 100мкм) антиферромагнетик приводит к асимметрии перемагничивания не только в местах ФМ плёнки под полосками АФМ, но и соседних её квадратных областей не покрытых АФМ. Выявлены координальные различия в перемагничивании взаимно перпендикулярных полосок обменно-связанных ФМ/АФМ структур. В полосках, перпендикулярных внешнему полю, перемагничивание происходит за счёт движения ДГ и некогерентного вращения намагниченности в их микрообластях. Тогда, как в полосках параллельных внешнему полю происходит неоднородное вращение в субмикронных и наноразмерных областях при неподвижных топологических доменных границах. Определена особая роль в перемагничивании решётки её узлов. Оказалось, что при увеличении поля они перемагничиваются в последнюю очередь, а при переходе из насыщенного состояния узлы сетки являются местами зарождения доменов в её вертикальных полосах. Обсуждаются вероятные причины обнаруженных явлений.

САПФИРОВЫЕ ПОДЛОЖКИ С РЕГУЛЯРНЫМ РЕЛЬЕФОМ НА ПОВЕРХНОСТИ

¹В.М. Каневский, ¹А.В. Буташин, ¹А.Э. Муслимов, ²В.А.Бабаев, ³Е.Вовк.

¹ ФГБУН ИК РАН, 119333, Ленинский пр-т, 59, Москва, amuslimov@mail.ru

² ДГУ, 367000, ул. Гаджиева, д. 43-а, Махачкала,

³ Институт монокристаллов НАН Украины, 61001, г.Харьков, пр. Ленина 60.

Применение кристаллических подложек с регулярным микрорельефом позволяет значительно сократить плотность дислокаций в гетероэпитаксиальных пленках GaN на сапфире, например [1]. Такой микрорельеф обычно создается методом фотолитографии с последующим травлением поверхности подложки. Регулярный рельеф в форме параллельных террас и ступеней нанометровых размеров может быть создан отжигом на воздухе при температурах $\geq 1000^\circ\text{C}$ подложек сапфира, разориентированных относительно базисной грани (Рис. 1а). Применение таких подложек с регулярным нанорельефом улучшает кристаллическое совершенство гетероэпитаксиальных пленок CdTe [2], и позволяет сформировать структурированные ансамбли металлических наночастиц [3].

В данной работе регулярный микрорельеф формировался вакуумным напылением металла Al на поверхность подложки сапфира через маску с размерами отверстий $0,2 \div 40$ мкм и последующим окислением (Рис. 1б). Предварительные исследования, проведенные методами дифракции быстрых электронов и просвечивающей электронной микроскопии, показали монокристалличность получаемых регулярных микроструктур. Их латеральный размер определяется размером отверстий в маске. Высота микроструктур на данный момент не превышает 20 нм, так как сильно зависит от диффузионной длины атомов кислорода в слое Al.

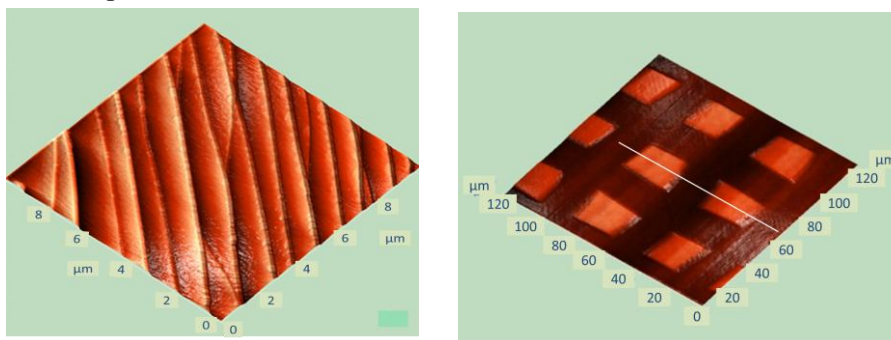


Рис. 1. АСМ-изображения поверхности нанорельефных (а) и микрорельефных (б) подложек лейкосапфира.

В работе продемонстрирована возможность получения микрорельефных подложек лейкосапфира без использования техники фотолитографии и травления. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №13-02-01065а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. H. Kim, H. Ruh, Y. K. Noh, et. al. // J. Appl. Phys. 2010, V. 107, 063501.
2. V. I. Mikhailov, A. V. Butashin, V. M. Kanevsky, et.al. // J. Surf. Invest. 2011, Vol. 5, p. 595.
3. A. E. Muslimov, A. V. Butashin, A. A. Konovko, et. al. // Cryst Reports, 2012, Vol. 57, p. 415.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ НАНОСТЕРЖНЕЙ ОКСИДА ЦИНКА НА ПОДЛОЖКАХ (0001) Al_2O_3

¹В.М. Каневский, ¹А.В. Буташин, ¹А.Э. Муслимов,

²В.А.Бабаев, ²А.М. Исмаилов, ²М.Х.Рабданов.

¹ ФГБУН ИК РАН, 119333, Ленинский пр-т, 59, Москва, amuslimov@mail.ru

² ДГУ, 367000, ул. Гаджиева, д. 43-а, Махачкала, vagif05babaev@mail.ru

Наностержни ZnO находят сегодня практическое применение в оптоэлектронике, газо- и фотосенсорной технике, фотовольтаике, холодной автоэлектронной эмиссии, микроэлектронике. К настоящему времени в научной литературе накоплен большой объем информации о методах получения наностержней, однако начальные стадии зарождения остаются малоизученными. В данной работе исследовались начальные стадии каталитического и самокаталитического зарождения наностержней ZnO на сапфировых подложках ориентации (0001).

В качестве катализатора были нами использованы частицы золота, диаметром до 300 нм. Рост наностержней осуществлялся методом магнетронного распыления мишени ZnO на лабораторной установке с контролем процесса роста с помощью электронографа (метод дифракции быстрых электронов). Первичные зародыши представляли собой пирамидальные частицы размерами до 300 нм, которые в дальнейшем разрастались в гексагональные наностержни (рис.1,а). О наличии гладких граней у пирамидальных зародышей свидетельствуют характерные рефлексы на электронограммах. В самокаталитическом режиме использовались нанокластеры оксида цинка размерами до 200 нм, хаотично распыляемые с мишени в режиме сильного тока. На начальном этапе нанокластеры трансформировались в пирамидальные структуры (рис.1,б), однако дальнейший нормальный рост тормозился боковой нуклеацией и латеральным разрастанием. В процессе разрастания частицы приобретали гексагональную форму.

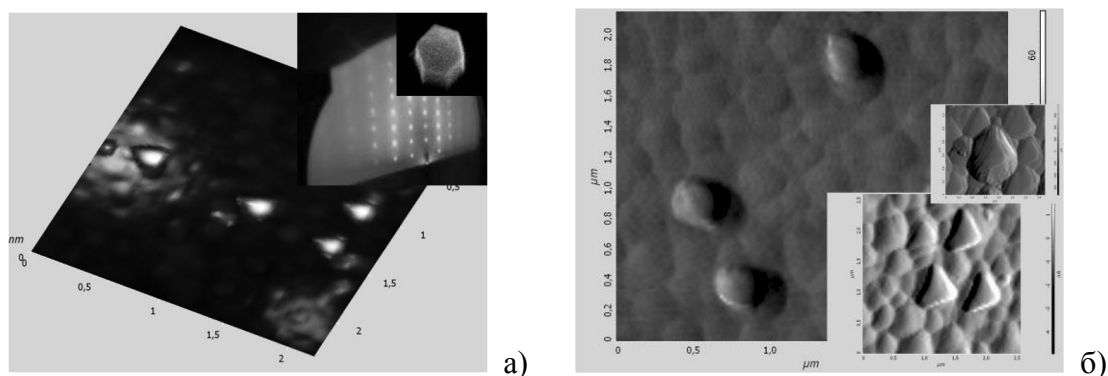


Рис. 1. АСМ-изображения роста наностержней оксида цинка на частицах золота (а) и боковой нуклеации частиц оксида цинка при самокаталитическом росте (б).

ОСОБЕННОСТИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК ZnO НА ПОДЛОЖКАХ (0001) Al₂O₃

¹В.М. Каневский, ¹А.В. Буташин, ¹А.Э. Муслимов,

²В.А.Бабаев, ²А.М. Исмаилов, ²М.Х.Рабаданов

¹ ФГБУН ИК РАН, 119333, Ленинский пр-т, 59, Москва, amuslimov@mail.ru

² ДГУ, 367000, ул. Гаджиева, д. 43-а, Махачкала, vagif05babaev@mail.ru

Кристаллы ZnO являются пьезоэлектрическим и люминесцентным материалом, перспективным для изготовления детекторов и сенсоров различных типов, а также рассматриваются в качестве альтернативных сапфировым подложкам в эпитаксиальных технологиях гетероструктур на основе GaN. Получение объемных кристаллов ZnO из расплава осложнено интенсивным испарением материала. Альтернативой объёмным кристаллам являются пленки ZnO, получаемые при росте из газовой фазы на различных кристаллических подложках. В данной работе исследовалось влияние режимов термической обработки сапфировых подложек ориентации (0001) на структуру эпитаксиальных пленок ZnO.

Плётки толщиной до 1 мкм получали методом магнетронного распыления мишени ZnO на лабораторной установке с контролем процесса роста с помощью электронографа (метод дифракции быстрых электронов). Установлено, что на сапфировых подложках, не подвергавшихся отжигу или отожженных в вакууме ($P < 0.13$ Па), растёт блочная текстурированная пленка ZnO. На подложках, отожженных на воздухе при температуре $\geq 1000^{\circ}\text{C}$, росли эпитаксиальные пленки ZnO с ориентацией кристаллитов плоскостью (0001) параллельно подложке (рис.1). В докладе обсуждаются возможные причины наблюдаемых различий в росте эпитаксиальных пленок ZnO на (0001) сапфировых подложках: наличие системы атомно-гладких террас и ступеней на поверхности подложки, нарушение стехиометрии кристаллов сапфира при отжиге в вакууме и т.п.

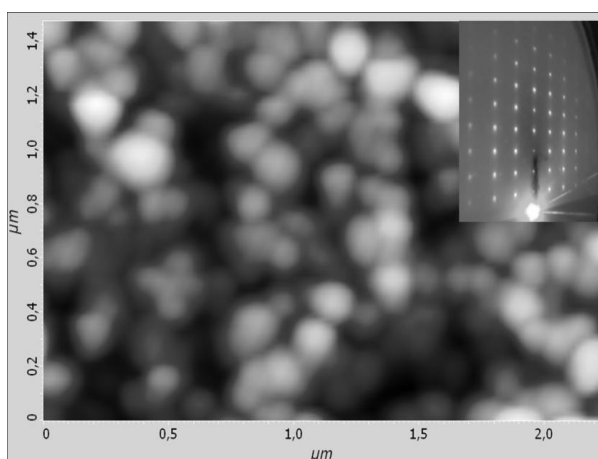


Рис. 1. АСМ-изображения (топография поверхности эпитаксиальной пленки ZnO на (0001) сапфировой подложке и электронограмма пленки (на врезке).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №13-02-01065а.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ СТРУКТУРНЫХ КЛАСТЕРОВ НА ТВЕРДОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ФЛЮОРИТОВОЙ ФАЗЫ $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$

**Каримов Д. Н., Кривандина Е. А., Бережкова Г. В., Марычев М. О.*,
Сорокин Н. И., Сульянова Е. А., Соболев Б. П.**

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

** Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия*

e-mail: fluorides@ns.crys.ras.ru

Кристаллы MF_2 ($M = Ca, Sr, Ba$) семейства флюорита (пр.гр. $Fm\bar{3}m$) имеют низкую твердость и совершенную спайность по кристаллографическим плоскостям (111). Усложнение их состава путем введения редкоземельных ионов приводит к нарушению стехиометрии и к позитивному изменению твердости [1, 2]. Эффект возрастания твердости H_{μ} кристаллов $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ (R – редкоземельные элементы, $0 < x \leq 0.5$) является следствием их "композитного" характера, где роль "второй фазы" играют структурные кластеры нанометровых линейных размеров, содержащие редкоземельные катионы [2]. Цель работы - изучение влияния концентрации структурных кластеров на микротвердость H_M монокристаллов флюоритовой фазы $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$.

Нестехиометрические кристаллы $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ ($0 < x \leq 0.47$) выращивались методом Бриджмена в атмосфере гелия и продуктов пиролиза тефлона. Рентгеноструктурные исследования кристаллов проведены на дифрактометре CAD-4 (Enraf Nonius, Mo K_{α} -излучении) при 295 К. Результаты измерений микротвердости H_{μ} при комнатной температуре на приборах ПМТ-3 (Москва) и Duramin-5 (Нижний Новгород) представлены на рис. 1.

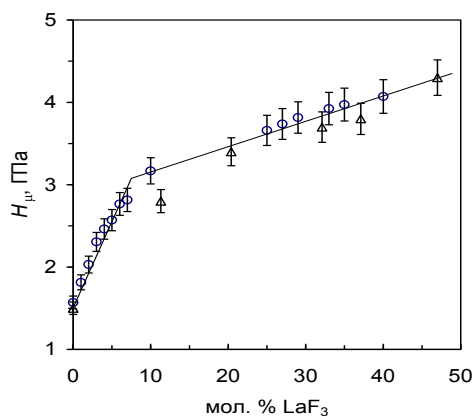


Рис. 1. Зависимость H_M кристаллов $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ от состава (\circ – ПМТ-3, Δ – Duramin-5).

Обнаружено, что образование 3D-сетки кластеров $\{La_4F_{26}\}$ находит отражение появлением излома на концентрационной зависимости твердости $H_{\mu}(x)$ в области $x = x_0$.

Существенное возрастание H_{μ} кристаллов $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ по сравнению со SrF_2 обусловлено образованием (в результате взаимодействия точечных дефектов) тетраэдрических $\{La_4F_{26}\}$ кластеров [3].

С ростом концентрации LaF_3 (x) в объеме нестехиометрических кристаллов $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ происходит замена кластерами $\{La_4F_{26}\}$ матричных фрагментов $\{Sr_4F_{23}\}$. Результаты электрофизических измерений [4] указывают, что при $x_0 \approx 0.07 - 0.08$ в кристаллах $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ образуется трехмерная 3D-сетка "дефектных областей", ядрами которых являются кластеры $\{La_4F_{26}\}$.

- [1] Аронова А.М., Бережкова Г.В. и др. // Физич. кристаллография. М.: Наука. 1992. С. 151.
- [2] Грязнов М.Ю., Шотин С.В. и др. // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 6. С. 1169.
- [3] Мурадян Л.А., Максимов Б.А. и др. // Координац. химия. 1986. Т. 12. № 10. С. 1398.
- [4] Сорокин Н. И. // Кристаллография. 1993. Т. 38. № 1. С. 233.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ КИСЛОРОДА НА ПРОПУСКАНИЕ И ИОННУЮ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ CeF_3

Каримов Д. Н., Сорокин Н. И., Соболев Б. П.

*Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия
e-mail: fluorides@ns.crys.ras.ru*

Кристаллы CeF_3 (структурный тип тисонита LaF_3) - перспективные скинтилляторы и среднетемпературные (100 – 200 °С) фтор-проводящие твердые электролиты. Пропускание кристаллов CeF_3 в коротковолновой области спектра ограничено наличием неконтролируемых примесей. Основной анионной примесью в CeF_3 является кислород, влияющий на пропускание и ионный транспорт. При высоких концентрациях кислорода образуется оксидная фаза, поглощающая и рассеивающая свет. Фтор-ионная проводимость (σ) вызывается термо-стимулированными дефектами Шоттки с подвижными вакансиями фтора V_F^+ .

Цель работы – проследить влияние кислорода в кристаллах CeF_3 на оптическое пропускание $T(\lambda)$ и температурную зависимость $\sigma(T)$.

Кристаллы CeF_3 получены из расплава методом Бриджмена из реактива марки "х. ч.". Распределение примеси кислорода неоднородно по объему кристалла. Изучены разные по рассеянию света зоны одного кристалла.

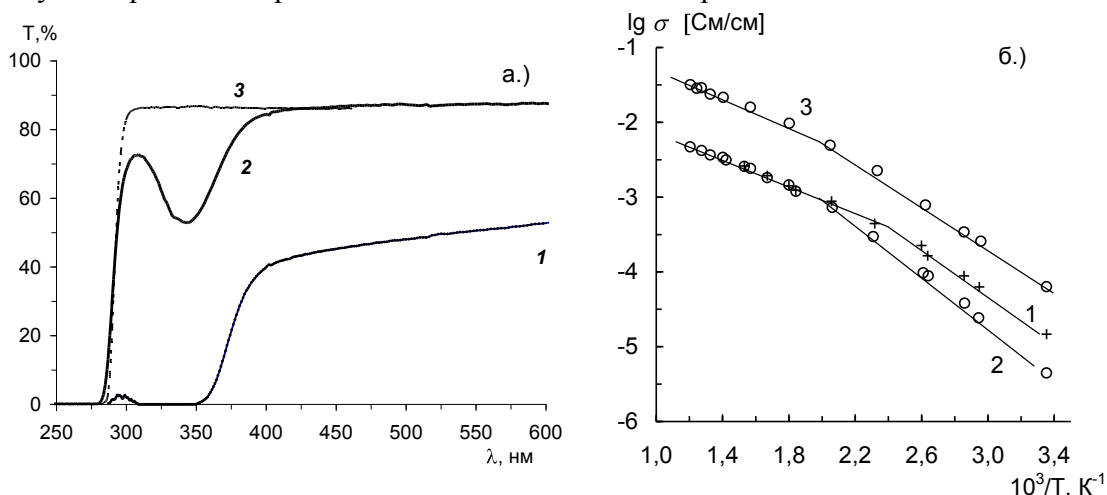


Рис. Спектры оптического пропускания (а) $T(\lambda)$ и (б) ионная проводимость $\sigma(T)$ кристаллов CeF_3 : 1, 2 – образцы, насыщенные кислородом; 3 – эталонный образец, полученный в условиях подавления пирогидролита.

Установлено сильное влияние кислорода на спектры $T(\lambda)$ кристаллов CeF_3 (рис. а-1,2). Для сравнения приведена зависимость $T(\lambda)$ для кристалла эталонного, радиационно-стойкого CeF_3 [1], выращенного в условиях подавления пирогидролита (рис. а-3). Наличие полосы поглощения при 330 нм и ее интенсивность позволяют качественно судить о содержании кислорода в кристаллах CeF_3 [2].

На проводимость σ образцов CeF_3 примесь кислорода также оказывает значительное влияние (рис. б-1,2). Значения σ при 500 К насыщенных кислородом образцов (рис. б-1,2) по сравнению с эталонным образцом (рис. б-3) снижаются в ~ 10 раз. По-видимому, вакансии V_F^+ , появляющиеся в результате замещений O^{2-} на 2F^- , находятся в связанном (ассоциированном) состоянии с кислородным центром и не принимают участия в ионном транспорте.

[1] Kobayashi M., Ishii M., Krivandina E.A., et al. // Japan. KEK. Preprint № 90-140. Nov. 1990. 14 p. [2] Autray E., Vaccaro S., Beckers. T et al. // Nucl. Instrum. and Methods in Physics Research. Sec. A. 1996. V. 383. № 2-3. P. 367-390.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $\text{Sr}_{0.7-x}\text{Ba}_x\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ ($0 \leq x \leq 0.7$) СО СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА

Каримов Д. Н., Сорокин Н. И., Сульянова Е. А., Соболев Б. П.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия
e-mail: fluorides@ns.crys.ras.ru

Среди нестехиометрических фаз со структурой типа флюорита (CaF_2) в системах $\text{MF}_2 - \text{RF}_3$ ($M = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$; $R - \text{PЗЭ}$) наиболее высокой ионной проводимостью (σ) обладают флюоритовые фазы в системах $\text{SrF}_2 - \text{LaF}_3$ [1] и $\text{BaF}_2 - \text{LaF}_3$ [2]. Большое различие ионных радиусов матричных Ba^{2+} (1.42 Å для к. ч. = 8) и Sr^{2+} (1.26 Å) приводит к разному типу дефектной (кластерной) структуры $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$ и $\text{Ba}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$.

С ростом содержания LaF_3 проводимость σ кристаллов $\text{M}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$ ($M = \text{Sr}, \text{Ba}$) существенно возрастает, достигая максимальных значений при $x = 0.3 - 0.5$ [1, 2]. В [3] обнаружена более высокая σ у кристаллов трехкомпонентного состава $\text{Sr}_{0.35}\text{Ba}_{0.35}\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ (по сравнению с двухкомпонентными $\text{M}_{0.7}\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$, где $M = \text{Sr}, \text{Ba}$).

Поставлена задача получения концентрационной серии трехкомпонентных кристаллов $\text{Sr}_{0.7-x}\text{Ba}_x\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ ($0 \leq x \leq 0.7$) и изучение зависимости ионной проводимости от состава кристаллов.

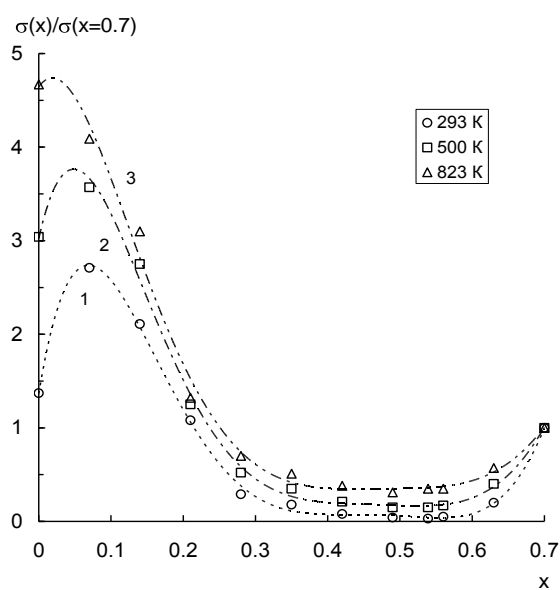


Рис. Проводимость $\text{Sr}_{0.7-x}\text{Ba}_x\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ ($0 \leq x \leq 0.7$) при разных температурах, нормированная на σ кристалла $\text{Ba}_{0.7}\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ ($x = 0.7$) в 2.7 раза. С ростом температуры относительная величина максимума $\sigma(x_{\text{max}})/\sigma(x = 0.7)$ возрастает в ~ 4 раза и состав $x_{\text{max}} \rightarrow 0$.

Кристаллы $\text{Sr}_{0.7-x}\text{Ba}_x\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ выращены из расплава методом Бриджмена с использованием фторирующей атмосферы (продукты пиролиза тефлона).

Содержание дифторидов в кристаллах определялось по параметру кристаллической решетки из уравнения $a(x) = 5.841 + 0.383x$, Å (построенного по данным [4] с учетом правила аддитивности) и рентгено-флуоресцентным методом.

Зависимость σ кристаллов $\text{Sr}_{0.7-x}\text{Ba}_x\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ от состава (x) показана на рис. Высокая σ монокристаллов определяется интенсивной миграцией F^- . При 293 К максимальная σ наблюдается для состава $x_{\text{max}} \approx 0.07$ и превышает проводимость монокристалла $\text{Ba}_{0.7}\text{La}_{0.3}\text{F}_{2.3}$ ($x = 0.7$) в 2.7 раза.

С ростом температуры относительная величина максимума $\sigma(x_{\text{max}})/\sigma(x = 0.7)$ возрастает в ~ 4 раза и состав $x_{\text{max}} \rightarrow 0$.

- [1] Иванов-Шуц А.К., Сорокин Н.И. и др. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 6. С. 1748–1753.
- [2] Warnekar K.E.D., Van Koesveld J.L. et al. // Solid State Ionics. 1981. V. 2. P. 145–154
- [3] Трновцова В., Федоров П.П. и др. // Электрохимия. 2011. Т. 47, № 6, С. 683–686.
- [4] Федоров П.П., Соболев Б.П. // Кристаллография. 1992. Т. 37. №. 5. С. 1210–1219.

РОСТ КРИСТАЛЛОВ, ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И СТРУКТУРА УПОРЯДОЧЕННОЙ ФАЗЫ $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$

Каримов Д. Н., Сорокин Н. И., Сульянова Е. А., Соболев Б. П.

Институт кристаллографии РАН, Москва

e-mail: fluorides@ns.crys.ras.ru

Сравнительные исследования свойств и структуры нестехиометрических флюоритовых фаз $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ ($M = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$; $R - \text{PЗЭ}$) и упорядоченных фаз $M_mR_nF_{2m+3n}$ с производной структурой представляют интерес для выяснения структурных механизмов ионной проводимости (σ). В структуре упорядоченных фаз кластеры дефектов трансформируются в строительные блоки. Их структура практически не изучена из-за трудности получения монокристаллов.

Цель работы – получение кристаллов упорядоченной фазы $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ (42.86 % LuF_3) и изучение их проводимости σ в связи с дефектной структурой.

Кристаллы $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ получены из расплава направленной кристаллизацией (метод Бриджмена) в атмосфере гелия и продуктов пиролиза тефлона. В продукте кристаллизации преобладает фаза $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ с тригонально искаженной решеткой флюорита, пр. гр. $R\bar{3}$, $Z = 6$ и параметрами гексагональной ячейки $a = 10.615$, $c = 19.547 \text{ \AA}$ в смеси с небольшим количеством ромбического $\beta\text{-LuF}_3$.

Рентгеноструктурным анализом кристаллов $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ [1] выявлены структурные блоки, являющиеся октаэдро-кубическими кластерами $\{\text{Sr}_8[\text{Lu}_6\text{F}_{37}]\text{F}_{32}\}$, упорядоченно замещающими в матрице SrF_2 фрагменты $\{\text{Sr}_{14}\text{F}_{64}\}$. Для зарядовой компенсации в кубических пустотах $\{\text{F}_8\}$ флюоритового мотива появляются анионы за пределами кластера: $\{\text{Sr}_{14}\text{F}_{64}\}^{36-} \rightarrow \{\text{Sr}_8[\text{Lu}_6\text{F}_{37}]\text{F}_{32}\}^{35-} + \text{F}_{\text{int}}^-$.

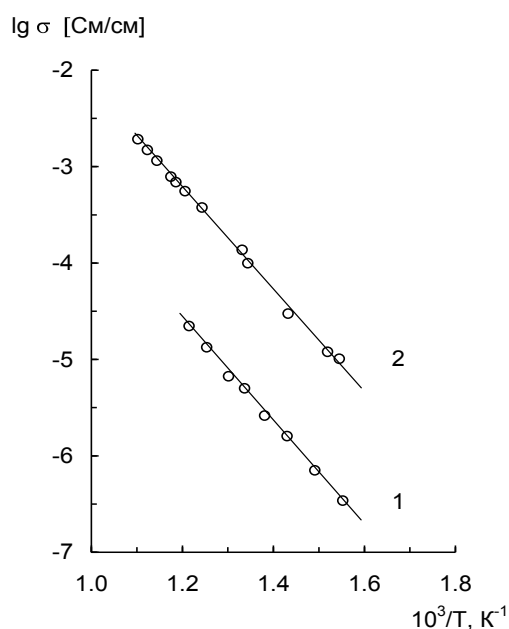


Рис. Температурные зависимости $\sigma(T)$ кристаллов $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ (1) и $\text{Sr}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{F}_{2.2}$ (2).

Для систем $\text{SrF}_2 - \text{RF}_3$ ($R - \text{PЗЭ}$) впервые измерена проводимость σ упорядоченной фазы $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ (метод импедансной спектроскопии $5-5 \times 10^5$ Гц в вакууме ~ 1 Па) при $370 - 550 \text{ }^\circ\text{C}$.

Температурная зависимость $\sigma(T)$ подчиняется закону Аррениуса с энтальпией активации ионного транспорта $\Delta H = 1.12$ эВ (см. рис). При $400 \text{ }^\circ\text{C}$ проводимость $\sigma_{\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}}$ составляет 7×10^{-7} См/см, что на ~ 1.5 порядка меньше σ нестехиометрической фазы $\text{Sr}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{F}_{2.2}$.

Таким образом, несмотря на рост содержания LuF_3 в $\text{Sr}_4\text{Lu}_3\text{F}_{17}$ вдвое по сравнению с $\text{Sr}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{F}_{2.2}$, структурное упорядочение флюоритовой нестехиометрической фазы $\text{Sr}_{1-x}\text{Lu}_x\text{F}_{2+x}$ приводит к существенному уменьшению ионной проводимости.

[1] Сульянова Е.А., Молчанов В.Н., Верин И.А. и др. // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 3. С. 544.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ M_s СПЛАВА СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА Fe_3Pt ОТ СТЕПЕНИ УПОРЯДОЧЕНИЯ

Кащенко М.П., Чащина В.Г.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия

mpk46@mail.ru

В динамической теории мартенситных превращений (МП) в сплавах железа [1, 2], не обладающих дальним порядком, температура M_s начала МП рассматривается в качестве оптимальной для заселения состояний d - электронов, активных в генерации волн смещений атомов, входящих в состав управляющего волнового процесса (УВП). В процессе заселения активную роль играют процессы рассеяния вида $d - s - d$, где состояния s - электронов обладают значительным затуханием Γ . В случае крупных зерен с диаметрами, превышающими критическое значение по порядку величины, $M_s \sim |\epsilon_d - \mu| (1 - \Gamma'_e)^P / k_B$, $\Gamma'_e = \hbar(\Gamma(c) + \Gamma_{tw})/2 |\epsilon_d - \mu|$, где k_B - константа Больцмана, \hbar - постоянная Планка, ϵ_d - средняя энергия d - электронов в приемлемом энергетическом интервале в окрестности уровня Ферми μ , Γ_{tw} - вклад в Γ , связанный с рассеянием на неоднородностях с размером порядка толщины двойника превращения, а показатель степени P (в зависимости от принятой аппроксимации зависящий от температуры вклада в Γ) принадлежит интервалу $1/2 \leq p \leq 5$. В отсутствие упорядочения вклад $\Gamma_s(c)$ рассеяния на примесях с концентрацией c в Γ пропорционален $c(1-c)$. Очевидно, что по мере роста упорядочения величина $\Gamma(c)$ должна снижаться. Но упорядочение должно сопровождаться и обязательной перестройкой зонной структуры, что сопряжено с изменением параметра $|\epsilon_d - \mu|$. Энергии ϵ_d обычно находятся в окрестности пика плотности состояний, поэтому ожидаемым является понижение параметра $|\epsilon_d - \mu|$, что может вести к снижению M_s , несмотря на снижение $\Gamma_s(c)$. В частности, важный предельный случай $M_s=0$ при $\Gamma(c)=0$ реализуется, если $|\epsilon_d - \mu| = \hbar \Gamma_{tw}/2$.

Для бинарного сплава замещения с компонентами A и B концентрации c элемента B соответствует состав $A_{1-c}B_c$. При упорядочении в ГЦК решетке по типу Fe_3Pt первой подрешеткой считаются вершины кубов, а второй - середины граней кубов. Полагая для Pt среднюю концентрацию c неизменной при упорядочении и обозначая η - параметр порядка, имеем: $c_1 = c + 3\eta$, $c_2 = c - \eta$, $\eta = (c_1 + c_2 - 2c)/2$, $c = (c_1 + c_2 - 2\eta)/2$. Ясно, что при полном упорядочении $c_2=0$, $c=1/4$, $\eta=1/4$, $c_1=1$, а при беспорядке $c_1=c=c_2=c$, $\eta=0$. Тогда для $\Gamma_s(c)$ при $c=1/4$ и параметре $0 \leq \eta \leq 1/4$ имеем: $\Gamma_s(c) \sim (1-4\eta)(3-8\eta)/16$.

Проводится обсуждение данных [3], демонстрирующих высокий темп снижения M_s при увеличении η (времени упорядочения при $550^\circ C$). Для кристаллов с толщиной двойников порядка 20 параметров решетки в предельном случае $\eta=1/4$, $M_s=0$ К получена оценка $|\epsilon_d - \mu| \approx 0.022$ эВ, которая на порядок меньше по сравнению со значением, принимаемым для неупорядоченного сплава.

Список литературы

1. Кащенко М.П., Чащина В.Г. // УФН. 2011. Т. 181. № 4. С. 345–364.
2. Кащенко М.П., В.Г. Чащина. Динамическая модель γ - α мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна / - М. -Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. - 133 с.
3. Umamoto M., Wayman C.M. //Metall. Trans. 1978. V. 9A. № 7. P. 891–897.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ФОРМИРОВАНИЯ ДВОЙНИКОВ II РОДА ПРИ В2-В19' МАРТЕНСИТНОМ ПРЕВРАЩЕНИИ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Кащенко М.П., Чащина В.Г.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия

mpk46@mail.ru

В рамках динамической теории [1, 2], базирующейся на синтезе концепций гетерогенного зарождения и волнового роста мартенситных кристаллов, анализируется возможность описания ориентаций границ двойников II типа при В2-В19' превращении (границам двойников I типа отвечает рациональное описание ориентаций границ при распространении относительно коротковолновых смещений [1, 2]). Согласно данным [3], часто наблюдаемые двойники превращения при контактах кристаллов (например, в пирамидально сочлененных кристаллах фазы В19') относятся ко II типу. Обсуждаются варианты с ориентировками границ $\{0\ 2\ 2\}_{B2}$, близкие при целочисленном описании к границам $\{0\ 2\ 2\}_{B2} \parallel \{0.72\ 1\ 1\}$ В19' (точной ориентации $(1\ \bar{2}\ 0)_{B2}$ границы двойника в базисе В19 соответствует плоскость $(1\ -\sqrt{2}\ -\sqrt{2})_{B19}$ с иррациональными индексами). По-видимому, более уместно связывать двойники II типа не с иррациональностью описания, а со спецификой начальной стадии формирования. Действительно, согласно проведенному анализу в рамках парадигмы, акцентирующей внимание на области начального возбужденного состояния, место старта роста двойниковой пластинки II типа локализуется в области вблизи контакта двух кристаллов В19 в условиях потери устойчивости орторомбической фазы В19 к моноклинному искажению. Двойники же превращения при $\gamma - \alpha$ мартенситном превращении в сплавах железа [1, 2] начинают формирование в центральной зоне волнового фронта, образующего мартенситный кристалл, и описываются относительно коротковолновыми s - волнами, бегущими вдоль осей симметрии четвертого порядка исходной γ - фазы.

К наблюдаемым ориентациям границ двойников приводит учет поля деформаций в области парных контактов кристаллов, характерных для самоаккомодированных групп с общими полюсами $\langle 001 \rangle_{B2}$. Анализируется суперпозиционное упругое поле пары кристаллов. При этом важную роль играют вклады моноклинного сдвига. В частности показано, что расчет ориентаций границ двойников II типа вида $\{1\ 0\ h\}_{B2}$ можно провести, используя пары волн с ортогональными волновыми векторами, строго лежащими в одной из плоскостей симметрии $\{100\}_{B2}$ и имеющими равные скорости распространения. При этом направления распространения волн, выбираемые в первом приближении вдоль собственных векторов суперпозиционного поля, существенно отклоняются от осей симметрии $\langle 001 \rangle_{B2}$. Проводится обсуждение и других результатов.

Список литературы

1. Кащенко М.П., Чащина В.Г. // УФН. 2011. Т. 181. № 4. С. 345–364.
2. Кащенко М.П. В.Г. Чащина. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при γ - α превращении в сплавах железа / – Екатеринбург: УГЛТУ, 2009. – 98 с.
3. Miyazaki S., Otsuka K., Wayman C.M. // Acta metall. 1989. V.37. N. 7. P. 1873-1884.

НОВЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ СВЕРХРЕШЕТКИ НА ОСНОВЕ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА. ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ

**Квашнин Д. Г.^{1,2}, Сорокин П. Б.^{1,2,3}, Vancsó P.⁴, Márk G. I.⁴,
Квашнина О. П.⁵ и Чернозатонский Л. А.¹**

¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, г. Москва, Россия

²Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС",
Москва, Россия

³Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов,
Москва, г. Троицк, Россия

⁴Research Centre for Natural Sciences, Institute for Technical Physics and Materials
Science, г. Будапешт, Венгрия

⁵Российский национальный исследовательский медицинский университет
имени Н. И. Пирогова, г. Москва, Россия
e-mail: cvashnini@gmail.com

В последнее время основной темой для обсуждения научным сообществом является двумерный материал графен и структуры на его основе, такие как двухслойный графен. В силу уникальных механических, электронных и оптических свойств графен является перспективной основой для создания нанoeлектронных устройств. Однако недостатком графена является его полуметаллическая проводимость и отсутствие запрещенной зоны, что делает его не пригодным для непосредственного применения в нанoeлектронике. Одним из интересных способов получить запрещенную зону в графене является использование двухслойного графена в соединении с электрическим и магнитным приложенными полями.

В данной работе было проведено исследование наноструктур на основе двухслойного графена с периодически расположенными гексагональными дырками. Предполагается, что после того, как в идеальной кристаллической структуре двухслойного графена были сделаны гексагональные дырки, появляются области сильной напряженности, вследствие образования не скомпенсированных связей. В результате чего, происходит соединение границ дырок между слоями.

Таким образом, в представленной работе была проведена классификация данных объектов, проведено исследование их стабильности с энергетической точки зрения. Показано, что с увеличением расстояние между дырками структура таких объектов переходит в структуру двухслойного графена с упаковкой "АВ" без образования связей между слоями.

Так же был проведен расчет электронных свойств в зависимости от геометрических параметров исследуемых объектов, и было проведено исследования распространения волнового пакета через данные объекты, с целью изучить процесс распространения и рассеяния электронов, проходящих через гексагональную сетку исследуемых объектов.

Работа выполнена при поддержке российского фонда фундаментальных исследований (№11-02-01453-а), Министерства образования и науки Российской Федерации (приказ №948 от 21 ноября 2012г.) а так же при поддержке международного исследовательского проекта по обмену сотрудниками FAEMCAR (FP7-PEOPLE-2012-IRSES). Все вычисления, проведенные в работе, выполнены с использованием ресурсов межведомственного суперкомпьютерного центра Академии наук и суперкомпьютерного комплекса МГУ «Ломоносов».

ПОЛУЧЕНИЕ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $TlGa_{1-x}Er_xS_2$

Керимова Э.М., Мустафаева С.Н., Гасанов Н.З., Асадов Ю.Г., Гусейнова К.М.
Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан
e-mail: elmirakerimova42@gmail.com

Целью данной работы явилось изучение диэлектрических и оптических свойств полученных разбавленных твердых растворов $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ ($x = 0; 0,001; 0,005$ и $0,01$). Твердые растворы $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ синтезировали из взятых в стехиометрических соотношениях химических элементов путем непосредственного их сплавления в вакуумированных до 10^{-3} Па кварцевых ампулах при 1000 ± 5 К в течение 5-7 ч. С целью гомогенизации образцов их отжигали в вакууме при 750 К в течение 120 ч. Отожжённые сплавы охлаждали до комнатной температуры в режиме выключенной печи. Завершенность синтеза и гомогенность полученных образцов, а также их индивидуальность контролировали методами ДТА и РФА. Рентгенографическое исследование кристаллов $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ было проведено на порошковом автодифрактометре типа D8-ADVANCE в режиме $0.5^\circ \leq 2\theta \leq 80^\circ$ ($Cu_{K\alpha}$ - излучение; $\lambda = 1.5418$ Å) при 40 кВ и 40 мА. Полученные рентгендифракционные данные обработаны и уточнены по программам EVA и TOPAZ. При обработке рентгеновских данных кристаллов было установлено, что эти данные хорошо индицируются на основе данных, приведенных в банке данных Международного дифракционного центра. Рентгенофазовый анализ показал, что кристаллическая структура образцов соответствует моноклинной сингонии. Значения параметров решетки кристаллов $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ приведены в таблице.

Состав на основе $TlGaS_2$	Параметры решетки					ρ , г/см ³	V, Å ³
	a, Å	b, Å	c, Å	β°	z		
x=0	10.2990	10.2840	15.1750	99.60	16	5.560	1584.74
x=0.005	10.3243	10.3057	15.1487	99.60	16	5.160	1587.73
x=0.01	10.3413	10.3142	15.1951	99,60	16	5.642	1596.53

Установлено, что диэлектрические и оптические характеристики полученных твердых растворов $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ зависят от содержания Er. С увеличением содержания Er действительная составляющая комплексной диэлектрической проницаемости уменьшалась \sim в 6,5 раз, а значение тангенса угла диэлектрических потерь увеличивалось на порядок. Частотная зависимость проводимости $TlGa_{1-x}Er_xS_2$ в диапазоне 10^6 – $3,5 \cdot 10^7$ Гц подчинялась закономерности $\sigma \sim f^{0,8}$, характерной для прыжкового механизма переноса заряда по запрещенной зоне. Определены плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми ($N_F = 5,9 \cdot 10^{18} - 1,1 \cdot 10^{19} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$) и их энергетический разброс ($\Delta E = 0,11 - 0,15$ эВ), среднее время ($\tau = 5 \cdot 10^{-8} - 10^{-7}$ с) и расстояние прыжков ($R = 77 - 81$ Å), а также концентрация локализованных состояний, ответственных за проводимость на переменном токе ($N_t = 8,8 \cdot 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$). В твердом растворе $TlGa_{0,999}Er_{0,001}S_2$ при низких температурах ($T = 77$ – 200 К) обнаружена полоса поглощения, связанная с образованием экситона вблизи прямого края; температурный коэффициент максимума экситонной полосы составил: $3,1 \cdot 10^{-4}$ эВ/К для $TlGa_{0,999}Er_{0,001}S_2$ и $1,9 \cdot 10^{-4}$ эВ/К для $TlGaS_2$. Коротковолновое смещение экситонного пика при замещении атомов галлия атомами эрбия ($x = 0,001$) в кристалле $TlGaS_2$ составляет величину порядка 90 мэВ.

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ПОДЛОЖКИ НА ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЕНОК LiNbO_3

Д.А. Киселев, Р.Н. Жуков, А.С. Быков, С.В. Ксенич, М.Д. Малинкович, Ю.Н. Пархоменко

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 119049, Москва, Ленинский пр., д.4, Россия

Тонкие ориентированные поликристаллические пленки ниобата лития (LiNbO_3) представляют также интерес для различных электрооптических и акустооптических приложений, в числе которых интегрированные приборные структуры, содержащие микро- и оптоэлектронные компоненты. Преимущество приборов на основе таких пленок по сравнению с приборами на основе монокристаллов, используемых в настоящее время, главным образом состоит в: 1) возможности использовать большую разницу показателей преломления пленки и подложки; 2) возможности монолитного интегрирования с широко используемыми микроэлектронными и оптоэлектронными компонентами приборов; 3) более высокой устойчивости пленок к оптическому пробую.

В работе представлены результаты исследований морфологии и доменной структуры пленок ниобата лития, выращенных методом высокочастотного магнетронного распыления мишени на подложки кремния кристаллографической ориентации (100) и (111). Установлено, что в процессе синтеза формируются однофазные наноструктурированные пленки с произвольной ориентацией зерен. Средний размер зерен составляет 25-50 нм. Экспериментально показано, что степень текстурированности пленок на кремниевой подложке ориентации (111) составляет примерно 60%. По измеренным зависимостям амплитуды сигнала пьезоотклика от величины приложенного переменного напряжения между зондом кантилевера и подложкой вычислены значения пьезоэлектрических модулей d_{zz} пленок ниобата лития на подложках кремния (111) и (100). При приложении постоянного электрического поля на пленку через проводящий зонд формировались микро- и нанодоменные индуцированные состояния, исследовались их динамические характеристики в режиме силовой микроскопии пьезоотклика. В режиме остаточного пьезоотклика получены петли пьезоэлектрического гистерезиса.

Полученные результаты указывают на то, что одна из проблем, решение которой необходимо при создании тонких электрооптических пленок ниобата лития на диэлектрических слоях, а именно – высокая кристаллографическая ориентация структуры, может быть решена при помощи технологии высокочастотного распыления мишени

СЛАБОУСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ОБЛАСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЛАВЕ Cu_3Au

Клопотов А.А.¹, Потекаев А.И.¹, Старостенков М.Д.²,
Морозов М.М.³, Маркова Т.Н.³

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

E-mail: klopotovaa@tsuab.ru

²Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул, Россия

E-mail: genphys@mail.ru

³Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

E-mail: Gromov@physics.sibsiu.ru

Одним из важных фазовых переходов, происходящих в металлических сплавах, является переход порядок-беспорядок, отличительными чертами которого являются диффузионный характер превращения и взаимосвязь дальнего и ближнего порядка в расположении атомов с группами симметрии фаз, т.е. структурными особенностями системы.

В работе исследованы слабоустойчивые состояния и особенности структурных изменений в области фазовых переходов на примере бинарного сплава Cu_3Au с разным содержанием Cu (70, 75 и 80 ат. %). Из исходного неупорядоченного состояния системы с использованием стохастического метода Монте-Карло были получены равновесные конфигурации с заданными концентрациями компонент.

Для исследования термоактивированной перестройки атомной структуры сплава был проведен компьютерный эксперимент по следующей схеме. На первом шаге формировались три типа стартовых блоков кристалла, в каждый из которых вводилась одна вакансия. Затем задавалась температура, запускался вакансионный механизм диффузии атомов по методу Монте-Карло. При низких температурах наблюдался процесс упорядочения, а при повышенных температурах после достижения некоторого упорядоченного состояния, зависящего от состава сплава, – процесс разупорядочения. Были выявлены особенности термоактивируемых перестроек структуры на микро-, нано- и макроструктурных уровнях бинарного сплава Cu_3Au при отклонении от стехиометрического состава. Отмечено, что в окрестности структурно-фазовых превращений в сплавах Cu_3Au в области 25 ат. % Au реализуются слабоустойчивые состояния, в которых наблюдается целый спектр аномальных явлений, подготавливающих систему к превращению.

Было установлено, что основным механизмом на ранней стадии упорядочения сплава является процесс образования антифазных доменов. В сплаве стехиометрического состава доля атомов, составляющих антифазные домены, достигает 90 %, в то время как при отклонении от стехиометрии на ± 5 ат. % эта доля не превышает 50 %. Механизм структурных превращений существенно зависит от особенностей мезоструктуры. В сплаве стехиометрического состава доля кластеров невелика, а основную роль играют механизмы поглощения крупными доменами мелких и миграции антифазных границ, причем при этом сохраняется внутридоменный порядок. При уменьшении доли меди механизм структурных превращений оказывается связанным с флуктуацией межфазных и антифазных границ, идет процесс поглощения крупными доменами мелких (как и в сплаве стехиометрического состава), но без сохранения внутридоменного порядка. При увеличении концентрации меди (80 ат. % Cu) механизм структурных превращений связан с размытием доменных структур неупорядоченной фазой.

ПРИМЕНЕНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКООМНОГО КРЕМНИЯ С УЛУЧШЕННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

С.П. Кобелева, И.М. Анфимов

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, 119049, Ленинский пр-т, 4
тел: (495) 955-0150, факс (499) 237-2129, эл. почта: kob@misis.ru*

В работе изложены результаты исследований условий получения термоакцепторного эффекта в высокоомном БЗП кремнии n-типа, впервые обнаруженного в работе Смиронова Л.С. и соавторов [1]. В [2] было показано, что отжиг облученного электронами 6 МэВ БЗП кремния (исходный материал n-тип, $\rho \approx 0,7 - 2,0$ кОм · см, время жизни неравновесных носителей зарядов (τ) = 400 — 1000 мкс) позволяет получить материал p-типа с $\rho > 100$ кОм · см и восстановленным до первоначального значения τ , что можно отнести к термоакцепторному эффекту. В данной работе поставлена задача определения температурных режимов отжига облученного электронами кремния n-типа, при которых резко возрастает величина ρ при сохранении высокого значения τ , что может быть важно для разработки детекторных структур.

Были проведены 5 серий экспериментов с различными режимами отжига \ получены следующие результаты:

- увеличение ρ после его восстановления до первоначальной величины сопровождается сменой типа проводимости;
- температура проявления термоакцепторного эффекта зависит от ρ даже в пределах одной пластины и в зависимости от режимов отжига может лежать в интервале 350 - 500 °С; величина времени жизни на проявление термоакцепторного эффекта не влияет;
- величина ρ зависит от режимов отжига и может изменяться от десятков до сотен кОм · см.
- для получения устойчивого термоакцепторного эффекта необходимо получение промежуточного состояния материала в котором прошел отжиг радиационных дефектов, отвечающих за закрепление уровня Ферми в середине запрещенной зоны материала, но не отожджены дефекты, создающие глубокие рекомбинационные центры, определяющие падение τ при облучении.

Возможные механизмы термоакцепторного эффекта обсуждаются.

Литература

1. В.Ф. Стась и др. // ФТП. 2000. Т. 34, вып.2. С. 162-167.
2. И.М. Анфимо и др. // Известия ВУЗов. МЭТ. 2009. Т.47, вып.3. С.20-22.

АДГЕЗИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ВАКУУМНО-ДУГОВЫМ МЕТОДОМ

Ковалева М.Г., Колпаков А.Я., Поплавский А.И., Галкина М.Е.

Алмазоподобные углеродные покрытия (АПП) обладают рядом уникальных свойств: высокими значениями твердости, теплопроводности; оптической прозрачностью в видимом и ИК-диапазонах электромагнитного излучения; низким коэффициентом трения и т.д. [1]. Однако характерной особенностью АПП являются высокие значения внутренних напряжений сжатия, которые ухудшают их адгезионную прочность, что, в свою очередь, приводит к ухудшению во времени защитных свойств [2]. Общепринятым методом снижения внутренних напряжений является контролируемый отжиг [3]. Также ранее установлено, что увеличение угла наклона плазменного потока углерода к подложке позволяет существенно снизить величину внутренних напряжений в покрытии [4]. Целью данной работы является исследование влияния отжига в вакууме на адгезионные характеристики наноразмерных углеродных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым методом при угле наклона 70° плазменного потока углерода к подложке.

АПП толщиной 80 – 100 нм осаждали на образцы, изготовленные из монокристаллического кремния марки КЭФ-4.5 на установке УВНИПА-1-001 с использованием импульсного источника углеродной плазмы [5]. Угол наклона 70° плазменного потока относительно подложки устанавливали путем поворота подложки относительно геометрической оси плазменного потока углерода. Отжиг проводили в вакуумной печи GHA 10/600 ‘Carbolite’ при температуре 400, 500 и 600°C в течение 10 мин.

Адгезионно/когезионную прочность наноразмерных углеродных покрытий исследовали с помощью скретч-тестера «REVESTEST» (CSM Instruments) алмазным сферическим индентором типа «Роквелл С» с радиусом закругления 200 мкм, с нарастающей нагрузкой на индентор от 0,9 до 25 Н. За критерий адгезионной прочности была принята критическая нагрузка L_C , которая приводила к разрушению покрытия.

Зафиксирован эффект повышения адгезионной прочности алмазоподобных углеродных покрытий после отжига. Зависимость имеет линейный характер – с возрастанием температуры отжига от 400°C до 600°C возрастает адгезионная прочность. Эффект повышения адгезионной прочности алмазоподобных углеродных покрытий после отжига может быть использован для повышения эксплуатационных характеристик изделий микромеханики, изготовленных из кремния, в частности микронзондов сканирующих зондовых микроскопов.

Используемая литература:

- [1] Donnet C., et.al., Surf. Coat. Tech., 120 (1999) 548-554.
- [2] Kennedy F.E., et.al., Wear, 255 (2003) 854-858.
- [3] Inkin V.N., et.al., Diam. Relat. Mater., 13 (2004) 1474-1479.
- [4] Колпаков А.Я. и др., Упрочняющие технологии и покрытия, 2012, № 4, С. 40.
- [5] Маслов А.И. и др., Приборы и техника эксперимента, 1985, №3, С. 146.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки России подведомственным вузам на выполнение НИОКР, проект № 2.3451.2011 с использованием оборудования Центра коллективного пользования научным оборудованием НИУ «БелГУ» «Диагностика структуры и свойств наноматериалов».

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОРАЗМЕРНЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИМПУЛЬСНЫМ ВАКУУМНО-ДУГОВЫМ МЕТОДОМ

Ковалева М.Г., Колпаков А.Я., Поплавский А.И., Галкина М.Е.

Алмазоподобные углеродные (АПП) покрытия являются перспективным материалом, позволяющим существенно повысить эксплуатационные характеристики изделий, деталей и инструмента, применяемых, например, в таких отраслях как металлообработка, аэрокосмическая промышленность, медицина, микромеханика и т.д. Формирование АПП происходит в термодинамически неравновесных условиях из потока низкотемпературной углеродной плазмы, в связи с чем, они насыщены радиационными дефектами и обладают высоким уровнем внутренних напряжений сжатия [1]. Распространенным способом снижения внутренних напряжений в покрытиях, и соответственно, изменению их структуры и физико-механических свойств, в частности твердости, коэффициента трения, износостойчивости, является их контролируемый отжиг [2]. Также ранее установлено, что увеличение угла наклона плазменного потока углерода к подложке позволяет существенно снизить величину внутренних напряжений в покрытии [3]. Целью данной работы является исследование влияния отжига в вакууме на триботехнические характеристики наноразмерных углеродных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым методом при угле наклона 70° плазменного потока углерода к подложке.

АПП толщиной 80 – 100 нм осаждали на образцы монокристаллического кремния марки КЭФ-4.5 на установке УВНИПА-1-001 с использованием импульсного источника углеродной плазмы [4]. Отжиг проводили в вакуумной печи GHA 10/600 ‘Carbolite’ при температуре 600 и 800°C в течение 10 мин.

Комплексное трибологическое исследование образцов включало непрерывную запись коэффициента трения при испытании на изнашивание по стандартной схеме испытания ‘шарик-диск’ (ASTM G99-959 и DIN 50324) на автоматизированной машине трения (Tribometer, CSM Instruments, Швейцария), а также фактографический анализ дорожки трения покрытий и пятна износа на контртеле (шарик из сапфира диаметром 6 мм). Испытания проведены на воздухе при нагрузке 3 Н, линейной скорости 10 см/сек, радиусе окружности износа 5 мм, пути трения 500 метров. Внешний вид следов износа покрытий на кремнии и пятна износа на шарике изучали после испытаний с использованием оптического инвертированного микроскопа Olympus GX 51. Измерение среднего значения площади поперечного сечения и глубины дорожки трения проводили с помощью автоматизированного прецизионного контактного профилометра Surtronic 25. Количественную оценку износостойкости образцов и контртела проводили по фактору износа W [5].

Зафиксирован эффект повышения износостойкости алмазоподобных углеродных покрытий после отжига в вакууме при температуре 600°C.

Используемая литература:

- [1] Donnet C., et.al., Surf. Coat. Tech., 120 (1999) 548-554.
- [2] Inkin V.N., et.al., Diam. Relat. Mater., 13 (2004) 1474-1479.
- [3] Колпаков А.Я. и др., Упрочняющие технологии и покрытия, 2012, № 4, С. 40.
- [4] Маслов А.И. и др., Приборы и техника эксперимента, 1985, №3, С. 146.
- [5] Вершинин Д.С., и др., Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2010, № 12, Т. 76, С. 45.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки России подведомственным вузам на выполнение НИОКР, проект № 2.3451.2011 с использованием оборудования Центра коллективного пользования научным оборудованием НИУ «БелГУ» «Диагностика структуры и свойств наноматериалов».

ОБОБЩЕННЫЙ КРИТЕРИЙ ТЕРМОПРОЧНОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ

А.Ф. Коваленко

Военная академия РВСН им. Петра Великого
г. Москва, Китайгородский проезд, 9/5. Тел. (499) 696-34-12,
(E-mail: alexanderfkov@yandex.ru)

Для обработки диэлектрических и полупроводниковых материалов, наряду с традиционным высокотемпературным отжигом, применяется облучение их поверхности непрерывным или импульсным лазерным излучением [1,2]. Обрабатываемые материалы могут обладать поверхностным или объемным поглощением лазерного излучения.

С целью определения неразрушающих режимов обработки рассмотрено решение несвязанных квазистатической и динамической задач термоупругости для свободно защемленных по контуру пластин. Получены аналитические соотношения, являющиеся критериями термopрочности пластин при различных режимах обработки.

В рамках динамической задачи термоупругости для импульсного режима воздействия получен критерий термopрочности материала в виде:

$$\frac{\sigma_{BP}(1-2\nu)}{E\alpha_T(T_f - T_0)} > \frac{1}{2f_i(a_1)}, \quad (1)$$

где $f_i(a_1)$ – функция, зависящая от временной формы лазерного импульса и безразмерного параметра a_1 [2].

Показано, что разрушение материала термоупругими напряжениями не произойдет, если

$$\frac{\sigma_{BP}(1-\nu)}{E\alpha_T(T_f - T_0)} \geq 0,5. \quad (2)$$

Проведена оценка адекватности аналитической модели и определены границы ее применимости. Приводятся сравнения расчетов с экспериментальными результатами.

Список литературы

1. Коваленко А.Ф. Определение неразрушающих режимов термообработки диэлектрических и полупроводниковых пластин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.-2003.-№ 2.- С. 39-42.
2. Коваленко А.Ф. Экспериментальная установка для исследования влияния параметров лазерного импульса на разрушение неметаллических материалов // Приборы и техника эксперимента. – 2004. №4. – С. 119-124.

ПРИБЛИЖЁННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕРАЗРУШАЮЩИХ РЕЖИМОВ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ СЛАБО АНИЗОТРОПНЫХ ПЛАСТИН

А.Ф. Коваленко

Военная академия РВСН им. Петра Великого
103074, Москва, Китайгородский проезд, д. 9/5. Тел. (499) 696-34-12,
(E-mail: alexanderfkov@yandex.ru)

Для обработки пластин из полупроводниковых и диэлектрических материалов наряду с традиционным высокотемпературным отжигом, применяется облучение их поверхности лазерным излучением [1, 2]. Быстрый нагрев поверхности пластины лазерным излучением и медленное ее охлаждение приводит к релаксации остаточных напряжений, возникающих в приповерхностном слое при полировке. В [1, 2] для различных режимов обработки в рамках несвязанной квазистатической задачи термоупругости получены аналитические соотношения, являющиеся критериями термopрочности при лазерном отжиге изотропных материалов. Эти соотношения позволяют определить неразрушающие режимы лазерной обработки и предъявлять требования по термopрочности к существующим и вновь разрабатываемым изотропным материалам.

Для анизотропных материалов решение подобных задач в аналитическом виде не представляется возможным.

Применение метода Фогта-Ройса-Хилла для усреднения упругих свойств анизотропных материалов позволяет разработать упрощенную модель термopрочности слабо анизотропных материалов при их лазерном отжиге и определять с некоторой погрешностью, которая может быть определена экспериментально, неразрушающие режимы лазерной обработки, воспользовавшись уже имеющимися критериями термopрочности изотропных материалов [1, 2].

Определены режимы неразрушающей обработки пластин. Приводится сравнение расчётов по аналитическим соотношениям с расчётами численным методом и результатами экспериментов.

Список литературы

1. Коваленко А.Ф. Определение неразрушающих режимов термообработки диэлектрических и полупроводниковых пластин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2003. – №2. – С. 39-42.
2. Коваленко А.Ф. Метод обоснования неразрушающих режимов лазерной обработки пластины с объемным поглощением // Физика и химия обработки материалов. - 2004. - № 6. – С. 25-29.

УПРАВЛЕНИЕ ПРИЭЛЕКТРОДНЫМИ ПРОЦЕССАМИ В ПОЛЯРНОМ КРИСТАЛЛЕ ЛАНТАН-ГАЛЛИЕВОГО ТАНТАЛАТА КАК СПОСОБ СНИЖЕНИЯ ДЕГРАДАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ

Козлова А.П., Анфимов И.М., Козлова Н.С., Миляев Д.В., Сагалова Т.Б.
НИТУ «МИСис», Москва, Россия, E-mail: ane4kot@mail.ru

Кристаллы лантан-галлиевого танталата $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$ (лангатат, ЛГТ), принадлежащие к пространственной группе $R\bar{3}21$, применяются в качестве высокотемпературных сенсоров, работающих на прямом пьезоэффекте. Эти кристаллы можно отнести к твердым электролитам. В качестве рабочего элемента сенсора используется полярный срез кристалла.

При изготовлении датчиков физических величин из монокристаллического ЛГТ на противоположные поверхности кристалла полярного среза наносят токопроводящие покрытия. Ранее проведенные исследования подтвердили предположение об электрохимической природе взаимодействия кристалла с нанесенным электродом. Причиной возникновения ЭДС в этом случае является разность электрохимических потенциалов поверхностей полярного среза кристалла ЛГТ.

Недостатком таких датчиков является деградация поверхности при эксплуатации изделий, особенно при повышенных температурах. Механизм деградации состояния поверхности полярного кристалла ЛГТ при нанесении токопроводящих покрытий, а также критические температурные интервалы изменения поверхности мало изучены.

Для выявления взаимодействия электродных покрытий с поверхностями полярного среза кристалла использовался метод термостимулированной токовой спектроскопии – исследования температурных зависимостей токов короткого замыкания (ТКЗ).

В данной работе были измерены зависимости термостимулированных токов короткого замыкания кристаллов ЛГТ, выращенных в различных атмосферах, с разными электродами с предварительной поляризацией образцов и без неё. Толщина образца не влияет на значение тока, а его величина и направление зависят от вида электродов. Из этого следует, что ТКЗ определяется приэлектродными процессами. ТКЗ зависят от ориентации кристалла: ток не наблюдается на образцах вырезанных параллельно полярной оси, и наиболее силен в образцах, вырезанных перпендикулярно полярным направлениям. Для измерения ТКЗ высокоомных материалов была собрана установка – образцы с нанесенными на поверхности электродами напрямую подключают к измерителю малых токов. В нашем случае к электрометру «Keithley 6517 А»(США)», работающему в режиме измерения токов. После замыкания цепи наблюдается спадание тока до стационарного значения, которое сохраняется сколь угодно долго во времени. Затем осуществляется нагрев образцов в линейном режиме со скоростью, не превышающей $2\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ до заданной температуры, с автоматизированной регистрацией измеряемых параметров ТКЗ с выводением на компьютер.

Проведенный анализ термостимулированных токов, измеренных при линейном нагреве до $700\text{ }^\circ\text{C}$, позволил определить энергетический спектр электрически активных дефектов в исследуемом объекте, был проведен расчет энергии активации дефектов в структуре ЛГТ.

Образцы до и после высокотемпературных измерений были исследованы методами оптической микроскопии, спектроскопии диффузного отражения, сканирующей электронной микроскопии, рентгенофазового анализа.

Обнаружены влияние атмосферы выращивания кристалла и материала токопроводящих покрытий на характер температурных зависимостей ТКЗ. Данные процессы наиболее активно протекают в кристаллах, выращенных в атмосфере аргона.

Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что деградация поверхности начинается при температуре выше $200\text{ }^\circ\text{C}$. Наиболее интенсивно идут процессы в области температур $400\text{-}500\text{ }^\circ\text{C}$.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛАНТАН-ГАЛЛИЕВОГО ТАНТАЛАТА В СВЯЗИ С УСЛОВИЯМИ ПОЛУЧЕНИЯ И ПОСЛЕРОСТОВОЙ ОБРАБОТКОЙ

Козлова Н.С., Бузанов О.А.*, Диденко И.С., Забелина Е.В., Козлова А.П., Симинел Н.А.

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия E-mail: kozlova_nina@mail.ru

*- ОАО «Фомос-Материалс», Москва, Россия

Кристалл лантан-галлиевого танталата $\text{La}_3\text{Ga}_{5,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_{14}$ (ЛГТ) является перспективным пьезоэлектрическим материалом и используется в качестве элемента в высокотемпературных датчиках физических величин. Данный кристалл имеет структуру кальций-галлиевого германата $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$ и относится к пространственной группе R321. Одним из основных вопросов в исследовании ЛГТ является их окраска, которая определяется наличием центров окраски. Среда, в которой проводится выращивание или дополнительные послеростовые воздействия на кристалл (в частности, отжиги, ионизирующее облучение), являются важнейшими факторами, определяющими возникновение центров окраски.

В данной работе исследовались кристаллы лангата, выращенные в ОАО «Фомос-Материалс» методом Чохральского из расплава с разным содержанием кислорода в атмосфере роста: Ar, Ar + (2%) O_2 и Ar + (~0,5%) O_2 . Образцы представляли собой плоскопараллельные пластины толщиной 2 мм. При выращивании в атмосфере аргона кристаллы лангата получают практически бесцветные, а при добавлении в атмосферу выращивания кислорода цвет кристаллов меняется вплоть до оранжевого.

Каждый образец отжигался при одной температуре от 500 °C до 1000 °C с шагом 100 °C в течение 4-х часов на воздухе и в вакууме. Все образцы до и после отжига исследовались методами оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, оптической и атомно – силовой микроскопии. В ходе проведения исследований было установлено сильное влияние температуры отжига на состояние дефектов в структуре лантан – галлиевого танталата и на состояние поверхностей кристалла. В зависимости от атмосферы выращивания и полярности поверхности это влияние различно.

Отжиг данных кристаллов приводит к увеличению поглощения в видимой области спектра, а именно на характерных полосах поглощения на длинах волн 280 нм, 360 нм и 480 нм. Наблюдается последовательное снижение коэффициента пропускания с увеличением температуры.

Проведены комплексные исследования оптических свойств кристаллов ЛГТ (показатели преломления, коэффициент гирации) от условий их получения.

Впервые получены люминесцентные характеристики нелегированных монокристаллов ЛГТ, выращенных в различных атмосферах. При проведении эксперимента по измерению спектров фотолюминесценции в качестве возбуждающего излучения были выбраны вторая и третья гармоники (длина волны возбуждения $\lambda_{\text{ex}} = 532$ и 355 нм) лазера YAG: Nd^{3+} с энергией возбуждающего излучения 0,5 и 2 мДж при температурах 95 и 300 К. Широкие спектры излучения наблюдается на 450 нм и 750 нм. С увеличением концентрации кислорода в атмосфере выращивания интенсивность люминесценции уменьшается, что связано с активацией образования кислородных центров.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о влиянии изотермического отжига кристаллов лангата как на его оптические и люминесцентные свойства, так и состояние поверхностей образцов.

РОЛЬ СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ В РАБОТЕ АККРЕДИТОВАННЫХ ИСПЫТАТЕЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРИЙ

Козлова Н.С., Быкова М.Б., Бычкова М.Я., Гореева Ж.А., Диденко И.С., Левашов
Е.А., Петржик М.И.

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия, E-mail: kozlova_nina@mail.ru

Для метрологически корректных измерений, проводимых на сложном, высокоточном оборудовании, и дальнейшей достоверной интерпретации полученных результатов необходимо наличие: поверенного или калиброванного оборудования; стандартных образцов; аттестованных методик измерений (МВИ).

Роль стандартных образцов (СО) для обеспечения единства измерений, установления метрологической прослеживаемости результатов измерений, сопоставимости результатов измерений в испытательных лабораториях трудно переоценить, особенно после вступления в силу Федеральных законов РФ № 184-ФЗ «О техническом регулировании» в 2002 г. и № 102-ФЗ «Об обеспечении единства измерений» в 2008 г. Эффективность метрологического контроля, контроля стабильности и точности результатов измерений с применением контрольных карт Шухарта (ГОСТ Р ИСО 5725-6-2002), а в итоге контроля достоверности получаемых результатов, напрямую связаны с уровнем обеспечения лабораторий СО. Важное значение имеет обоснованность методических приёмов (способов) применения СО.

Аккредитованные испытательные лаборатории НИТУ «МИСиС»: «Испытательная лаборатория функциональных покрытий (ИЛФП)» и «Монокристаллы и заготовки на их основе» (ИЛМЗ) имеют многолетний практический опыт проведения испытательных работ, разработки, создания, выбора и применения СО.

В ИЛФП в рамках г/к № 154-6/334 был создан метрологический комплекс для измерения механических и трибологических свойств наноматериалов. При его создании решались две основные проблемы: разработка и аттестация МВИ на высокоточных приборах; разработка, создание и утверждение типа Государственных стандартных образцов (ГСО), предназначенных для поверки/калибровки, градуировки средств измерений, контроля метрологических характеристик при проведении испытаний, в том числе с целью утверждения типа; метрологической аттестации и разработки новых МВИ. Были разработаны, аттестованы и внесены в Госреестр три МВИ; созданы и внесены в Госреестр: «ГСО модуля упругости наноматериалов с аттестованным значением 202 ГПа» и комплект «ГСО коэффициента трения скольжения нанокристаллического материала».

ИЛМЗ специализируется на испытании специфичных объектов, таких как оптические материалы высокого оптического качества для различных применений. Для всех МВИ, которые используются в лаборатории, разработаны стандартные образцы предприятия (СОП) с полной метрологической проработкой в соответствии с ГОСТ 8.315-97. Для ряда МВИ (показателя преломления, аномального двулучепреломления, диффузного отражения и пропускания) с целью контроля стабильности и установления прослеживаемости результатов измерений необходимо использование нескольких СОПов. В качестве примера приводится МВИ показателя преломления.

Рассмотрены и другие примеры необходимости разработки и применения СОПов для реализации прослеживаемости результатов измерений, юстировки оборудования при смене режимов работы и решения спорных вопросов при возникновении претензий заказчиков к результатам измерений.

РЕЗУЛЬТАТИВНОСТЬ И УЛУЧШЕНИЕ СИСТЕМЫ МЕНЕДЖМЕНТА КАЧЕСТВА В ИСПЫТАТЕЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРИИ

Козлова Н.С., Быкова М.Б., Гореева Ж.А., Диденко И.С., Ломакина Ю.С.
НИТУ «МИСиС», Москва, Россия, E-mail: kozlova_nina@mail.ru

Аккредитованная испытательная лаборатория (ИЛ) должна выполнять целый ряд требований, установленных межгосударственным стандартом ГОСТ ИСО/МЭК 17025-2009. В соответствии с данным стандартом, ИЛ должна разработать, внедрить и постоянно улучшать результативность системы менеджмента качества (СМК) лаборатории /1/.

В работе приводится опыт разработки методик количественной оценки результативности и улучшения СМК испытательной лаборатории и применения этих методик для оценки деятельности ИЛ «Монокристаллы и заготовки на их основе» (ИЛМЗ), являющейся структурным подразделением Национального исследовательского технологического университета «МИСиС». Внедрение данных методик является практической реализацией таких принципов менеджмента качества как «принятие решений, основанное на фактах» и «постоянное улучшение» /2/.

Результативность – это степень реализации запланированной деятельности и достижения запланированных результатов /2/.

Все процессы деятельности ИЛ, к которым устанавливаются требования в рамках СМК, должны быть описаны в руководстве по качеству (РК) /1/. Для каждого из процессов СМК, описанных в РК, устанавливаются критерии результативности. Основным критерием является количество несоответствий требованиям, установленным к процессу. В зависимости от специфики, по отдельным процессам могут быть установлены дополнительные критерии. По доле процессов, признанных результативными оценивается результативность всей системы в целом.

В соответствии с данной методикой оценена результативность СМК ИЛМЗ за несколько лет работы.

Для количественной оценки улучшения СМК необходимо определить критерии и бальную оценку в зависимости от их выполнения. В качестве критериев оценки улучшения СМК могут быть выбраны следующие: внедрение нового, внесение изменений, выполнение плана улучшений, выявленные несоответствия, результативность СМК и прочие.

Разработанные методики позволяют:

- количественно оценивать результативность и улучшение СМК испытательной лаборатории;
- выявлять «узкие» места в деятельности испытательной лаборатории;
- повышать результативность СМК испытательной лаборатории;
- планировать улучшение СМК испытательной лаборатории;

Данные методики можно рекомендовать для любой испытательной лаборатории.

Список использованных источников

1 ГОСТ ИСО/МЭК 17025-2009 «Общие требования к компетентности испытательных и калибровочных лабораторий».

2 ГОСТ ISO 9000-2011 «Системы менеджмента качества. Основные положения и словарь».

ВЛИЯНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ЛАНТАН-ГАЛЛИЕВОГО ТАНТАЛАТА

Козлова Н.С., Диденко И.С., Козлова А.П., Симинел А.В.*, Симинел Н.А.

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия E-mail: kozlova_nina@mail.ru

* - Институт прикладной физики Академии наук Молдовы, Кишинев, Молдова

Кристалл лантан-галлиевого танталата $\text{La}_3\text{Ga}_{5,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_{14}$ (ЛГТ) является перспективным лазерным материалом. Оптическое качество данных кристаллов многие годы не позволяло использовать их в подобном применении. Однако в настоящее время такая возможность появилась в силу существенного улучшения качества кристалла.

В связи с этим, целью данной работы является исследование влияния атмосферы выращивания, послеростового отжига на воздухе на люминесцентные свойства кристаллов лантан – галлиевого танталата.

В данной работе исследовались образцы ЛГТ полярного среза, выращенные методом Чохральского в иридиевых тиглях в атмосфере аргона Ar и аргона с различным содержанием кислорода ($\text{Ar} + (2\%) \text{O}_2$) и ($\text{Ar} + (\sim 0,5\%) \text{O}_2$). Образцы были отожжены при 1000°C в течение четырех часов. Образцы исследовали методами оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, спектроскопии диффузного отражения, оптической и атомно – силовой микроскопии до и после отжига.

Впервые получены люминесцентные характеристики нелегированных монокристаллов ЛГТ, выращенных в различных атмосферах. Спектры люминесценции кристаллов ланталата возбуждались излучением лазера на аллюмоиттриевом гранате второй и третьей гармоникой (532 нм и 355 нм соответственно) с энергией возбуждающего излучения 0,5 и 2 мДж при температурах 95 и 300 К.

Широкие спектры излучения наблюдаются на 450 нм и 750 нм. Времена жизни люминесценции при регистрации на разных длинах волн составляют от 5 до 8 мкс. Сопоставление расположения максимумов отдельных гауссовых пиков и энергии образования кислородных вакансий в определенных позициях, показало, что, по крайней мере, два пика на спектрах люминесценции кристаллов ланталата в районе 2,8 эВ и 3,1 эВ связаны с дефектами, образованными кислородными вакансиями.

Обнаружено влияние изотермического отжига на интенсивность люминесценции образцов ЛГТ, отожженных при 1000°C . Смещения пиков люминесценции не происходит: при возбуждении длиной волны 355 нм пик находится на 450 нм. Наименьшая интенсивность люминесценции наблюдается в кристалле ЛГТ, выращенном в атмосфере ($\text{Ar} + (2\%) \text{O}_2$), наибольшая в кристалле, выращенном в ($\text{Ar} + (\sim 0,5\%) \text{O}_2$). При сравнении спектров люминесценции образцов в исходном и отожженном состоянии следует отметить, что значительное изменение интенсивности люминесценции произошло в кристалле, выращенном в ($\text{Ar} + (\sim 0,5\%) \text{O}_2$), в то время как в кристалле, выращенном в атмосфере ($\text{Ar} + (2\%) \text{O}_2$), эта разница не такая существенная.

Уменьшение концентрации кислорода в атмосфере роста кристаллов и послеростовые отжижки приводят к значительному изменению оптических и люминесцентных свойств.

НИЗКОЧАСТОТНЫЕ СПЕКТРЫ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПРОБЕГОВ В КРИСТАЛЛАХ NaCl В СХЕМЕ ЭПР

Колдаева М.В., Альшиц В.И., Петржик Е.А., Даринская Е.В., Белов А.Ю.

Институт кристаллографии РАН; 119333 Москва, Ленинский пр-т, 59

mkoldaeva@ns.crys.ras.ru

Магнитостимулированная модификация примесного центра может происходить как в постоянном магнитном поле, так и в условиях ЭПР, когда частота поля накачки ν соответствует зеемановскому условию $h\nu = g\mu_B B$, где h – постоянная Планка; μ_B – магнетон Бора, B – индукция постоянного магнитного поля; $g \approx 2$ – фактор Ланде.

Как оказалось, резонансные смещения дислокаций в кристаллах NaCl наблюдаются не только в классических условиях ЭПР, когда $\nu \sim 10$ ГГц, но и в ультраслабых скрещенных полях – постоянном магнитном поле Земли $B_{\text{Earth}} \sim 50$ мкТл и переменном поле с частотой $\nu \sim 1$ МГц, отвечающей зеемановскому условию [1]. Новые резонансы ЭПР-типа в сверхнизких магнитных полях характеризуются сильной анизотропией по отношению к направлениям магнитных полей и дислокаций. Так, в экспериментах, выполненных без экранирования поля Земли, была обнаружена [1] и исследована [2] ориентационная анизотропия самого условия резонанса в схеме типа ЭПР. Частота резонансного пика зависит от взаимной ориентации вектора постоянного поля и образца и не зависит от ориентации поля накачки.

Данное условие резонанса связано с представлением о спиновых моментах $\mathbf{M}_{1,2}$, имеющих выделенные направления в кристалле – [010] и [001] в случае дислокации с $\mathbf{L} \parallel [100]$. Моменты $\mathbf{M}_{1,2}$ и вектор $\mathbf{B}_{\text{Earth}}$ образуют углы $\theta_{1,2}$, $\theta_1 + \theta_2 = 90^\circ$, а каждому положению кристалла относительно поля $\mathbf{B}_{\text{Earth}}$ соответствуют, по крайней мере, две резонансные частоты $h\nu_{1,2} = g\mu_B B_{\text{Earth}} \cos\theta_{1,2}$. Однако, и это условие тоже не до конца описывает свойства резонансных спектров пробегов дислокаций в сверхнизких магнитных полях и требует уточнений. Проведение серии экспериментов для набора углов $\theta = 85^\circ, 86^\circ, 87.5^\circ$ и 90° показало, что в условие резонанса необходимо внести поправки. Из-за искажений решетки в ядре дислокации спиновые моменты $\mathbf{M}_{1,2}$ отклонены от направлений $\langle 100 \rangle$ на углы $\Delta\theta_i$: $h\nu = g\mu_B B_{\text{Earth}} \cos(\theta_{1,2} \pm \Delta\theta_i)$. Например, спектры резонансных пробегов дислокаций для углов $85^\circ, 86^\circ, 87.5^\circ$ имеют четыре пика, соответствующих $\pm\Delta\theta_{1,2} = 0.95^\circ, 2.62^\circ$.

Используя многочастичный потенциал межатомного взаимодействия, методом молекулярной динамики были исследованы возможные позиции примеси замещения в ядре дислокации, характеризующиеся различными значениями углов $\Delta\theta$. Каждой из них должны соответствовать два пика пробегов с соответствующими резонансными частотами. Для ориентации $\theta = 90^\circ$ экспериментально получен набор резонансных пиков, отвечающих отклонениям $\Delta\theta_i \approx 1^\circ, 2.6^\circ, 8.8^\circ, 10.5^\circ, 16.0^\circ, 17.3^\circ$, что неплохо согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования. Наблюдаемое различие в интенсивности пиков может быть связано с разной вероятностью нахождения примеси в определенных структурных позициях в ядре дислокации.

Работа частично поддержана Президиумом РАН (Программа № 24) и РФФИ (грант № 13-02-00341).

1. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, В.А. Морозов, В.М. Кац, А.А. Лукин, Письма в ЖЭТФ 91, № 2 (2010) 97–101; ФТТ 53, № 10 (2011) 2010–2017.
2. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, Е.А. Петржик, ФТТ 55, №2 (2013) 318–325.

ВЗАИМОСВЯЗЬ РЕЛЬЕФА РОСТОВОЙ ПОВЕРХНОСТИ И СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ

Колесников А.И., Каплунов И.А., Третьяков С.А., Гречишкин Р.М.,
Каплунова Е.И.

Тверской государственный университет, г. Тверь, Россия
Ivan.Kaplunov@tversu.ru

Монокристаллы германия для оптики выращивают из расплава, при этом на поверхности кристаллов отражаются изменения кинетики кристаллизации в течение процесса роста - всегда имеются периодические или квазипериодические неровности профиля – чередующиеся выступы и впадины. В работе представлены материалы исследования связи периодичностей профиля кристаллов германия, выращиваемых способом направленной кристаллизации, с флуктуациями скорости роста и температуры, а также поиск зависимости между неровностями профиля и структурой - колебаниями плотности дислокаций.

Для изучения поверхностей были использованы монокристаллы в виде диска диаметром 175-230 мм, выращенные способом направленной кристаллизации в направлении [111]. Поверхности кристаллов изучались с помощью оптического поляризационного микроскопа, с помощью растрового электронного микроскопа и интерференционного профилометра. Изображения поверхности кристалла, выращенного методом направленной кристаллизации, полученные с помощью растрового электронного микроскопа, представлены на рисунке 1.

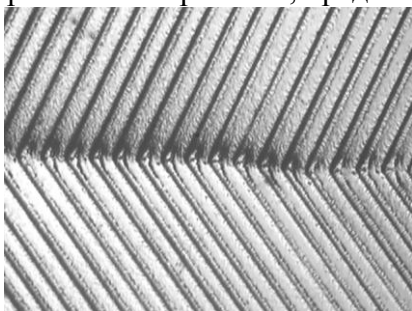


Рис.1. Поверхность кристаллов германия (оптическая микроскопия)

Обнаружены периодичности двух неровностей рельефа двух временных и пространственных масштабов: 3 с, 70 мкм и 0.3 с, 7 мкм. Первая периодичность соответствует периоду

вращения тигля с растущим кристаллом, вторая связана с температурными флуктуациями, возникающими вследствие термогравитационной и термокапиллярной конвекции.

Химическое травление кристаллов показало, что существует взаимосвязь между распределением дислокаций и неровностями профиля на кристаллах германия (рисунок 2). Максимумы плотности дислокаций зафиксированы на выступах профиля, минимумы - во впадинах.

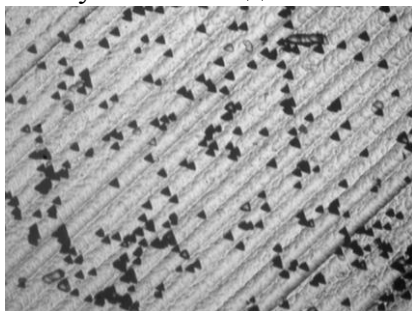


Рис. 2. Дислокационные ямки травления

Установлено, что максимальное количество ямок травления наблюдается в местах с наибольшей высотой неровностей профиля и поэтому меры технологического характера, связанные со снижением самых больших колебаний температуры на фронте кристаллизации, могут приводить к существенному улучшению структурных характеристик кристаллов.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОАЛЕСЦЕНЦИИ НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Колосов А.Ю., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В., Новожилов Н.В., Хашин В.А.,
Соколов Д.Н.

Тверской государственный университет, Тверь, Россия, nsdobnyakov@mail.ru

Важным фактором, определяющим распределение наночастиц по размерам, который приводит к увеличению их среднего размера и росту минимального размера, является коалесценция. Кроме того, коалесценция является одним из базовых процессов в порошковой металлургии. Соответственно, можно ожидать, что спекание порошков, представленных наночастицами, будет характеризоваться рядом специфических закономерностей. Исследование формы и размеров ультрадисперсных порошков металлов, например, с помощью методов просвечивающей электронной микроскопии, значительно усложняется именно из-за склонности их наночастиц к коалесценции. Явление коалесценции наночастиц металлов является следствием поверхностной диффузии мгновенно переводящей материал частиц в «квазирастопленное» состояние.

Целью настоящей работы является моделирование процесса коалесценции металлических наночастиц, состоящих из атомов золота, для определения взаимосвязи между геометрией системы и температурой, при которой происходит коалесценция наночастиц, а также фазовый переход кристалл-жидкость для наночастиц с конфигурацией конус-сфера и сфера-плоскость (см. рис. 1).

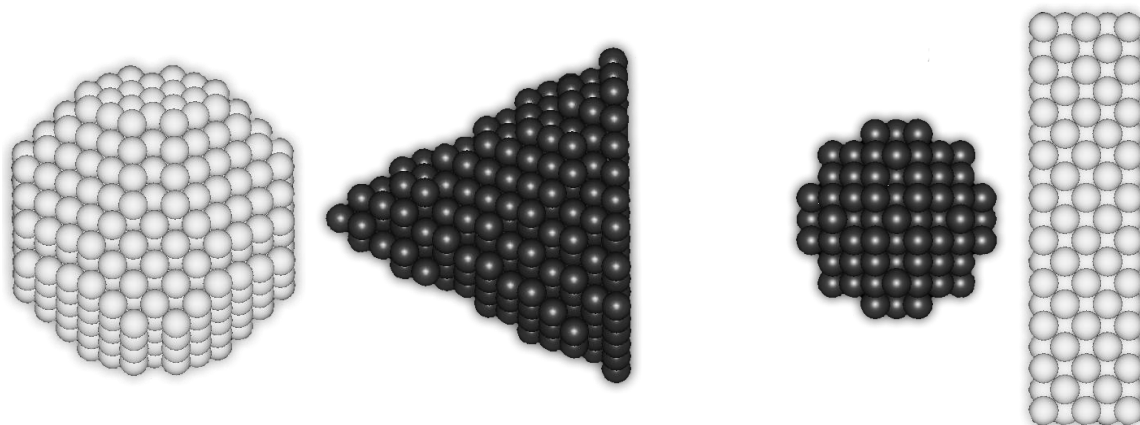


Рис. 1. Начальная конфигурация наночастиц золота при температуре 273 K для конфигураций конус-сфера и сфера-плоскость.

Для исследования процесса коалесценции наночастиц металлов, взаимодействие в которых описывается многочастичным потенциалом Гупта [1], был применен метод Монте-Карло. Фазовый переход первого рода обнаруживается по скачку (излому) на калорической кривой, т.е. зависимости потенциальной части удельной (в расчете на один атом) внутренней энергии $U(T)$ системы наночастица - пар. На основе анализа калорических зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии для процессов плавления и коалесценции получены соответствующие размерные зависимости для температур плавления и коалесценции при различных значениях расстояния между исследуемыми наночастицами и их начальной взаимной ориентацией.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 12-03-31593-мол-а и 13-03-00119-а).

1. Gupta R.P. // Physical Review B. 1981. V. 23. №. 12. P. 6265-6270.

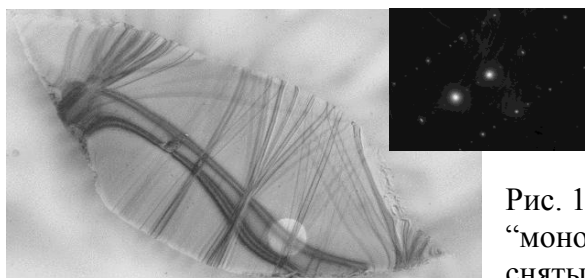
НЕОБЫЧНАЯ ТРАНСРОТАЦИОННЫЕ МИКРОКРИСТАЛЛЫ, РАСТУЩИЕ В АМОРФНЫХ ПЛЁНКАХ И НОВАЯ МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АМОРФНОГО СОСТОЯНИЯ.

В. Ю. Колосов

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Vladimir.Kolosov@usu.ru

Последние 25 лет наблюдается возрастающий интерес к получению и исследованиям необычных для конденсированного состояния структур: квазикристаллов, фуллеренов и нанотрубок (и их модификаций), а также различных наноструктур. В данной работе излагаются экспериментальные результаты по формированию и строению на нано-, мезо- и микроуровне других, мало известных, необычных кристаллических образований, выявленных для целого ряда пленок полупроводников, окислов и металлов, приготовленных различными методами. Основные данные получены методами просвечивающей электронной микроскопии ПЭМ (метод изгибных контуров [1], в т. ч. исследования *in situ*, HRTEM). Предложена новая гипотетическая микрокристаллическая модель аморфного состояния.

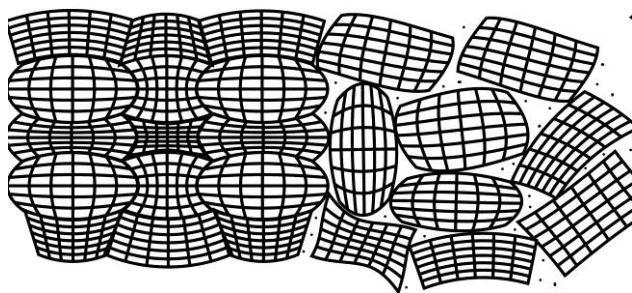
Как показано ранее [1] рост кристаллов в аморфных плёнках может сопровождаться сильным (до 100-200 градусов на 1 мкм) внутренним "искривлением кристаллической решетки" недислокационной природы. Для обозначения кристаллов необычной дефектности, фактически нового типа конденсированного состояния в тонкой пленке, был введен термин трансротационные кристаллы [2], так как застройку атомной решетки упруго искаженной структуры можно схематично описать трансляцией элементарной ячейки кристаллической решетки, сопровождаемой небольшим постоянным вращением (до 0,1 градуса в расчете на элементарную ячейку).



Трансротационные кристаллы в последние годы идентифицированы в ряде тонкоплёночных халькоген-содержащих плёнок [4, 5], используемых для технологий памяти на фазовых переходах.

Рис. 1. ПЭМ изображение трансротационного "монокристалла" Se с одной из последовательно снятых микродифракций с микроного участка с

зонно-осевой картины контуров.



Предлагается новая "микрокристаллическая" модель аморфного состояния, основу которой вместо обычных зёрен играют внутренне искривлённые "трансротационные" кристаллиты.

Рис. 2. Трансротационная микрокристаллическая модель аморфного состояния – приведены 2

различающихся (справа и слева) схематических варианта.

[1] I. E. Bolotov and V. Yu. Kolosov, Phys. Stat. Sol. 69a 85 (1982).

[2] Bolotov I.E., Kolosov V.Y., Kozhyn A.V. Phys. Stat. Sol. 72a, p. 645-654 (1982).

[3] Kolosov V. Yu. and Tholen A. R., Acta Mater. (2000) v. 48, p. 1829-1840.

[4] B. J. Kooi and J T M De Hosson, J. App. Phys. 95 4714 (2004).

[5] E. Rimini et. al., J. App. Phys. 105 123502 (2009).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 12-03-01118).

ПРИМЕНЕНИЕ КОНФОРМНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТРАНСРОТАЦИОННЫХ МИКРОКРИСТАЛЛОВ

В. Ю. Колосов, Л. Ю. Агафонов

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Vladimir.Kolosov@usu.ru

Анализируется применение конформных отображений для построения модели необычной трансротационной [1] нанокристаллической структуры, выявляемой при росте кристалла в аморфной плёнке дифракционной электронной микроскопией.

Для простейшей цилиндрической геометрии внутреннего упругого искривления решётки микрокристалла использовано конформное отображение $W = i \cdot (\text{Log}(kZ)) / k$, где $Z = X + Yi$, X , Y – исходные координаты атома в “нормальной” решётке, k – параметр. Исходная область расположения атомов в узлах 2D сетки ограничена полукольцом (рис.1.а). Другие параметры: внутренний радиус кольца R , толщина плёнки T 10÷50 нм, постоянная решётки $d=0,5$ нм, градиент разориентировки решётки ~300 град/мкм (максимальное значение из экспериментально наблюдавшихся). На отображение наложено физическое условие упругого изгиба в виде: изменение $d \leq 5\%$. Установлено, что для любой толщины T при $R \geq 9,5 \cdot T$ существует узкий диапазон $k \approx 1/(10 \cdot T)$ для данных ограничений, а при увеличении R диапазон значений k расширяется и смещается в сторону меньших значений. После отображения в прямоугольной области тонкой плёнки (рис.1.б, в) имеется непрерывное изменение кристаллографической ориентировки, выявляемое электронно-микроскопически. Изменение площади $\leq 2\%$, с ростом k уменьшается.

Литература

[1] Kolosov V. Yu. and Tholen A. R., Acta Mater. (2000) v. 48, p. 1829-1840.

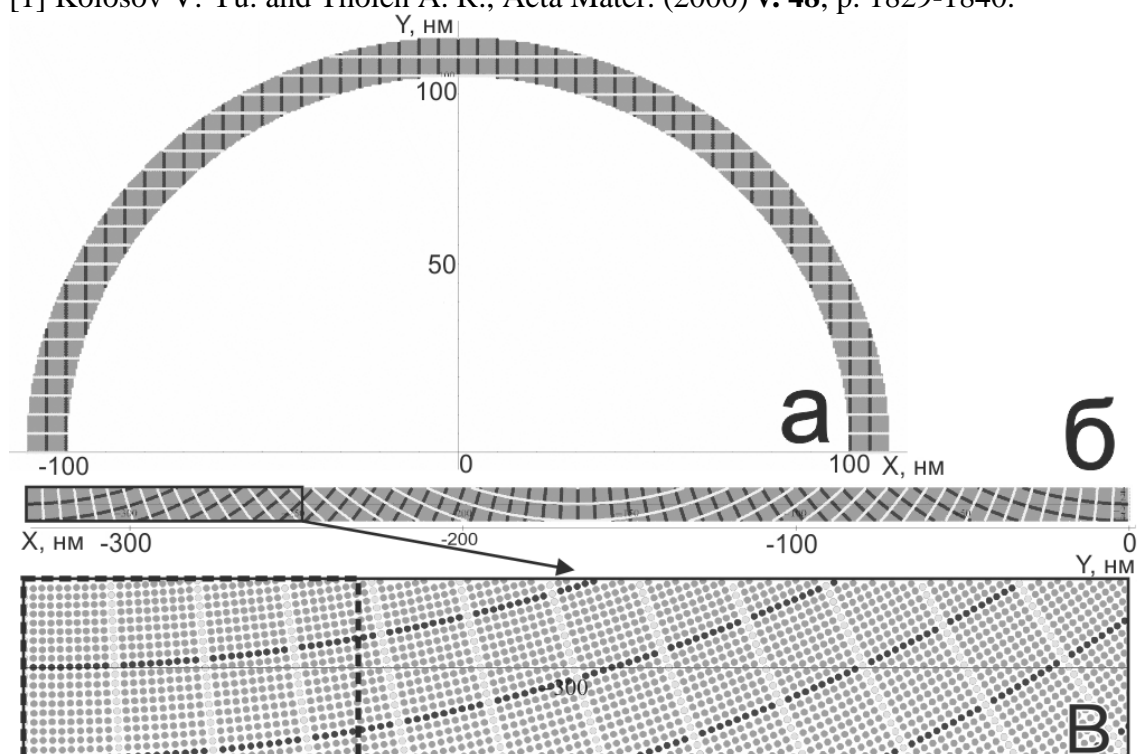


Рис.1. Построение 2D модели решётки трансротационного кристалла (выделены системы 2х кристаллографических плоскостей в сечении кристалла): а – исходная область “нормальной” сетки атомов, б – расположение атомов и плоскостей после применения конформного отображения, в – та же модель б, но с увеличением.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 12-03-01118).

НЕЛЕГИРОВАННЫЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ GaAs ДЛЯ ДЕТЕКТОРОВ БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ

Г.И. Кольцов, С.И. Диденко, А.В. Черных, С.В. Черных, Ю.Н. Свешников*

НИТУ «МИСиС», 119049 Россия, Москва, Ленинский проспект, д. 4,

*ЗАО «Элма-Малахит» - ДО ОАО «Концерн «Энергомера»,

124460 Россия, Москва, Зеленоград, пр. 4922, д. 4, стр. 3, E-mail: sdi13@mail.ru

Представлены технология роста и результаты измерений электрофизических характеристик нелегированных эпитаксиальных слоев GaAs, а также результаты испытаний изготовленных на их основе детекторов быстрых нейтронов.

Датчик быстрых нейтронов предназначен для проведения дозиметрического контроля персонала за защитой ядерно-физических установок (ЯФУ), таких как реакторы, ускорители, генераторы нейтронов для медицинских целей и др. Для регистрации быстрых нейтронов с помощью полупроводникового детектора использован метод протонов отдачи. Быстрые нейтроны благодаря высокому значению сечения упругого рассеяния на атомах водорода, выбивают из водородосодержащего конвертера (например, полиэтилен или стиробен) протоны. Выбитые протоны в свою очередь регистрируются GaAs сенсором, представляющим собой обратно смещенный диод Шоттки или *p-i-n* диод.

Требования, предъявляемые к детектору быстрых нейтронов, такие как возможность регистрации быстрых нейтронов в диапазоне энергий 0.5–14 МэВ, низкая чувствительность к гамма-фону, способность работать в фотовольтаическом режиме с высокой эффективностью сбора заряда, а также высокая радиационная стойкость накладывают серьезные ограничения при выборе материала сенсора.

Для получения эпитаксиальных слоев арсенида галлия, качество которых способно удовлетворить выше перечисленным требованиям, использовалась хлоридная технология – известная система Ga-AsCl₃-H₂, реализованная в установке с вертикальным реактором – ЭТР-100. Для получения требуемых характеристик структур, были использованы специальные приемы, позволяющие понизить фон неконтролируемого легирования. Так, для уменьшения вхождения в растущий слой донорных микропримесей VI группы (в первую очередь, серы и селена) повышалась температура и снижалась скорость роста эпитаксиального слоя. В нашем случае оптимальными режимами процесса являлись температура в зоне источника галлия ~ 830 °С, в зоне подложек ~ 750 °С при скорости роста ~ 0.15 мкм/мин. Для «борьбы» с вхождением кремния – основной фоновой примеси IV группы использовалось добавление в газовую фазу над источником галлия небольших концентраций воды. Проведенные исследования показали возможность надежного получения необходимого уровня легирования в эпитаксиальных слоях GaAs с использованием такой технологии. Используемая методика позволяет воспроизводимо выращивать на *n*⁺-подложках нелегированные эпитаксиальные слои GaAs с концентрацией свободных носителей на уровне (1–5)·10¹¹ см⁻³ и толщиной до 120 мкм. Холловская подвижность носителей заряда в полученных слоях достаточно высока и для слоев специально легированных до 3·10¹³ см⁻³ составляет 7400 при 300 К и 155000 см²·В⁻¹·с⁻¹ при 77 К, что говорит о низкой компенсации материала и его пригодности, как элемента структуры детекторов.

Использование эпитаксиальных слоев высокой чистоты позволяет получать эффективность сбора заряда GaAs сенсора в фотовольтаическом режиме на уровне от 10 до 50 %, соответственно для толщин от 10 до 80 мкм. Подбор толщины эпитаксиального слоя позволяет получить GaAs сенсор, нечувствительный к фоновому гамма-излучению.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ23

Комшина А.В.¹, Коровушкин В.В.², Шипко М.Н.^{3,4}, Степович М.А.^{3,5,6}

¹ *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Россия, krvsch@mail.ru*

³ *Ивановский филиал Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова, г. Иваново, Россия, ivrgteu_nir@mail.ru*

⁴ *Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина, г. Иваново, Россия, ivrgteu_nir@mail.ru*

⁵ *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, г. Калуга, Россия, m.stepovich@rambler.ru*

⁶ *Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва, Россия, m.stepovich@rambler.ru*

В настоящей работе с использованием растровой электронной микроскопии, порометрии и стандартных методов определения микротвёрдости изучено влияния слабых (10-100 кА/м) низкочастотных (10-20 Гц) импульсных магнитных полей на структуру поверхности титанового сплава ВТ23, который является конструкционным сплавом высокой прочности.

Полученные результаты измерений микротвёрдости и порометрия образцов сплава до магнитноимпульсной обработки и после нее показывают, что импульсы магнитного поля влияют на удельную поверхность с учетом открытых пор, на суммарный объем пор и на микротвёрдость сплава (см. табл.).

№ образца	Микротвердость сплава ВТ23 для различного количества импульсов магнитного поля (0, 10, 20, 30, 50)				
	0	10	20	30	50
1	283	347	334	369	350
2	264	366	326	342	363
3	232	365	366	376	356
4	304	382	338	366	382
5	260	354	338	354	348
6	275	375	351	362	356
7	299	381	352	377	350

Исходя из результатов исследования, можно сделать вывод о том, что магнитноимпульсная обработка приводит к уменьшению поверхностных дефектов, их «залечиванию» и перераспределению. Это дает основание рассматривать магнитноимпульсную обработку в качестве эффективного инструмента для снижения дефектности поверхности, улучшения ее качества. При этом стоит отметить, что, хотя анализу подвергались поверхностные дефекты, поры, можно предположить возникновение аналогичных процессов и в глубине материала, т.к. магнитноимпульсная обработка воздействует на весь объем, а не только на поверхность.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011).

ВЛИЯНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ С ДЛИНОЙ ВОЛНЫ 266 НМ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В КРИСТАЛЛАХ ВВО

Кондратюк Н.В.

СоларЛС, Минск, Беларусь

www.solarls.eu

Известно, что одним из факторов, ограничивающих эффективность нелинейных преобразований в УФ области спектра, является двухфотонное поглощение высокоинтенсивного УФ излучения в кристаллах. По данным работы [1] коэффициенты двухфотонного поглощения кристаллов KDP, ВВО и LBO на длине волны 264 нм равны 0,26 см/ГВт, 0,93 см/ГВт и 0,15 см/ГВт соответственно. Процесс двухфотонного поглощения УФ излучения, как правило, сопровождается переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости с последующим образованием центров окраски, дополнительно поглощающих излучение на всех трех частотах, участвующих в нелинейных преобразованиях.

Ранее нами было обнаружено, что в кристаллах ВВО имеется сильное нелинейное поглощение низкоинтенсивного $< 100 \text{ MW/cm}^2$ излучения 4-й гармоники YAG:Nd лазера [2]. Путем численного моделирования было показано, что в процессе двухфотонного поглощения излучения с длиной волны 266 нм внутри кристалла ВВО образуются динамические центры окраски сильно поглощающие это излучение. С учетом экспериментальных данных было подобрано значение сечения поглощения центров окраски на длине волны 266 нм $\sigma_{4\omega} = 8 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$.

Путем численного моделирования было установлено, что при низких интенсивностях излучения основной частоты с 532 нм на эффективность генерации 4-й гармоники с 266 нм сильно влияет волновая расстройка, обусловленная расходимостью пучка основной частоты. При высоких интенсивностях $I_{2\omega}$ падение эффективности преобразования $\eta_{4\omega}$ обусловлено нелинейным поглощением излучения с 4-й гармоники.

Наличие нелинейного поглощения излучения накачки с 266 нм в кристалле ВВО может существенным образом влиять на динамику развития параметрической генерации. Путем численного моделирования показано, что эффективность параметрического усилителя может быть больше эффективности параметрического генератора, если имеют место эффекты нелинейного поглощения излучения накачки. На основании проведенных исследований был сделан вывод, что в условиях слабого энергообмена на линейном этапе развития параметрической генерации, когда интенсивности холостой и сигнальной волн малы, потери излучения накачки из-за нелинейного поглощения максимальны. В этом случае снижается коэффициент параметрического усиления в нелинейной среде, увеличивается время задержки и, как следствие, уменьшается эффективность параметрической генерации. В условиях сильного энергообмена между взаимодействующими волнами в нелинейной среде интенсивность излучения накачки значительно меньше и, как следствие, потери энергии накачки из-за нелинейного поглощения должны быть меньше.

1. Dubietis A., Tamosauskas G., Varanavicius A., Valiulis G. / *Appl.Optics*, 39, 2437 (2000).

2. Kondratyuk N., Shagov A. 2001. «ICONO 2001. Nonlinear Optical Phenomena and Nonlinear Dynamics of Optical Systems, 26 June – 1 July 2001, Minsk, Belarus» *Proceeding of SPIE/ Konstantin N. Drabovich, Nikolay S. Kazak, Vladimir A. Makarov, Alexander P. Voitovich, Editors. – Washington: SPIE. 2002. – vol. 4751 – P. 110-115*

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ И КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОРЯДОК В ВИРУСНЫХ КАПСИДАХ

О.В. Коневцова^{1,2}, С.Б. Рошаль¹, В.Л. Лорман²

¹Физический факультет Южного федерального университета. 344090, Россия, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5

²Laboratoire Charles Coulomb, UMR 5221 CNRS and Université Montpellier 2, 34095 Montpellier, France

Вирусы представляют собой микроскопические частицы, состоящие из белковой капсулы — капсида, и заключающегося в ней генома вируса. Закодированную в геноме генетическую информацию вирусы не могут самостоятельно реализовать, не обладая собственным механизмом синтеза белка. Вирусная оболочка, состоящая в большинстве случаев из множества идентичных копий одной асимметричной белковой молекулы, защищает и одновременно транспортирует геном к подходящей для заражения клетке. Инфицирование клетки-хозяина вирусом сильно зависит от расположения белков в капсиде. Данное расположение является регулярным, симметричным и показывает высокую степень позиционного и ориентационного упорядочения белковых единиц. Но, несмотря на определенные сходства в организации структур капсидов и классических кристаллов, обобщение концепций физики твердого тела с учетом специфических свойств белков началось совсем недавно.

Почти все работы по данной тематике основаны на теории Каспара и Клуга, согласно которой структуры значительного количества вирусных капсидов интерпретируются на основе выкройки икосаэдра, треугольные грани которого заполняются периодическим гексагональным мотивом. Однако, на основе анализа структур капсидов семейства Паповавирусов было показано существование нового типа организации белковых единиц – хирального пентагонального порядка, соизмеримого с разверткой додекаэдрического типа, а не икосаэдрического. Данный тип порядка удалось объяснить с помощью обобщения теории упругости квазикристаллов [1]. В свою очередь описание образования квазирешеток в рамках теории кристаллизации Л.Д. Ландау [2] позволило разработать модель формирования вирусов семейства Паповавирусов для случая малых вирусов со сферической топологией. Таким образом, была предложена обобщенная теория, позволяющая описывать самосборку капсидов не только вирусов со сферической топологией, но и вирусов, которые имеют промежуточную форму между сферической и ярко выраженной граненой.

О.В. и С.Б. поддерживаются РФФИ, грант 13-02-12085 офи_м.

1. O.V. Konevtsova, S.B. Rochal and V.L. Lorman, Chiral quasicrystalline order and dodecahedral geometry in exceptional families of viruses// Phys. Rev. Lett. 108, 038102 (2012).
2. O.V. Konevtsova, S.B. Rochal, V.L. Lorman, Unconventional Landau theory of quasicrystalline structure formation// Phys. Lett. A, Volume 377, Issues 16–17, 1215 (2013).

КОМПЛЕКСЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ С ИНГИБИТОРАМИ РАКОВЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК ИЛИ С ПАРАКРИННЫМИ ПРОДУКТАМИ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК КАК НОВЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ СРЕДСТВА

Конопляников А.Г.¹, Злотин С.Г.², Смирнов Б.Б.², Кальсина С.Ш.¹, Лепехина Л.А.¹,
Семенкова И.В.¹, Агаева Е.В.¹, Бабоян С.Б.¹, Рюмшина Е.А.¹, Носаченко В.В.¹,
Конопляников М.А.³, Ставрев С.⁴

¹ ФГБУ Медицинский радиологический научный центр МЗ РФ, Обнинск, Россия,
E-mail: konopl@mrrc.obninsk.ru

² ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Москва, Россия

³ Федеральный научно-клинический центр специализированных видов медицинской помощи и медицинских технологий ФМБА МЗ РФ, Москва, Россия

⁴ Академия наук Болгарии, София, Болгария

Совместное применение наиболее активных химиопрепаратов и детонационных наноалмазов (ДНА)* является новым направлением в терапии раковых заболеваний. Установлено, что при этом эффективность препаратов значительно усиливается без повышения их общей токсичности. Возможное объяснение — избирательная доставка препаратов в зону т.н. раковых стволовых клеток посредством ДНА.

Воздействием ультразвука авторы получили (в форме суспензии) стабильные комплексы ДНА размером 4-5 нм с салиномицином — мощным ингибитором раковых стволовых клеток**. На модели перевиваемой карциномы легких у мышей показано, что введение комплекса существенно повышает противоопухолевой эффект в сравнении с самостоятельным действием салиномицина. Различие в эффективности статистически значимо как для первичных опухолей, так и для легочных метастазов и для выживаемости животных в течение 3-х месяцев после начала лечения. Сходный эффект наблюдался и на моделях раковых стволовых клеток *in vivo*, получаемых воздействием канцерогена на стволовые кроветворные клетки и стволовые клетки (СК) эпителия тонкого кишечника у мышей.

Таким образом, в комплексах салиномицина и ДНА видятся новые перспективные средства для лечения онкологических больных с резистентными формами злокачественных новообразований.

Авторами получены данные и о том, что самостоятельное введение лабораторным животным ДНА также активизирует пулы СК нормальных тканей, хотя эта стимуляция относительно невысока. При использовании же комплексов ДНА с кондиционной средой из-под культур мезенхимальных стволовых клеток (МСК) эффект стимуляции значительно выше.

Поэтому комплексы ДНА с кондиционной средой из под культур МСК также представляются новыми перспективными агентами для лечения повреждений самых различных тканей и могут способствовать успешному развитию регенеративной медицины.

Использованная в опытах суспензия четырехнанометровых частиц ДНА была предоставлена Физико-техническим институтом им. А.Ф.Иоффе РАН (разработка лаборатории физики кластерных структур; зав. лаб. — доктор физ.-мат наук, профессор А.Я.Вуль).

* Chow E.K. et al., 2011; Конопляников А.Г., Конопляников М.А., 2012

** Gupta P.V. et al., 2009

ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ В КРИСТАЛЛАХ И ЖИВОЙ ПРИРОДЕ

Константинова А. Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К.

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

E-mail: tatgolovina@mail.ru

Оптическая активность – необычайное явление, которое по-разному проявляется в минеральных веществах и в органических соединениях.

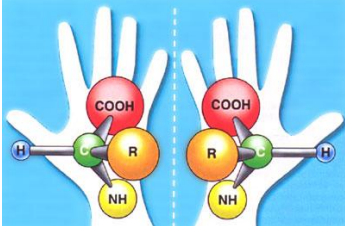
Из 32 классов симметрии кристаллов, оптическая активность наблюдается только в 18 классах симметрии, из которых 11 являются энантиоморфными, т.е. имеют правую и левую модификации (рис.1). Оптическая активность кристаллов проявляется по-разному в зависимости от их симметрии. Все минеральные оптически активные кристаллы оптически неактивны в расплаве или в растворе.

Большинство органических веществ обладают оптической активностью. Органические вещества способны быть оптически активными в любом агрегатном состоянии, так как их оптическая активность связана не со строением кристаллов, а со строением самих молекул. Основу всего живого составляют белки – гигантские молекулы, образованные связанными вместе аминокислотными остатками. Все 20 входящих в состав белков основных аминокислот, кроме глицина, имеют оптические изомеры (L- и D- аминокислоты, рис.2). Их молекулы подобны, как отражение в зеркале или как правая и левая рука человека. Самым удивительным является то, что все живые организмы создают молекулы преимущественно одного типа, и в живой природе встречаются почти исключительно L-аминокислоты и D-сахара (гомохиральность). Именно это свойство связано с происхождением жизни на Земле.

При всех реакциях, когда из более простых веществ получают хиральные вещества (без присутствия специфических катализаторов) образуется смесь двух изомеров в равных частях (рацемат). Но разные энантиомеры оказывают разное действие на живые организмы, например, часто только один из них имеет требуемый терапевтический эффект (например, левомицетин), а второй может быть бесполезным или даже токсичным.

Но некоторые D-аминокислоты присутствуют в живых организмах (например, D-серин, D-аспартат). Изменение нормального количества этих аминокислот может приводить к различным заболеваниям, таким как болезнь Альцгеймера, болезнь Паркинсона, шизофрения, эпилепсия, катаракта и многие другие. Поэтому изучение оптической активности аминокислот важно для исследования этих заболеваний.

Оптическая активность является одним из важнейших свойств веществ. Оптическая активность органических соединений играла большую роль в появлении жизни на Земле. Так как правые и левые вещества представлены в природе по-разному, необходимо знать различие между ними. Особенно это важно при использовании их в медицинских целях.

	
Рис.1. Левый и правый кристаллы тартрата натрия-аммония	Рис.2. Левая (L) и правая (D) аминокислота

СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ KDP:TiO₂ и KDP:Al₂O₃·nH₂O

**А.В. Косинова¹, И.М. Притула¹, М.И. Колыбаева¹, М.А. Копыловский²,
В.Я. Гайворонский²**

¹Институт монокристаллов НАН Украины, Харьков
Annett@isc.kharkov.ua

²Институт физики НАН Украины, Киев

Сегнетоэлектрики типа KDP обладают рядом уникальных физических свойств, такими как оптическая прозрачность в широком диапазоне, электрооптический, пьезооптический эффект и др. Однако одним из недостатков кристаллов KDP являются сравнительно низкие нелинейно-оптические коэффициенты, ответственные за генерацию второй гармоники (ГВГ). Одним из способов увеличения эффективности ГВГ является введение в матрицу KDP наночастиц металлооксидов, что дает возможность получения новых материалов с заданными характеристиками.

В данной работе были выращены кристаллы KDP с инкорпорированными наночастицами кристаллического диоксида титана (TiO₂, модификация анатаз) и аморфного оксигидроксида алюминия (Al₂O₃·nH₂O), концентрация которых в растворе варьировалась от 0.1 до 100 ppm. Установлен избирательный характер вхождения наночастиц в кристаллическую матрицу: наночастицы TiO₂ захватываются преимущественно пирамидальными секторами роста, в то время как Al₂O₃·nH₂O – призматическими. Проанализирован механизм вхождения наночастиц и характер их взаимодействия с матрицей KDP.

Показано, что захват частиц осуществляется границами между пакетами слоев роста кристалла с формированием квазипериодической зонарной микроструктуры. В случае наночастиц TiO₂ период данной структуры составляет ~ 15 мкм, а для наночастиц Al₂O₃·nH₂O ~ 4 мкм.

Исследовано влияние концентрации наночастиц на величину оптического поглощения, индикатрису рассеяния и аномальную двуосность кристалла KDP.

В выращенных кристаллах исследовано проявление эффектов самовоздействия в пикосекундном диапазоне длительности импульсов (λ=1064 нм). Установлено изменение знака рефрактивного нелинейно-оптического отклика в композитных системах KDP:TiO₂ [1] и KDP:Al₂O₃·nH₂O относительно чистого KDP: в кристаллах, содержащих наночастицы, наблюдается самофокусировка лазерного излучения. Наблюдаемый эффект обусловлен взаимодействием дефектных состояний на поверхности наночастиц с протонной подсистемой матрицы. Изменение знака и эффективности рефрактивного нелинейно-оптического отклика кристалла KDP при введении наночастиц дает возможность управления условиями фазового синхронизма при преобразовании частоты ультракоротких лазерных импульсов.

[1] I.M. Pritula, V.Ya. Gayvoronsky, M.I. Kolybaeva et. al. // Optical Materials. – 2011. – V. 33. – P. 623-630.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ В НЕОДНОРОДНЫХ ТЕПЛОВЫХ ПОЛЯХ

Кох А.Е.

ИГМ СО РАН, Новосибирск, Россия

a.e.kokh@gmail.com

При выращивании кристаллов многими осесимметричными методами традиционным и, по сути, аксиоматическим подходом является создание максимально стабильного и стационарного внешнего теплового поля с определенными значениями осевых и радиальных градиентов температуры. При этом одной из главных характеристик теплового поля является наличие у него оси симметрии бесконечного порядка L_∞ , совпадающей с осью печи и установки в целом – однородное тепловое поле. Идея автора состоит в изменении симметрии и вращении теплового поля при выращивании кристаллов. Таким образом автору удалось найти оригинальный и весьма эффективный путь управления процессами теплопереноса, играющими важную роль при получении кристаллов различными методами.

Суть предлагаемого подхода заключается в создании неоднородных стационарных и циклически изменяющихся внешних тепловых полей, под воздействием которых осуществляется управление процессом конвективного теплопереноса и создается колебательный температурный режим в зоне роста кристалла. Была разработана конструкция печи с вертикально расположенными нагревательными элементами и соответствующая система управления (коммутации нагревательных элементов) и терморегулирования, позволяющие формировать стационарные и вращающиеся тепловые поля различной симметрии и с различными амплитудно-частотными характеристиками.

Приводятся результаты приложения данной идеи к выращиванию кристаллов методом раствор-расплавной кристаллизации (β - BaB_2O_4) [1, 2], гидротермальным методом (берилл) [3, 4], методами Бриджмена (AgGaS_2 [5] и мультикремний [6]), Киропулоса (LiB_3O_5) [7, 8] и Чохральского (α - BaB_2O_4 [9] и TeO_2 [10]).

- [1] А.Е. Кох, Н.Г. Кононова, Т.Б. Беккер, В.А. Влезко, П.В. Мокрушников, В.Н. Попов // Кристаллография. 2005. Т50, №1. с. 169-176.
- [2] А.Е. Kokh, Т.В. Bekker, V.A. Vlezko, K.A. Kokh // J. Crystal Growth. 2011. V318. pp. 602-605.
- [3] Т.В. Bekker, А.Е. Kokh, V.N. Popov, P.V. Mokrushnikov, K.A. Kokh // J. Crystal Growth. 2005. V275. pp. e1481-e1486.
- [4] А.Е. Кох, П.В. Мокрушников, В.Н. Попов // Кристаллография. 2009. Т54. №2. с. 368-373.
- [5] К.А. Kokh, B.G. Nenashev, А.Е. Kokh, G.Yu. Shvedenkov // J. Crystal Growth. 2005. V275. pp. e2129-e2134.
- [6] К.А. Kokh, V.N. Popov, А.Е. Kokh, В.А. Krasin, А.И. Nepomnyaschikh // J. Crystal Growth. 2007. V303. pp. 253-257.
- [7] А.Е. Кох, В.А. Влезко, К.А. Кох // Приборы и техника эксперимента. 2009. № 5. с. 145-149.
- [8] А. Kokh, V. Vlezko, K. Kokh, N. Kononova, Ph. Villeval, D. Lupinski // J. Crystal Growth. 2012. V360. pp. 158-161.
- [9] K. Kokh, A. Kokh // J. Crystal Growth. 2011. V317. pp. 1-3.
- [10] А.Е.Кох, V.S.Shevchenko, V.A.Vlezko, K.A.Kokh // J. Crystal Growth. 2013. In press.

ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ДОМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ, СФОРМИРОВАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫМ ЛУЧОМ В Z -СРЕЗАХ КРИСТАЛЛОВ $\text{LiNbO}_3:\text{MgO}$ РАЗНОГО СОСТАВА

Коханчик Л.С.¹, Емелин Е.В.¹, Палатников М.Н.²

¹Институт Проблем Технологии Микроэлектроники РАН, 142432, г.Черноголовка, Московская обл., mlk@iptm.ru

²Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В.Тананаева КНЦ РАН, 184209, г. Апатиты, Мурманская обл.

Работа посвящена исследованию особенностей формирования доменов под электронным лучом в кристаллах $\text{LiNbO}_3:\text{MgO}$ с уровнем легирования в области «пороговых концентраций» ($\text{MgO} \sim 5 \div 5.5$ мол.%). Интерес к кристаллам этого состава обусловлен значительным увеличением их стойкости к оптическому повреждению [1,2].

Концентрация MgO в исследованных образцах находилась в пределах 5,15-5,38 мол.%. Образец с наименьшим количеством примеси магния был с незначительной добавкой железа $\text{LiNbO}_3:\text{MgO,Fe}$. При выращивании кристаллов проводилось два типа легирования (гомогенное и легирование твердофазной лигатурой). Кроме того, для формирования доменов использовался образец с концентрацией MgO существенно ниже пороговой ($\sim 1,5$ мол.%). Рисование периодических линий электронным лучом осуществлялось в микроскопе марки Zeiss SEM – EVO 50 при разных ускоряющих напряжениях и тока электронного луча. Облучались полированные поверхности –Z срезов толщиной 0,5 мм. Линии формировались параллельно направлениям X или Y, при этом использовались разные способы перемещения электронного луча. Созданные доменные структуры после химического травления в $\text{HF}+2\text{HNO}_3$ исследовались в оптическом интерференционном микроскопе.

Результаты показали, что не зависимо от способа легирования управляемой записи доменов электронным лучом в кристаллах с наибольшим содержанием магния, не происходило. Одиночные домены треугольной формы, зарождались в случайных местах облученных участков и разрастались, преимущественно, по Y направлениям, часто формируя узкие доменные лучи. В этих образцах в процессе фронтального роста происходило быстрое латеральное разрастание и слияние соседних доменов, что обнаруживалось вблизи +Z стороны. В образце $\text{LiNbO}_3:\text{MgO,Fe}$ ($\text{MgO} \sim 5,15$ мол.%, гомогенное легирование) удалось осуществить управляемую запись доменов с помощью электронного луча. Снижение скорости зарядки в зоне облучения и концентрации примеси магния в этих образцах позволило сформировать периодические структуры. Были найдены условия для создания узких (~ 2 мкм) доменных рядов, расположенных вдоль Y направлений. В отличие от образцов с большей концентрацией MgO , существенного латерального разрастания доменов при их фронтальном росте не происходило. В процессе рисований электронным лучом по разным кристаллографическим направлениям были обнаружены характерные различия в формировании доменных линий из отдельных переключаемых участков. В образцах с незначительной концентрацией MgO ($\sim 1,5$ мол.%) зарождение доменов под электронным лучом также легко реализовывалось, периодические структуры записывались. Однако размер доменов, значительно превышал домены в образце $\text{LiNbO}_3:\text{MgO,Fe}$. Т.о., введение в кристаллы ниобата лития нефоторефрактивной примеси магния радикально влияет как на зарождение доменов под электронным лучом, так и на дальнейший рост и формирование периодических доменных структур под действием поля внедряемых зарядов.

1. J. Koppitz, O.F.Schirmer, M.Wehelecke, et al. *Ferroelectrics*, 92, 233 (1989).
2. A. Kuroda, S.Kurimura, Y.Uesu. *Appl.Phys.Lett.* 69 м(11), 1565 (1996).

ФОРМИРОВАНИЕ ДОМЕНОВ И ПЕРИОДИЧЕСКИХ ДОМЕННЫХ СТРУКТУР ПРИ ЭЛЕКТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ КРИСТАЛЛОВ $\text{LiNbO}_3\text{-}0,5\%\text{Ti}$ И В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДАХ Ti:LiNbO_3 НА Y-СРЕЗАХ

Коханчик Л.С.¹, Шандаров С.М.², Волк Т.Р.³

¹*Институт проблем технологии микроэлектроники РАН, 142432, г.Черноголовка, Московская обл., mlk@iptm.ru*

²*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634050, г.Томск*

³*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, 119333, г.Москва*

Рисование электронным лучом по поверхности нелинейно-оптического ниобата лития (LN) является одним из способов создания регулярных доменных структур (РДС) используемых для оптических преобразований. На неполярных (X или Y) срезах LN, которые предпочтительны в интегральной оптике, домены и доменные решетки, записанные электронным лучом, являются планарными (их толщина составляет 4 – 5 мкм), что делает этот метод особенно перспективным для создания РДС непосредственно в волноводах [1].

В данной работе запись доменов и планарных РДС осуществлялась на Y- срезах чистого кристалла LN и кристалла легированного 0,5мол.% TiO_2 (LN-0,5 TiO_2). Проводились эксперименты с записью доменов и в волноводе Ti:LiNbO_3 . Волновод был сформирован путем внедрения Ti в Y срез при длительном отжиге ($T=1050^\circ\text{C}$). Концентрация Ti ~6 мол.% на поверхности экспоненциально спадала по глубине.

Проведенный сравнительный анализ особенностей зарождения и роста индивидуальных доменов после идентичных локальных облучений поверхности кристаллов LN и LN-0,5 TiO_2 показал, что добавка примеси титана существенно затрудняет фронтальный рост доменов. По сравнению с LN, при увеличении заряда q длина доменов l_d в LN-0,5 TiO_2 постепенно перестает увеличиваться. Измеренные значения $l_d(q)$ выходят на насыщение. Более мелкие, чем в LN, домены в LN-0,5 TiO_2 часто зарождаются по несколько штук в зоне одного локального внедрения заряда. Интервал величин заряда, при которых формируются одиночные домены, в образце LN-0,5 TiO_2 много уже, чем в LN. В волноводе было затруднено зарождение доменов. Требовались большие величины внедряемого заряда q , чем в LN и LN-0,5 TiO_2 , что, по-видимому, связано с изменением проводящих свойств поверхности волновода из-за значительной концентрации Ti. Длинные и вытянутые в направлении Z домены успешно росли на глубине в ~ 4 -7 мкм, где концентрация Ti была уже снижена.

Формирование планарных доменных решеток в поверхностном слое Y-срезов осуществлялось путем создания периодических систем локальных облучений [1]. Подбор режимов и интервалов между локальными облучениями позволил создать во всех исследованных образцах РДС планарного типа с разными микронными периодами. Планарные решетки, записанные в образцах, исследовались несколькими методами: генерацией второй гармоники, по потенциальному контрасту в растровом микроскопе и методом селективного химического травления. Наблюдаемые различия в структуре и результирующей форме РДС обсуждаются с позиции возможных изменений состава (дефектной структуры) и проводимости кристаллов LN при введении в них примеси Ti.

1. Л. С. Коханчик, М. В. Бородин, С. М. Шандаров, Н. И. Буримов, В. В. Щербина, Т. Р. Волк. ФТТ (2010) **52**, 1602 – 1610.

Работа поддержана грантами: РФФИ-БРФФИ-№12-02-90038-Бел_a; РФФИ- №12-02-00596а и РФФИ-офи_m2 -№13-02-12440

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ И ТЕКСТУРЫ СПЛАВА Ti-50,26 ат.%Ni ПРИ ВКЛЮЧЕНИИ В ЦИКЛ ТМО ТЕПЛОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ВЕЛИЧИНУ ОБРАТИМОЙ ДЕФОРМАЦИИ

А.Ю. Крейцберг^{1,2}, В. Браиловский², С.Д. Прокошкин¹, А.В. Коротицкий¹

¹ НИТУ «МИСИС», *alouna_87@mail.ru, prokoshkin@tmo.misis.ru; akorotitskiy@gmail.com*

² Высшая Технологическая Школа, г. Монреаль, Канада, *vladimir.brailovski@etsmtl.ca*

Формирование структуры и текстуры сплава Ti-50,26 ат.%Ni с памятью формы исследовали после термомеханической обработки, включающей различные комбинации холодной (ХП) и теплой прокатки (ТП) (при температуре 150°C) с общей накопленной деформацией $\epsilon_{\text{акк}}=1.2$ и промежуточным отжигом (ПО) при температуре 400°C, 1ч: ХП($\epsilon=1$)+ПО+ХП($\epsilon=0.2$), ХП($\epsilon=1$)+ПО+ТП($\epsilon=0.2$) и ТП($\epsilon=1$)+ПО+ТП($\epsilon=0.2$). Для сравнения проводили ХП в диапазоне степеней деформации $\epsilon=0.75\div 1.2$: ХП($\epsilon=0.75$), ХП($\epsilon=1.0$) и ХП($\epsilon=1.2$). После всех обработок проводили последеформационный отжиг (ПДО) при 400°C, 1ч. Дифракционная электронная микроскопия показала, что во всех случаях после ПДО 400°C, 1ч формируется наноструктурное состояние: нанокристаллическая (НКС) и наносубзеренная (НСС) структуры в различных сочетаниях. При этом выявлены следующие закономерности формирования структуры В2-фазы после разных режимов ТМО: 1) чем больше вклад ХП, тем больше доля НКС по сравнению с НСС и ниже средняя плотность дислокаций; 2) чем больше вклад ТП, тем больше доля НСС по сравнению с НКС и тем крупнее зерна, субзерна и полигонизованные области с НСС; 3) включение в схему ТМО промежуточного отжига при 400°C, 1ч приводит к укрупнению структуры: увеличению размера зерна НКС и субзерна НСС.

Рентгенографическое исследование проводили при комнатной температуре и при 100°C (выше температуры окончания обратного превращения A_f), определяя параметры решетки В19'-мартенсита и В2-аустенита. С помощью анализа функции распределения ориентировок и обратной полюсной фигуры определена основная компонента текстуры аустенита сплава после всех режимов ТМО: $\{100\}\langle 110\rangle_{\text{В2}}$. При этом после ХП($\epsilon=1$)+ПО+ТП($\epsilon=0.2$) развивается наиболее острая текстура аустенита, а после ХП(1.2) наиболее слабая, что объясняется большей долей произвольно ориентированных зерен аустенита, образовавшихся при нанокристаллизации аморфной структуры в ходе ПДО.

Кристаллографический ресурс обратимой деформации ϵ_r^{max} , рассчитанный как максимальная деформация решетки при мартенситном превращении, после разных обработок в пределах погрешности не различается. Кристаллографический ресурс обратимой деформации с учетом текстуры исходного аустенита (относительной плотности ориентаций и величины деформации решетки при превращении «монокристалл аустенита в монокристалл мартенсита» в направлениях $\langle 100\rangle$, $\langle 110\rangle$ и $\langle 111\rangle$) повышается при включении ТП и ПО в схему ТМО или при уменьшении степени исходной ХП до $\epsilon=0.75\div 1$.

Экспериментальное определение максимальной обратимой деформации ϵ_r^{max} показало, что чем меньше острота основной компоненты текстуры $\{100\}\langle 110\rangle$ В2-аустенита, тем в большей мере сказывается влияние структуры на величину ϵ_r^{max} . Наибольшее структурное упрочнение (структура НКС) в сочетании с наименее острой текстурой в случае ТМО по режиму ХП(1.2) приводит к реализации наибольшей $\epsilon_r^{\text{max}}=8\%$, превышающей ее кристаллографический ресурс с учетом текстуры. Наименьшее структурное упрочнение в случае ТМО по режиму ХП(0.75) (структура НКС+НСС) в сочетании с острой текстурой, обеспечивает и наименьшее значение ϵ_r^{max} , которое далеко не достигает теоретического ресурса, рассчитанного с учетом только текстуры В2-аустенита. Промежуточное же по величине структурное упрочнение в случае ТМО по остальным режимам в сочетании с острой текстурой обеспечивает промежуточные значения ϵ_r^{max} .

Блочность и остаточные напряжения в стержнях сапфира различной кристаллографической ориентации, выращиваемых способом Степанова

Крымов В.М., Носов Ю.Г., Бахолдин С.И., Маслов В.Н., Шульпина И.Л.

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе, РАН
194021, Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия,
v.krymov@mail.ioffe.ru

Известно, что структурное совершенство ленточных кристаллов сапфира сильно зависит от кристаллографической ориентации затравки. А именно: при прочих равных условиях ленты, поверхность которых совпадает с базисной плоскостью (0001), растут блочными в отличие от безблочных лент призматической ориентации [1,2].

В данной работе показано, что и для профилированных стержней имеет место зависимость развития блочности от кристаллографической ориентации затравки. Способом Степанова выращивались стержни сапфира круглого и квадратного сечений на затравки двух ориентаций **A** – $[11\bar{2}0]$ и **C** – $[0001]$. Условия выращивания в обоих случаях были одни и те же. Выращенные кристаллы обеих ориентаций разрезались перпендикулярно направлению вытягивания на круглые шайбы толщиной 4 мм, которые шлифовались и полировались до оптической прозрачности. Структура полученных таким образом образцов изучалась поляризационно-оптическим методом с помощью микроскопов МПС-2 и Полам и методом рентгеновской дифракционной топографии. Остаточные напряжения изучались методом коноскопии в срезах, перпендикулярных оптической оси [3].

Найдено, что в стержнях ориентации **C**, выращенных на несовершенную, блочную затравку идет развитие блочной структуры по мере выращивания. В начальной части стержня вид поляризационно-оптической картины аналогичен затравочному кристаллу. Затем идет кольцообразное развитие блоков с поверхности кристалла к центру. с уменьшением размеров блоков (400мм от затравки.). При затравлении на безблочную затравку удается получать безблочные стержни ориентации **C**.

В кристаллах ориентации **A** блочность обычно отсутствует. Изучены остаточные напряжения в образцах в форме шайб, вырезанных из безблочных стержней сапфира ориентации **C** диаметром 8, 12 и 23 мм. В кристалле диаметром 8 мм напряжения отсутствуют. Распределение остаточных напряжений в кристаллах 12 и 23 мм показаны на рис.

кривые 1,2. Максимальные напряжения – растягивающие – у поверхности кристаллов.

[1] П.И.Антонов, В.М.Крымов, Ю.Г.Носов, И.Л.Шульпина. Изв.РАН, Сер.физ. 2004, т.68, №6, с.777-783.

[2] И.Л. Шульпина, С.И.Бахолдин, В.М.Крымов, П.И. Антонов. Изв.РАН, Сер. физ. 2009, т. 73, № 10, с.1445-1250.

[3] А.В.Денисов, В.М.Крымов, Ю.О.Пунин, ФТТ, 2007, т.49, в.3, с.454-459.



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИДОМЕННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НИОБАТА ЛИТИЯ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА АКТЮАТОРОВ МАЛЫХ ПЕРЕМЕЩЕНИЙ

**Кубасов И.В., Быков А.С., Малинкович М.Д., Жуков Р.Н., Киселев Д.А.,
Ксенич С.В.**

*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия
kubasov.ilya@gmail.com*

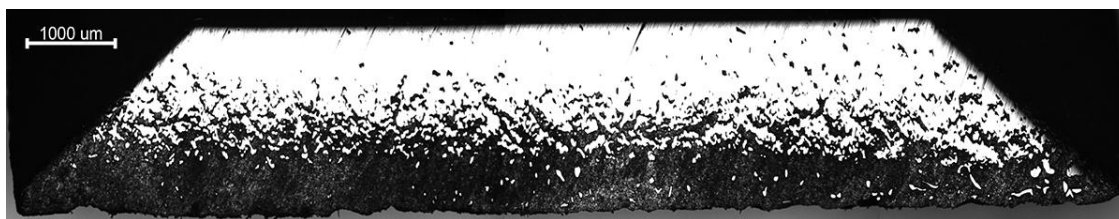
Устройства для осуществления малых перемещений с высокой точностью находят широкое применение в различных областях науки и техники. Одним из типов актюаторов для микро- и наноперемещений являются биморфы – структуры, состоящие из двух соединенных пластин сегнетоэлектрика с разнонаправленными векторами электрической поляризации.

Используемая для изготовления биморфов PZT-пьезокерамика имеет большой гистерезис, крип, нелинейность перемещений и узкий диапазон рабочих температур. Это ограничивает применимость таких актюаторов и затрудняет калибровку их параметров.

Таковыми недостатками не обладают кристаллы ниобата лития (LiNbO_3). Для создания биморфа необходимо сформировать в монокристаллической пластине бидоменную структуру с междоменной границей, залегающей посередине образца и параллельной плоскости пластины.

В ходе работы показана возможность формирования заданной доменной структуры в образцах LiNbO_3 , разработана технология получения кристаллов с заданным положением междоменной границы. Получены бидоменные монокристаллы ниобата лития толщиной 1,5 мм и 0,5 мм площадью до 10 см². Изготовлены образцы биморфных актюаторов. Проведены электромеханические испытания актюаторов. Для пластин различной площади и толщины измеренные перемещения составили от единиц до нескольких десятков микрометров при приложенном напряжении 300 В. Доказано, что зависимость перемещений от напряжения имеет линейный характер. Показана высокая усталостная прочность полученных биморфов – какой-либо заметной деградации структуры после 10 млн. рабочих циклов не обнаружено.

Актюаторы на основе бидоменных структур из монокристаллического ниобата лития могут применяться в устройствах сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ), использоваться для прецизионной настройки и юстировки квантовых оптических резонаторов, работать в качестве волноводов с прецизионно изменяемыми геометрическими характеристиками.



Протравленный косой шлиф LiNbO_3 с бидоменной структурой.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ФАЗОВОГО СОСТАВА КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

¹Кугаенко О.М., ¹Сагалова Т.М., ¹Петраков В.С., ²Бузанов О.А., ^{1,2}Базалевская С.С., ²Сахаров С.А.

¹НИТУ «МИСиС», Москва, crystalxxi@misis.ru

²ОАО «Фомос-Материалс», Москва

Пьезоэлектрические кристаллы семейства лангасита, обладающие высоким коэффициентом электромеханической связи, малым температурным коэффициентом частоты упругих колебаний, отсутствием фазовых переходов до предплавильных температур ($T_{пл} = 1470^\circ\text{C}$), в настоящее время широко используются в акустоэлектронике и пьезотехнике в датчиках физических величин при температурах до 600°C , с перспективой дальнейшего расширения температурного интервала до $1000\text{—}1200^\circ\text{C}$.

В то же время, необходимость получения устойчивых характеристик изготавливаемых из них устройств, ориентированных на работу в условиях переменных температурных и механических нагрузок, требует исследования температурной устойчивости и структурного совершенства кристаллов, контроля теплофизических параметров [1], механизмов деградации свойств в высокотемпературной области применения.

Целью работы является исследование температурной устойчивости фазового состава кристаллов семейства лангасита. Проведены высокотемпературные рентгенодифракционные исследования фазового состава и параметров кристаллической решетки измельченных в порошок монокристаллов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$, $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ и $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}:\text{Al}$ на рентгеновском дифрактометре D8 Advance при симметричной съемке θ - 2θ с использованием CuK_α излучения ($\lambda = 1,54178 \text{ \AA}$), при глубине анализируемого слоя, не превышающей 3 мкм от поверхности кристаллитов порошка. Рентгеновскую съемку проводили в вакууме 10^{-3} мм. рт. ст. при нагреве исследуемых порошков в камере со скоростью $10^\circ\text{C}/\text{мин}$ от комнатной температуры до 1200°C с изотермической выдержкой каждые 200°C в течение 1 часа и затем съемкой при каждой температуре рентгенодифрактограммы в течение 0,5 часа со скоростью 50 с на точку. После съемки процесс нагрева продолжался.

Исследования температурной устойчивости фазового состава показали, что:

– фазовый состав всех исследованных порошков стабилен при отжиге до температуры 1000°C ;

– отжиг при температуре 1200°C приводит к появлению на дифрактограммах дополнительных отражений, связанных с образованием двойных и тройных фаз элементов, входящих в состав исследованных кристаллов (La_2O_3 , $\text{La}(\text{GaO}_3)$, TaO_2 , $\text{La}(\text{TaO}_4)$ и др.) и обедненных галлием;

– фазовый состав кристаллов остается стабильным при отжиге в течение четырех часов при температуре 600 и 1000°C в вакууме и 1200°C на воздухе;

- в результате отжига лангасита при 1000°C в вакууме происходит изменение параметров кристаллической решетки a и c , очевидно, связанные с обеднением галлием приповерхностного слоя в связи с образованием летучего окисла галлия.

Определенные в работе высокая термостабильность фазового состава кристаллов, температурные зависимости теплофизических параметров и их анизотропии, позволяют прогнозировать условия работоспособности пьезоэлектрических кристаллов семейства лангасита в широком интервале температур.

Список использованной литературы:

1. Основные теплофизические параметры монокристаллов лангасита ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$), лангасита ($\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$) и катангасита ($\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$) в интервале температур от комнатной до 1000°C / О.М. Кугаенко, С.С. Уварова, О.А.Бузанов и др./ - Известия РАН. Серия физическая, 2012, том 76, С. 1406-1411.

МИКРОСТРУКТУРА И УСТАЛОСТНАЯ ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

¹Кугаенко О.М., ¹Петраков В.С., ²Бузанов О.А., ^{1,2}Базалевская С.С., ²Сахаров С.А.,
³Гастрок Й.

¹НИТУ «МИСиС», Москва, crystalxxi@misis.ru

²ОАО «Фомос-Материалс», Москва

³ПООО «Цвик ГМБХуКо. КГ», Москва

Лангасит (ЛГС), самый известный лантан-галлиевый силикат, с химической формулой $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, был впервые синтезирован в начале 80-х годов [1,2]. Лантан-галлиевый танталат (ЛГТ, $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{4,5}\text{O}_{14}$), изоморф лангасита (ЛГС, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) – перспективный пьезоэлектрик.

В двигателях внутреннего сгорания пьезоэлементы датчиков находятся в экстремальных условиях переменных нагрузок, как механических, так и термических, их разрушение происходит вследствие усталости. Для прогнозирования работоспособности элементов необходимо изучение механизмов их разрушения и причин деградации в процессе работы структуры и свойств кристаллов. Исследование усталости и разрушения при циклических нагрузках таких хрупких материалов как монокристаллы ЛГТ является актуальной задачей. Цель работы заключалась в исследовании механизмов деформации монокристаллов ЛГТ и закономерностей их разрушения в условиях термомеханических и переменных механических нагрузок.

Материалом для испытаний служили монокристаллы лантан-галлиевого танталата, которые относятся к тригональному классу симметрии 32. Монокристаллы ЛГТ выращены по методу Чохральского на предприятии ОАО «Фомос-Материалс».

Исследование усталостной прочности кристаллов ЛГТ проводили при комнатной температуре в режиме циклического знакопостоянного нагружения сжатием на высокочастотном пульсаторе с электромагнитным резонансным приводом Amsler 20 HFP 5100 фирмы Zwick/Roell. Наибольший размах нагрузки достигал 20 кН/см^2 , что соответствовало 0,5 предела прочности кристаллов при комнатной температуре.

Величина предела усталостной прочности кубических образцов исследованных кристаллов ЛГТ при комнатной температуре при асимметричном циклическом нагружении сжатием при приложении нагрузки по направлениям осей X, Y и Z с частотой около 100-150 Гц составляет $10 - 15 \text{ кН/см}^2$ при количестве циклов нагружения $3 \cdot 10^5$ (без образования видимых макротрещин).

После селективного травления выявлено, что поверхность сколов разрушенных образцов имеет сложную ручьевую структуру с высокой плотностью дислокаций, связанную с высокими напряжениями в кристалле.

Проведенные исследования показали, что после приложения к кристаллам при комнатной температуре циклических механических нагрузок в кристаллах ЛГТ наблюдается значительное изменение микроструктуры, связанное с увеличением плотности дислокаций, возрастающей по сравнению с исходной на 4-5 порядков, двойникование и образование мезоструктуры, характерной для пластичных металлов. Такое изменение структуры указывает на проявление при комнатной температуре эффекта пластичности в хрупких пьезоэлектрических кристаллах ЛГТ.

АНИЗОТРОПИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

¹Кугаенко О.М., ¹Петраков В.С., ¹Сенатулин Б.Р., ²Бузанов О.А., ^{1,2}Базалевская С.С.,
²Сахаров С.А.

¹НИТУ «МИСиС», Москва, crystalxxi@misis.ru

²ОАО «Фомос-Материалс», Москва

К настоящему времени кристаллы группы лангасита являются наиболее перспективными пьезоэлектрическими материалами для устройств акустоэлектроники и пьезотехники нового поколения и могут с успехом заменить традиционно используемые пьезоэлектрические материалы – пьезокерамику и α -кварц. По сравнению с традиционными материалами, применяемыми в датчиках физических величин, монокристаллы семейства лангасита имеют ряд преимуществ, связанных с термостабильностью пьезоэлектрических характеристик, отсутствием пироэлектрического эффекта и отсутствием фазовых переходов до температуры плавления 1450 °С. Эффективность применения кристаллов связана с высоким коэффициентом электро-механической связи (КЭМС), почти в 3 раза превышающим КЭМС кварца, что позволяет создавать пьезоэлементы, работающие на прямом пьезоэффекте. Необходимость создания на основе монокристаллов устройств акустоэлектроники и пьезотехники с устойчивыми характеристиками и для работы в условиях высоких температур определила актуальность исследования основных теплофизических характеристик монокристаллов семейства лангасита в интервале температур от комнатной до 1473К.

Материалом для испытаний служили монокристаллы семейства лангасита: лангасита ($La_3Ga_5SiO_{14}$), лангатата ($La_3Ta_{0.5}Ga_{5.5}O_{14}$), катангасита ($Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$), которые относятся к тригональному классу симметрии 32. Монокристаллы ЛГТ выращены по методу Чохральского на предприятии ОАО «Фомос-Материалс»[4]. Теплофизические параметры: коэффициенты температуропроводности, теплопроводности, термического расширения монокристаллов ЛГС, ЛГТ и катангасита исследовали в основных кристаллографических направлениях $[100]$, $[1\bar{1}0]$ и $[2\bar{1}0]$, в интервале температур от 25 до 1000 °С (300 – 1300 К).

Во всех исследуемых монокристаллах с увеличением температуры от комнатной 300К до 1300К наблюдается уменьшение коэффициентов температуропроводности χ и теплопроводности λ : в среднем до 50 % в направлении $[100]$ и до 15 % в направлении $[1\bar{1}0]$ и $[2\bar{1}0]$. Это нелинейное уменьшение χ и λ связано с возрастающим рассеянием фононов, обусловленным увеличением амплитуды колебания ионов кристаллической решетки. Характерным для всех кристаллов является высокотемпературный участок при нагреве выше 700 К, где коэффициент теплопроводности имеет постоянное значение и не зависит от температуры.

В основных кристаллографических направлениях X, Y и Z кристаллов в интервале температур от комнатной до 1300 К выявлена анизотропии температуропроводности и теплопроводности, проявление анизотропии уменьшается с ростом температуры. а при T выше 1000 С коэффициент анизотропии не зависит от температуры и остается постоянным. При конструировании устройств на основе монокристаллов семейства лангасита необходимо учитывать как температурную зависимость теплофизических характеристик, так и уменьшение степени анизотропии свойств с ростом температуры.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОУДАРА НА МИКРОСТРУКТУРУ КРИСТАЛЛОВ ЛГТ

¹Кугаенко О.М., ¹Петраков В.С., ¹Табачкова Н.Ю.,
^{1,2}Базалевская С.С., ²Бузанов О.А., ²Сахаров С.А.
¹НИТУ «МИСис», Москва, crystalxxi@misis.ru
²ОАО «Фомос-Материалс», Москва

Монокристалл лантан-галлиевого танталата (ЛГТ, $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$), изоморф лангсита (ЛГС, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) – перспективный пьезоэлектрик, эффективность применения кристалла связана с высоким коэффициентом электромеханической связи (КЭМС), что позволяет создавать пьезоэлементы, работающие на прямом пьезоэффекте. Монокристаллические пьезоэлементы из ЛГТ активно используются для датчиков давления и температуры. В двигателях внутреннего сгорания пьезоэлементы датчиков давления находятся в экстремальных условиях переменных нагрузок, как механических, так и термических, их разрушение происходит вследствие термоудара и усталости. Изменение состояния материалов при воздействии термомеханических нагрузок отражается на их механических свойствах, макро- и микроструктуре. Усталостной прочности металлов и сплавов посвящено большое количество монографий и публикаций, в работе [1] представлены результаты исследования усталости и разрушения при циклических нагрузках хрупких материалов ЛГТ. Цель данной работы заключалась в исследовании термостойкости монокристаллов ЛГТ, которая оценивалась по термоудару закалкой в воду комнатной температуры 25°C образцов, нагретых до температур 100 - 1000°C. После закалки от температур не выше 120 °C в образцах нет разрушений, но возрастает плотность дислокаций до 10^8 см^{-2} , что подтверждает механизм образования дефектов и дислокаций при релаксации термических напряжений, возникающих в кристаллах при закалке. Закалка от температур, превышающих 200 °C (рис.1) приводит к множественному разрушению кристаллов, при этом трещины распространяются в одном направлении для всех образцов, близком к $1\bar{1}20$. Медленное охлаждение кристаллов от 1000°C в течение суток снимает напряжения в кристалле и приводит к уменьшению плотности дислокаций ниже исходной.

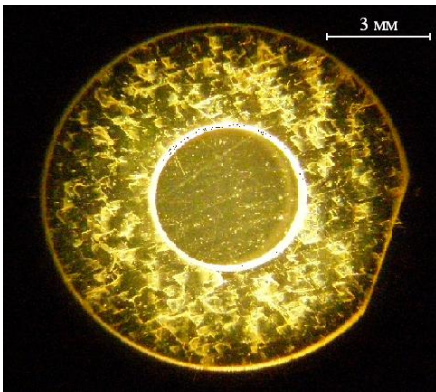


Рис. 1 – разрушение пьезоэлемента ЛГТ для датчиков давления после закалки - 300 °C

Исследование морфологии разрушения и прямого продольного пьезоэлектрического эффекта показали, что при термоударах закалкой от температур 100-1000C на противоположных сторонах пластин ЛГТ X-среза разность потенциалов достигает от 20 до 400 кВ/см. Возникающее в результате пьезоэффекта электрическое поле снижает порог развития трещин в кристалле, приводит к перестройке дислокационной структуры, двойникованию и значительно снижает температуру начала пластической деформации в хрупких кристалл

Список использованной литературы:

1. Пластическая деформация пьезоэлектрических кристаллов лантан-галлиевого танталата при циклических механических воздействиях / О.М. Кугаенко, С.С. Уварова, Бузанов О.А., и др. / - Журнал «Деформация и Разрушение материалов», №2, 16-21.

АНАЛИЗ СИГНАЛОВ ФОТОЭДС, ПОЛУЧЕННЫХ РЕГИСТРАЦИЕЙ ЭРОЗИОННОГО ФАКЕЛА В МОМЕНТ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МЕТАЛЛИЧЕСКУЮ ПОВЕРХНОСТЬ

Кузнецов П.М., Федоров В.А.

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Тамбов, Россия, E-mail: feodorov@tsu.tmb.ru

Цель работы: исследовать структурно – временные характеристики колебаний фотоэдс, вызванных свечением эрозионного факела методом вейвлет-преобразования. В работе [1] получены частотные характеристики колебаний фотоэдс разложением в фурье-спектры. Вместе с тем, определить частотно-временные характеристики сигналов невозможно разложением только в спектр Фурье. В связи с этим, для определения частотно-временных характеристик колебаний фотоэдс в течение импульса, проводили разложение относительного фотоэдс-сигнала в вейвлет разложение алгоритмом быстрого фурье преобразования. Разложение полученных сигналов в вейвлет – спектр проводили в программе Matlab R2010b по алгоритму, предложенному в [2]. Преимущество такого алгоритма состоит в малой затрате вычислительных ресурсов для достижения высоких значений временного масштабного коэффициента. При разложении каждого временного ряда использовали семейство вейвлетов DOG (derivative of a Gaussian). DOG-вейвлет достаточно широкий в пространстве Фурье, что не позволяет выявить тонкой структуры глобального спектра вейвлет-преобразования (дисперсии). Тем не менее, полученные вейвлет-спектры пригодны для анализа пикового состава временных рядов. Глобальный вейвлет-спектр (дисперсия) позволяет качественно проследить эволюцию вклада низкочастотной составляющей в фотоэдс-сигнала при изменении интенсивности. Положение максимумов дисперсии для различных интенсивностей лазерного излучения представлены в таблице 1. Видно, что при уменьшении интенсивности происходит смещение максимумов в сторону уменьшения временного масштаба. Вклад в сигнал высокочастотной составляющей увеличивается. Следовательно, в спектре колебаний интенсивности эрозионного факела преобладают высокие частоты, что подтверждает выводы, сделанные в [1].

Таблица 1. Положение максимумов глобального вейвлет – спектра.

$3,28 \cdot 10^5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$	$3,28 \cdot 10^5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$	$2,64 \cdot 10^5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$	$2,21 \cdot 10^5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$	$1,53 \cdot 10^5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$
3420 (мкс)	2876 (мкс)	2225 (мкс)	1871 (мкс)	2418 (мкс)

Таким образом, при уменьшении интенсивности лазерного излучения увеличивается вклад высокочастотной составляющей в вейвлет-спектр фотоэдс-сигналов. Это говорит о том, что образование эрозионного факела при облучении металлической поверхности высокой интенсивностью лазерного излучения связано с окислительными процессами на поверхности кратера и горением микрокапель расплава, чем может быть объяснено увеличение временного масштаба. При облучении поверхности низкой интенсивностью горение происходит только на неоднородностях поверхности, это приводит к уменьшению временного масштаба в вейвлет-спектрах.

1. Кузнецов П.М. Федоров В.А. Особенности колебаний интенсивности эрозионного факела при воздействии лазерного излучения на металлическую поверхность // Вестник Тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки. Издательский дом ТГУ им. Г.Р. Державина. г. Тамбов. 2013. Том 18. вып. 1. С. 144 – 147.

2. Torrence, C. and G.P. Compo. A Practical Guide to Wavelet Analysis // Bull. Am. Meteorol. Soc. 79. 1998. P. 61–78.

КРИСТАЛЛЫ $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ДЛЯ НЕОХЛАЖДАЕМЫХ ЯДЕРНЫХ ДЕТЕКТОРОВ

Кульчицкий А.Н., Кульчицкий Н.А., Мельников А.А.

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики
(Технический университет), г.Москва, РФ, n.kulchitsky@gmail.com*

Монокристаллы твердых растворов теллуридов кадмия и ртути являются перспективным материалом для создания детекторов ионизирующих излучений, работающих при температурах вблизи комнатной. Анализ процессов выращивания монокристаллов $CdZnTe$, показывает существенные преимущества газофазного метода по сравнению с жидкофазным. В частности, газофазный метод выращивания обеспечивает получение монокристаллов с низкой плотностью дислокаций, меньшими размерами и количеством включений второй фазы, а также меньшей плотностью малоугловых границ.

Выращивание монокристаллов твердых растворов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ из паровой фазы проводилось на установке, которая включает печь, обеспечивающую температуру в рабочей зоне до $1250^{\circ}C$, вакуумный узел, механизм перемещения печи, узел крепления, юстировки и вращения ампулы. В качестве исходных веществ использовались порошки теллурида цинка и теллурида кадмия с содержанием примесей не более 10^{-4} масс.%. С целью очистки исходных порошков от неконтролируемых примесей и получения поликристаллических исходных веществ, имеющих более высокую плотность, исходные порошки пересублимировались в вакууме. В качестве затравок использовались монокристаллические пластины $ZnSe$, $ZnTe$ и $CdTe$ толщиной 1.0-1.5 мм с ориентацией (111) вырезанные из монокристаллов, выращенных из расплава по Бриджмену или из паровой фазы. Выращивание монокристаллов твердых растворов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ проводилось в кварцевых ампулах диаметром 25 - 45 мм в различных газовых средах: H_2 , H_2+Ar , Ar .

Были выращены кристаллы твердых растворов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ диаметром 30-50мм, объемом до $50 \cdot 10^3$ мм³ с содержанием Zn от 4 до 35 мол.% на различных подложках ($ZnSe$, $ZnTe$, $CdTe$), при вариации ростовой атмосферы (H_2 , Ar , H_2+Ar), температуры роста, перепада температуры подложка – источник. На подложках $ZnSe$, $ZnTe$ во всех реализуемых условиях роста получились текстурированные кристаллы с размерами зерен от 2-3 до 7-10 мм², при этом удельное сопротивление монокристаллических зерен изменялось в диапазоне 10^2 - $2 \cdot 10^3$ Ом·см. На подложках $CdTe$ были выращены достаточно совершенные монокристаллы. Важно отметить низкую плотность дислокаций в материале, выращенном газофазным методом, которая не превышала $5 \cdot 10^4$ см⁻², достигая в некоторых случаях $\sim 10^3$ см⁻², плотность малоугловых границ составляла от 4 до 20 см⁻¹. Структурное совершенство выращенных кристаллов оценивалось по спектрам люминесценции. Как правило, в спектрах наблюдалась только узкая полоса экситонной люминесценции, а краевая и примесная полосы отсутствовали, что свидетельствует о высокой степени чистоты и структурного совершенства кристаллов. Все кристаллы обладали р-типом проводимости. Удельное электрическое сопротивление отдельных образцов составило $8 \cdot 10^{10}$ Ом·см. Наиболее совершенные монокристаллы были использованы для создания макетов полупроводниковых детекторов ионизирующих излучений.

СОВРЕМЕННЫЕ ПРИБОРЫ НА ОСНОВЕ ТЕЛЛУРИДОВ КАДМИЯ И ЦИНКА

Кульчицкий Н.А., Мельников А.А.

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики
(Технический университет) , г.Москва, РФ, n.kulchitsky@gmail.com*

В работе обсуждается современное состояние мировых рынков CdTe, ZnTe и CdZnTe, получивших бурное развитие в последние годы, дан анализ тенденций их развития. Рассмотрены особенности технологии роста кристаллов халькогенидов цинка и кадмия и их твердых растворов; проведен анализ характеристик получаемых материалов, приборов на их основе, а также основных производителей. Основными рынками сбыта материалов являются рентгеновские и гамма-детекторы излучения, солнечная энергетика, инфракрасные детекторы, технологии терагерцового диапазона [1].

Кристаллы твердых растворов CdZnTe являются наиболее перспективным материалом для неохлаждаемых полупроводниковых рентгеновских детекторов и гамма-излучения. Детекторы на основе теллуридов кадмия-цинка работают при комнатной температуре и могут обрабатывать более $2 \cdot 10^6$ фотонов в секунду на мм^2 . Уникальная комбинация спектроскопии и очень высокой скорости счета при комнатной температуре делает CdZnTe идеальным материалом для детектора ядерных излучений. Глобальный объем рынка CdZnTe кристаллов для детекторов излучения составляет около 100 млн. долларов США.

По своим характеристикам CdTe является перспективным материалом для производства фотоэлектронных преобразователей. В 2012 году рынок солнечных батарей на основе CdTe составил 1.5 ГВт, что составит 6% общего рынка. Компания First Solar (США) развернула в 2010 г. производственные мощности свыше 1 ГВт/год. На сегодняшний день рынок поликристаллической крошки из теллурида кадмия для распыления в процессе производства ФЭП на основе CdTe составляет порядка 80 млн.\$ США.

Монокристаллы CdZnTe используются в качестве подложек для производства инфракрасных детекторов на основе CdHgTe. Объем рынка монокристаллов теллуридов кадмия-цинка для производства детекторов составляет около 190 млн.\$ США в год в денежном выражении и порядка тонны монокристаллических образцов в год – в натуральном выражении. Наибольший прирост ожидается в сегменте тепловидения для применений в пожарных службах, в секторах машиностроения и автомобилестроения.

Освоение THz-технологий только начинается и в течение ближайших 10-15 лет ожидается значительный рост. Применение THz-устройств может значительно возрасти за счет рынков телекоммуникации, медицины, микроскопии, оборонного сектора и обеспечения безопасности объектов. В число кристаллических материалов, используемых в THz-устройствах, входит ZnTe. Одним из наиболее крупных рынков, на который может войти оборудование THz-диапазона, является рынок телекоммуникаций, который оценивается в 20 млрд.\$ США. Рынок материала при этом оценивается в 20-30 млн.\$ США в год.

Лимитирующим фактором для развития рассмотренных областей в посткризисный период станет производство теллура (кадмий является несколько более доступным материалом), поэтому существует опасность роста цен на теллур.

Литература

1. Н.А.Кульчицкий, А.А. Мельников. Нано- и микросистемная техника, №6, с.9, 2011

АМД-МЕТОДЫ, КАК МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ НАДЁЖНОСТИ И ДОСТОВЕРНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЙ КАЧЕСТВА МАТЕРИАЛОВ

А.И. Кустов, ⁽¹⁾ **И.А. Мигель**

Воронежский государственный педагогический университет, Россия
⁽¹⁾ ВУНЦ ВВС ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина, (Воронеж), Россия
 E-mail: akvor@yandex.ru

АМД-методы являются новыми методами неразрушающего контроля и существенно дополняют количество информации о структуре материалов, параметрах системы дефектов в них. Благодаря природе акустических волн (АВ) получают подповерхностные изображения структур на различной глубине, определяются значения скорости и уровня затухания, упругие модули, дисперсия свойств и проч. АМД-методы основаны на различии коэффициентов прохождения и трансформации АВ на границе объекта исследований и могут быть определены исходя из представлений авторов [1]. В соответствии с ними можно получить выражения для расчета коэффициентов отражения и трансформации:

$$R_L = \frac{Z_L \cdot \cos^2 2\theta_s + Z_S \cdot \sin^2 2\theta_s - \tilde{Z}}{Z_L \cdot \cos^2 2\theta_s + Z_S \cdot \sin^2 2\theta_s + \tilde{Z}}, \quad (1)$$

$$T_L = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \frac{2Z_L \cdot \cos 2\theta_s}{Z_L \cdot \cos^2 2\theta_s + Z_S \cdot \sin^2 2\theta_s + \tilde{Z}}, \quad (2) \quad T_S = \left(-\frac{\rho_l}{\rho_s} \right) \cdot \left(\frac{2 \cdot Z_S \cdot \sin 2\theta_s}{Z_L \cdot \cos^2 2\theta_s + Z_S \cdot \sin^2 2\theta_s + \tilde{Z}} \right), \quad (3)$$

где \tilde{Z} , Z_L , Z_S - импедансы продольных и поперечных АВ в соответствующих средах:

$$\tilde{Z} = \frac{\rho_l v_l}{\cos \theta_l}; \quad Z_L = \frac{\rho_s v_L}{\cos \theta_L}; \quad Z_S = \frac{\rho_s v_S}{\cos \theta_S}. \quad (4)$$

Для рассмотрения таких важных параметров визуализации как глубина проникновения АВ, продольная и поперечная абберации, разрешающая способность необходимы не амплитудные значения коэффициентов (1 - 3), а энергетические. Связь между ними устанавливается следующими выражениями: $RL = 100 \cdot R_L^2$; (5)

$$TL = 100 \cdot \frac{\tilde{Z}}{Z_L} \cdot T_L^2 \cdot \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \right)^2; \quad (6) \quad TS = 100 \cdot \frac{\tilde{Z}}{Z_S} \cdot T_S^2 \cdot \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \right)^2. \quad (7)$$

Построенные на основе этой теории предоставляют ряд преимуществ, проявление которых представлено на рисунках.

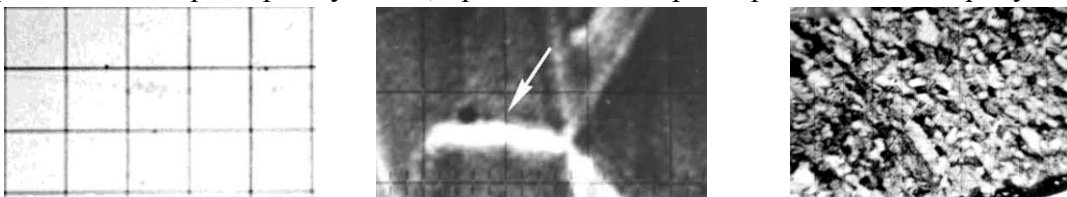


Рис. 1. а) оптика, 400^x; б) акустика, сталь с трещиной, масштаб: 24 мкм/дел на глубине ~68 мкм; в) мартенситная сталь (ст.10X12H2BMФ, масштаб: 20 мкм/дел., Z = - 17 мкм).

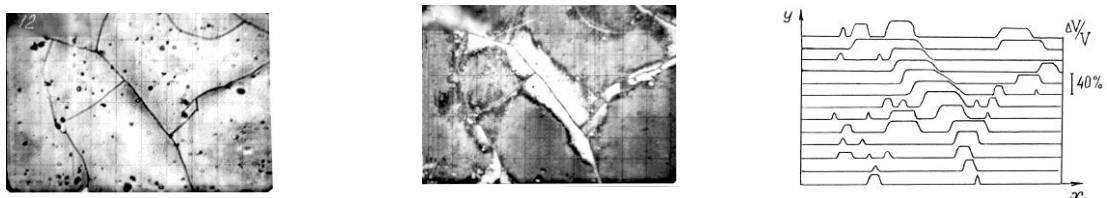


Рис. 2. Акустомикроскопические изображения (а и б) покрытия из никеля на керамике ЦТС-35 (ИЖ-вода, масштаб 40 мкм/дел., а) Z = -1 мкм и б) Z = -3 мкм, f = 409 МГц) и скан раstra с шагом 25 мкм (в).

Литература:

1. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах // М., 1957 – 372 с.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ФИЗИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ АМД-МЕТОДАМИ

А.И. Кустов, ⁽¹⁾ И.А. Мигель

Воронежский государственный педагогический университет, Россия

⁽¹⁾ ВУНЦ ВВС ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина, (Воронеж), Россия

E-mail: akvor@yandex.ru

В настоящее время остаётся актуальной задача контроля уровня свойств материалов, и, прежде всего, с точки зрения оценки влияния на них внешних физических воздействий. Такая оценка эффективна при использовании АМД-методов [1,2], которые позволяют отслеживать как изменение дефектной структуры, так и определять значения ряда физических параметров самого материала. Методы АМД позволяют рассчитывать значения скорости v_R поверхностных акустических волн (ПАВ) в материалах. Этот физический параметр тесно связан с величинами, характеризующими внешние воздействия на материал, с такими важными характеристиками объектов исследования как упругие модули, коэффициент поглощения акустических волн, степень анизотропности структуры и проч. Измеряя значения параметров ПАВ, например, v_R и $(\Delta V/V\%)$, при механической деформации, термообработке различных типов (закалке, например), диффузии с помощью АМД-методов оценивают толщину приповерхностных слоёв, получаемых при внешних воздействиях, рассчитывают влияние этих процессов на структуру материалов. Результаты исследований приведены на рис.1-2.

На рис.1 представлены V(Z)-кривые, демонстрирующие изменение формы и высоты главного максимума после проведения операции цементации, а также уровень поглощения АВ на различной глубине от поверхности образцов. Рис.2 демонстрирует влияние деформации и времени обработки на значения v_R , а также на уровень затухания ПАВ.

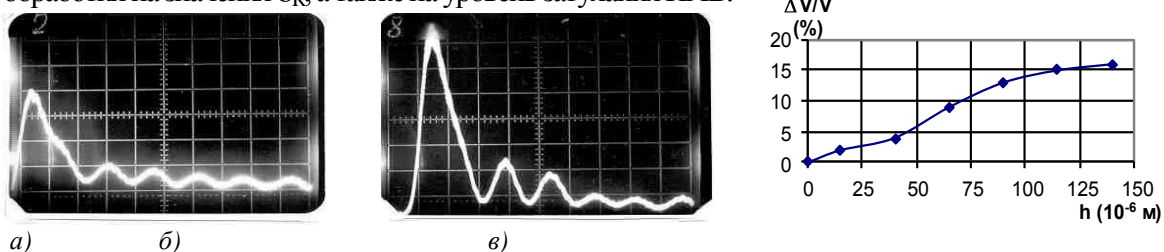


Рис. 1. Трансформация V(Z)-кривой в стали 30ХГСМ1 ($v_R = 3,18 \cdot 10^3$ м/с, $\Delta Z_N = 14,68$ мкм, $(\Delta V/V\%)_{\max} = 37\%$, масштаб по вертикали 1 дел.=0,25 В, по горизонтали – 1 дел.=12,2 мкм) после цементации при 940°С, 2 часа и (c) - зависимость затухания АВ ($\Delta V/V\%$) в стали 40ХН от глубины зондирования (h).

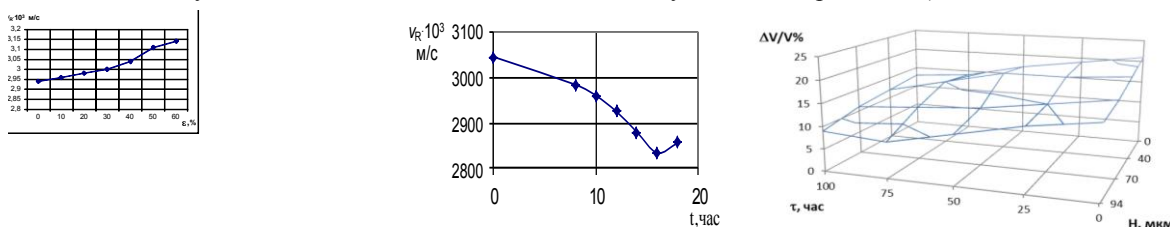


Рис. 2. Зависимости скорости ПАВ в стали от степени деформации, времени цементации, а также изменение уровня затухания АВ ($\Delta V/V\%$) от параметров воздействия на материал и глубины зондирования (H).

Таким образом, с помощью АМД-методов надёжно и эффективно определяется степень влияния внешних воздействий на свойства изучаемых материалов.

Литература

1. Wilson R.G., Weglein R.D. // Appl. Phys. 1994. V. 55. N 9. P. 3261 —3275.
2. Кустов А.И., Мигель И.А. // Материаловедение, 2010, №2 (155), с.9-14.

РАЗРАБОТКА СПОСОБОВ ОБНАРУЖЕНИЯ И ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ДЕФЕКТОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ АМД-МЕТОДАМИ

А.И. Кустов, ⁽¹⁾ И.А. Мигель

Воронежский государственный педагогический университет, Россия

⁽¹⁾ ВУНЦ ВВС ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина, (Воронеж), Россия

E-mail: akvor@yandex.ru

В настоящее время актуальна проблема обнаружения и характеристики дефектов полупроводников. Её решение позволит не только существенно повысить характеристики устройств, но и существенно снизить затраты, благодаря отбраковке материалов с дефектами на ранних стадиях. Для решения этой проблемы перспективны АМД-методы, использующие, как минимум, два направления – визуализацию структуры и измерение количественных параметров по $V(Z)$ -кривым. Последнее направление связано с такими важными характеристиками объектов как упругие модули, коэффициент поглощения акустических волн, степень анизотропности структуры и проч. Результаты разработки АМД-методов выявления дефектов полупроводников представлены на рис. 1-4.

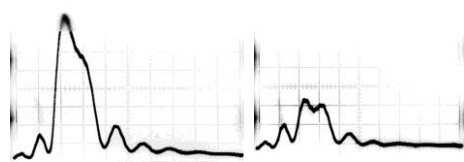


Рис. 1. Трансформация $V(Z)$ -кривой в районе микротрещины в $Ge <111>$ ($v_R = 2,87 \cdot 10^3$ м/с, $\Delta Z_N = 13,25$ мкм, $(\Delta V/V\%)_{max} = 68\%$, масштаб по вертикали 1 дел. = 0,25 В, по горизонтали – 1 дел. = 11 мкм; расстояния от центра а) 40 мкм, б) 0 мкм).

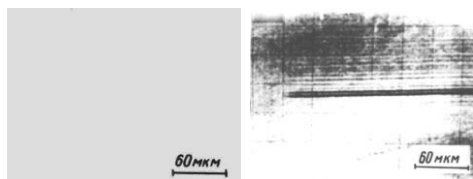


Рис.2. Выявление микротрещины в $Si <111>$ под слоем Al (слева – оптика, справа - акустика).

Рис.3. Выявление микродефектов в стекле в режиме $V(Z)$ -кривых.

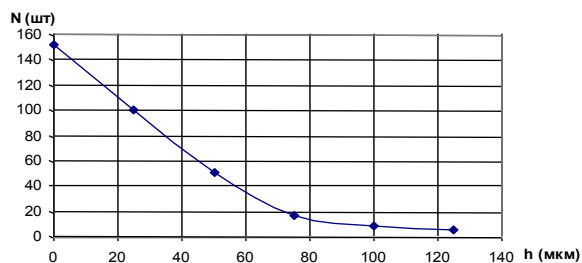
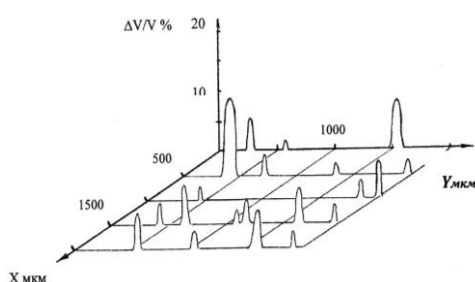


Рис.4. Зависимость количества N выявленных микротрещин в режиме $V(Z)$ -кривых

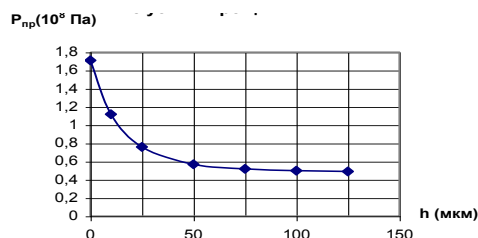
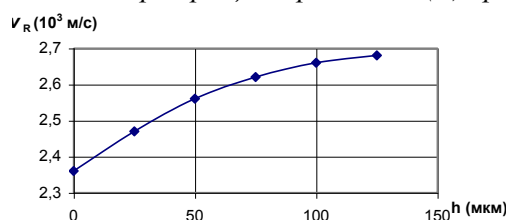


Рис. 5. Зависимость прочности стекла (K-108) от глубины трещин

Рис. 6. Зависимость скорости ПАВ от толщины снятого слоя.



Таким образом, с помощью САМ в полупроводниковых и диэлектрических материалах, удастся выявлять и рассчитывать количество, глубину залегания, размеры образующихся микротрещин, оценивать реальную прочность стекол и полупроводников.

Lissowski A.

Comp. Section Soc. Polish Free University, Warsaw, Poland, aliss5h7@engineering.com

Triple junctions (TJ) of grain boundaries (GB) in graphene are recently investigated as main centers for cracks, elucidated by Boris Yakobson as TJ additional hepta- or pentagonal disclination, shown in Fig.1-2 of Nano Lett. 13:1829 2013. Emerging pattern of 5-, Hexa-, 7-gonal close-packing (5H7) in polycrystalline graphene will soon confirm proposed below understanding of 2D polycrystal, developed with atomistic simulation, but started more than half a century ago from fascination about 5H7 in phyllotaxis. 2D polycrystal rarely exhibits closed loops around grains, because two only possible TJ (with additional hepta- or pentagonal disclination) are preferably alternating along GB, promoting even sided grains. Near GB with two not alternating TJ, some of four nearest low-angle GB easily disperse into 5/7 edge dislocations. Even-sided (2,4,6,8...) grains with alternating consecutive TJ are more possible, but are rare because grain growth involves the same kind GB also. In extended tri-crystal only even-sided loops are possible. Proofs: TJ with grains G1a/G2/G3 alternate with TJ of G1b/G3/G2 along GB between G2 and G3, if both outside grains G1a and G1b are of the same orientation. If both TJ have 2 coincident GB with sigma s1 and s2 as prime numbers $3*k+1$ (k =integer), third GB have $s3=s1*s2$. Then e.g. TJ with s1 s2 s3 alternate with TJ s3 s2 s1 along GB s2. As proof of it is alike fundamental chirality of reflected triangles, the consequence of it must be equally fundamental. Similar lecture at 19th ISMANAM 2012 proposed, that it may be preferable alternating of TJ 5 or 7 as vortex and anti-vortex of Berezinsky–Kosterlitz-Thouless kind.

At MIT conference "Shaping of tissue by deviation from hexagonal close-packing of cells" (1970) presented were lectures: John Werner Cahn "Euler Law and penta-hepta defects", Cyril Stanley Smith "Cells, grains, GB, TJ - topology in metallurgy and biology - John von Neumann n-6" (n =number of neighbors), Lissowski "Polygonal close-packing of cells in works of Frederic Thomas Lewis, 5 and 7 disclinations, GB from 5/7 dislocations", Arthur Loeb "Buckminster Fuller 5H7 domes", Conrad Hal Waddington "Rene Thom morphogenesis with polycrystal dislocations, disclinations etc." and similar. Films of Bragg-Nye model and similar one by David Turnbull were shown. In Herbert Gleiter and Lissowski, Z. Metallkde 62 (1971) about sigma 7 GB, our work with Cahn about other coincident GB was announced. Our work with Cahn continued at National Bureau of Standards after lecture "Crystallization as rearrangement of GB and dislocations" at Symposium on Comp.Films in Phys.Chem. Research 1978, introducing Steinhaus-Voronoi centroidal iterations. Simulated crystallizations of very large extended bi-crystals from coincident GB with sigma 7 (~ kagome Ising phase transition), 13, 19 ... were presented in 2002. Two alternating TJ were presented in prolonged lecture "Topological defects in Voronoi-Dirichlet packing" at International Congress of Mathematicians in 1983, cit.: "Two alternating TJ of GB allow only their even loops." from abstract published in "Proceedings of ICM 1983". Crystallization of large 2D polycrystal with only two possible TJ preferably alternating along GB, was presented in Lissowski and Ryszard Wojnar "Computer simulation of Bragg-Nye model of crystallization" at Int. Symp. "Structured Media" (2001 pp. 159-168). Helpful questions and discussions from Vladimir Iosifovich Alshits and Nikita Fedorovich Morozov after that presentation are duly acknowledged.

Delaunay triangulation dual to simulated centroidal Voronoi polygons enables better perception of anisotropy and deformation strain of 5H7 in animated clips. Saturated colors circle represents the angles (mod 60°) of neighbors bonds, so bonds of equilateral triangle have one color and one color abounds in grain. TJ in tri-crystal alternate by 3 colors order.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ СИСТЕМЫ $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$

Летко А.К., Савчук Г.К.

Государственное научно-практическое объединение “Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению”, г. Минск, РБ, letko@physics.by

Особенности диэлектрических свойств керамических материалов состава $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$ делают их чрезвычайно перспективными для использования в устройствах микроволновой техники, в частности, в качестве КЭ активных антенн.

Данная работа посвящена исследованию оптических свойств диэлектрических керамик системы $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$.

Исследования оптических свойств проводились на керамических образцах двух типов: состава $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$ и состава $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$, легированного ионами Bi .

Диэлектрические образцы были получены по двухстадийной керамической технологии. На первой стадии методом твердофазных реакций осуществлялся при температурах $(800-850)^\circ C$ синтез порошков состава $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$, на второй стадии проводилось спекание синтезированных порошков при температурах $(1100-1150)^\circ C$. Оксид висмута в количестве 1 масс.% вводился в керамические образцы на стадии спекания.

Измерения действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости в зависимости от частоты осуществлялись с помощью анализатора Agilent E4991 ARF Impedance/Material Analyzer и показали, что для керамик системы $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$ характерна дисперсия диэлектрической проницаемости. Основным свойством дисперсии ϵ является выполнение дисперсионных соотношений Крамерса–Кронига, при использовании которых были вычислены показатели поглощения и преломления (см. рис.).

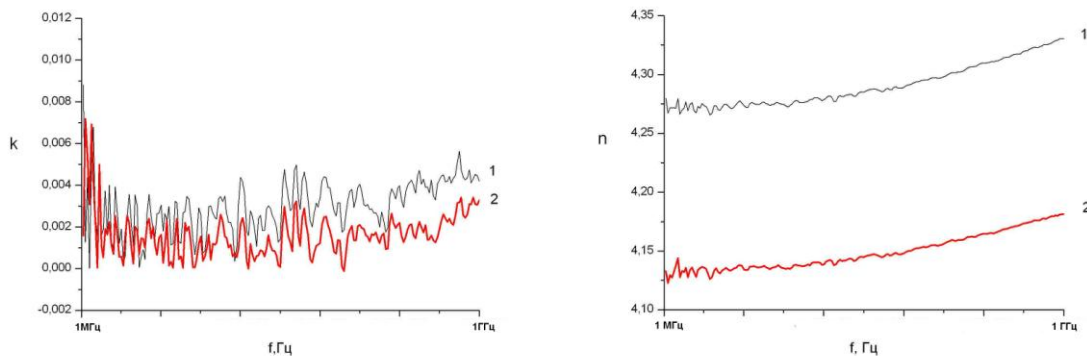


Рисунок – Зависимость показателя поглощения k и показателя преломления n от частоты для образцов нелегированной (1) и легированной висмутом керамики системы $(Zn_{1-x}Mg_x)-Ti-O$ (2)

В результате исследований установлено, что как в легированных, так и в нелегированных керамиках в исследуемом диапазоне частот (1МГц–1ГГц) скорость электромагнитных волн уменьшается ($v=c/n$), что может свидетельствовать об оптической поляризации диэлектриков в данном интервале частот, которая обусловлена упругим смещением электронов относительно ядер (главным образом, валентных). Получено, что в легированных образцах скорость распространения электромагнитных волн по абсолютному значению выше скорости в нелегированных керамиках. Показано, что в рассматриваемом интервале частот дисперсия диэлектрической проницаемости резонансного характера не носит.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА МИКРОТВЕРДОСТЬ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ

Литвиненко Н.Г., Загуляев Д.В., Комиссарова И.А.,
Коновалов С.В., Громов В.Е.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия
E-mail: konovalov@physics.sibsiu.ru

Изучению влияния магнитных полей (МП) на физико-механические свойства немагнитных монокристаллов посвящено большое число работ (см., например, [1–4]). Интерес к данному явлению не случаен, поскольку, кроме теоретического, оно имеет практическую значимость, например, при оценке изменения свойств материалов энергетических установок, в которых имеются магнитные поля. Влияние МП на пластические свойства поликристаллических металлов, обладающих парамагнитными свойствами, изучено недостаточно.

Целью работы является исследование влияния магнитных полей на микротвердость поликристаллической технической чистой меди.

Измерение микротвердости проводили с помощью микротвердомера «HVS-1000» для трех вариантов: без воздействия магнитного поля, сразу после выдержки в магнитном поле и после определенных интервалов времени; при этом варьировалось значение индукции магнитного поля и время выдержки в нем. Количественно эффект влияния магнитного поля характеризовался относительным изменением микротвердости. В качестве источника магнитного поля использовалась экспериментальная установка, основной частью которой являлся постоянный электромагнит, имеющий возможность регулирования индукции от 0 до 0,4 Тл.

Изучение влияния магнитного поля на микротвердость меди показало, что воздействие МП приводит к увеличению значения относительного изменения микротвердости на величину, зависящую от времени выдержки и значения индукции магнитного поля. После прекращения действия магнитного поля, по истечению определенных промежутков времени, микротвердость возвращается к исходному значению. Установлено, что микротвердость меди восстанавливается до исходного значения по сложному закону за время, зависящее от параметров магнитной обработки. Однако, начальный эффект влияния МП (наблюдающийся сразу после воздействия), в зависимости от индукции магнитного поля, напротив, для времен выдержки в магнитном поле 0,5 часа и 1 час, подчиняется линейному закону. Увеличение времени, прошедшего после экспозиции образцов в магнитном поле, приводит к уменьшению тангенса угла наклона прямой, как для значений времени выдержки в магнитном поле 0,5 часа, так и для значений 1 час. Причем зависимость тангенса угла наклона прямой от времени прошедшего после обработки магнитным полем имеют подобный характер для времени 0,5 и 1 час. Характерным при определении относительного значения микротвердости сразу после магнитной обработки является то, что увеличение индукции МП приводит к неизбежному росту значения микротвердости, также как и увеличение времени выдержки в нем.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 гг.» (Соглашения № 14.В37.21.1166 и 14.В37.21.0391).

1. Головин Ю.И. Магнитопластичность твердых тел (Обзор) // ФТТ. 2004. № 5. С. 769–803.
2. Альшиц В.И. Магнитопластический эффект: основные свойства и физические механизмы // Кристаллография. 2003. № 5. С. 826–854.

ОСОБЕННОСТИ УПОРЯДОЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ НИОБАТА ЛИТИЯ

Литвинова В.А., Литвинова М.Н.

*Дальневосточный государственный университет путей сообщения,
Хабаровск, Россия*

В работе методами КРС и нелинейной оптики исследованы особенности упорядочения структурных единиц в монокристаллах ниобата лития конгруэнтного состава, легированных катионами Mg^{2+} , Zn^{2+} , B^{3+} , Gd^{3+} , Er^{3+} .

Нелинейнооптический фоторефрактивный монокристалл ниобата лития ($LiNbO_3$) широко применяется в приборах электронной техники. Структура и физические свойства ниобата лития определяются его составом, что позволяет путем изменения состава получать кристалл с заданными параметрами.

Главной целью легирования кристаллов ниобата лития является направленное изменение или стабилизация свойств основной фазы. Примесные катионы с ионными радиусами, близкими к радиусам основных катионов (Li^+ и Nb^{5+}) и зарядами, промежуточными между зарядами основных катионов ($1 < Z < 5$), в области весьма малых концентраций (0,1-0,01 мас.%) оказывают упорядочивающее воздействие на катионную подрешетку конгруэнтного кристалла ниобата лития. Такие катионы имеют высокий коэффициент вхождения в структуру и практически не искажают ее, но изменяют порядок чередования структурных единиц в кислородных октаэдрах вдоль полярной оси кристалла [2].

Легирование монокристаллов ниобата лития конгруэнтного состава катионами Mg^{2+} , Zn^{2+} , Gd^{3+} и др. повышает степень упорядочения структурных единиц катионной подрешетки вдоль полярной оси кристалла [1, 2-5]. Такие катионы вытесняют основные антиструктурные дефекты катионной подрешетки Nb_{Li} (избыточные катионы Nb^{5+} , находящиеся в положении катионов Li^+), повышая ее степень упорядочения вдоль полярной оси кристалла. При определенных условиях это может улучшить сегнетоэлектрические и нелинейно-оптические характеристики кристалла.

В работе проведен сравнительный анализ спектров комбинационного рассеяния и спектров широкополосного излучения, преобразованного в номинально чистых и легированных кристаллах ниобата лития.

1. Сидоров Н.В., Волк Т.Р., Маврин Б.Н. и др. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны. М.: Наука, 2003.
2. Калинин, В.Т., Палатников, М.Н., Сидоров, Н.В. Фундаментальные основы технологии высокосовершенных монокристаллов ниобата лития: аналитический обзор. – Апатиты: КНЦ РАН, 2005.
3. Volk T., Wohlecke M. Lithium niobate. Defects, photorefractive and ferroelectric switching // Berlin. Springer, 2008.- 250 P.
4. Черная, Т.С., Максимов, Б.А., Волк Т.Р., Рубина, Н.М., Симонов, В.И. Атомы Zn в ниобате лития и механизмы их вхождения в кристалл / Письма в ЖЭТФ, Т. 73, вып. 2, с. 110-113
5. Строганов, В.И. Преобразование некогерентного широкополосного ИК изображения в нелинейных кристаллах иодата и формиата лития / В.И. Строганов, В.И. Троилин / Журнал прикладной спектроскопии. 1989. Т. 50. № 2. С. 297–301.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ГЕРМАНИЯ НА КРЕМНИИ

Лозовой К.А., Коханенко А.П., Войцеховский А.В.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск,
Российская Федерация, lka@sibmail.com*

С недавних пор рост Ge на поверхности Si привлекает особое внимание научного мира в связи с осознанием его особой важности для развития полупроводниковой технологии. В частности, полупроводниковые гетероструктуры с квантовыми точками (КТ) Ge на Si все более широко используются в приборах оптоэлектроники. При этом наиболее перспективный способ формирования КТ основан на эффектах самоорганизации полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных системах, реализуемых, например, в методе молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Для всевозможных применений необходимо создавать гетероструктуры с КТ с различными свойствами, которые определяются такими параметрами КТ, как их поверхностная плотность, форма и латеральный размер (размер в плоскости основания). Поэтому важной задачей теории является расчет оптимальных условий роста для создания тех или иных гетероструктур.

Прежде всего, в настоящей работе была сделана попытка обобщения различных экспериментальных и расчетных данных по значению коэффициента диффузии Ge на поверхности Si и получения выражения для аппроксимации температурной зависимости значения коэффициента диффузии, которое охватывало бы как можно больший интервал температур. С опорой на экспериментальные значения коэффициента диффузии для различных температур нами была построена простейшая аррениусовская температурная зависимость вида $D(T) = D_0 \exp(-E_D/kT)$ со значениями параметров $D_0 = 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$ и $E_D = 1,21 \text{ эВ}$ (k – постоянная Больцмана).

Затем проводился расчет зависимостей функции плотности распределения по размерам и поверхностной плотности пирамидальных (с квадратным основанием) и клиновидных (с прямоугольным основанием) hut-кластеров Ge на поверхности Si(100) от температуры роста, скорости осаждения и количества осажденного материала в методе МЛЭ. При вычислении коэффициента Ратша–Зангвилла для островков удлиненной формы использовалось модифицированное по сравнению с классическим (для КТ с квадратным основанием) выражение, учитывающее их анизотропность. Для клиновидных кластеров также пересчитывалась свободная энергия их образования и скорость зарождения островков. Дальнейший расчет кинетики их формирования производился аналогично пирамидальным кластерам с квадратным основанием, но уже с пересчитанными параметрами. При этом критическая толщина перехода по Странскому–Крастанову для островков обеих форм рассчитывалась с учетом явления сегрегации, что позволяет с одной стороны моделировать процессы, происходящие при одновременном осаждении на кремниевую подложку германия и кремния в различных пропорциях по отношению друг к другу, а с другой – учитывать влияние нижележащих напряженных слоев при выращивании многослойных структур путем введения дополнительного экспоненциально затухающего с глубиной слагаемого в выражении для свободной энергии образования островка.

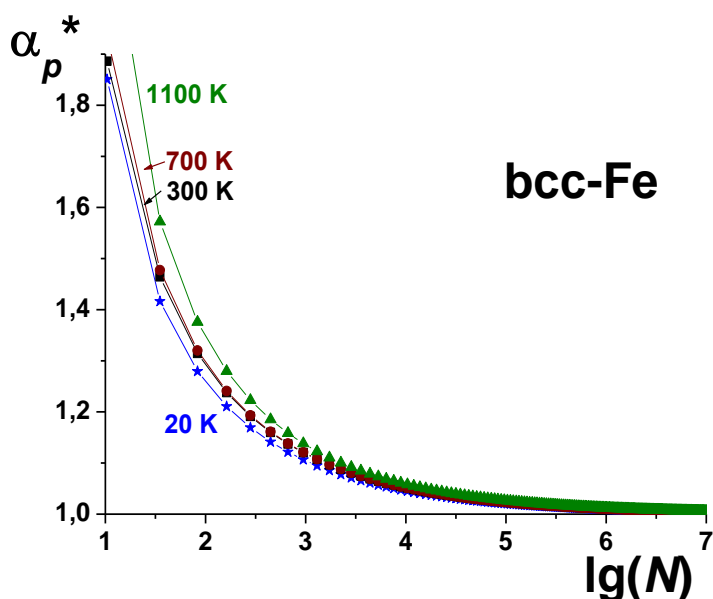
Результаты расчетов показывают, что для клиновидных кластеров зависимости поверхностной плотности островков и их среднего размера от температуры и скорости роста остаются такими же, как и для пирамидальных кластеров. Однако в целом можно сказать, что для одних и тех же параметров роста средние размеры клиновидных островков меньше, а поверхностная плотность больше, чем для пирамидальных кластеров.

О ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ ОТ РАЗМЕРА И ФОРМЫ БЕЗОПОРНОГО НАНОКРИСТАЛЛА ЖЕЛЕЗА

М.Н. Магомедов

Институт проблем геотермии Даг. НЦ РАН, Россия, E-mail: mahmag4@mail.ru

Используя модель нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда с варьируемой формой поверхности (RP-модель) [1, 2, 3], изучена зависимость коэффициента объемного теплового расширения: $\alpha_p = [\partial \ln(V)/\partial T]_P$, от размера (числа атомов N) и формы поверхности нанокристалла простого вещества. Здесь V – объем системы, T – температура, P – давление. Конкретные расчеты нормированных (на значение для макрокристалла) функций $\alpha_p(T, N)^*$ проведены для ОЦК железа вдоль изотерм: 20 К, 300 К, 700 К, 1100 К.



Показано, что при изоморфном (при данной форме нанокристалла) уменьшении N нормированная функция: $\alpha_p(N)^* = \alpha_p(N)/\alpha_p(\infty)$, увеличивается тем заметнее, чем выше температура.

На рисунке показаны изотермо-изоморфные (для формы куба) зависимости функции α_p^* от аргумента $\lg(N)$ для ОЦК железа. В каждой четверке изотерм нижняя кривая – $T = 20$ К, верхняя – 1100 К. Зависимости $\alpha_p(N)^*$ при 300 и 700 К в данном масштабе сливаются. Символы

на изоморфах указывают положение разрешенных (для формы куба) значений N в нанокристалле. Любое отклонение формы нанокристалла от наиболее энергетически устойчивой (для RP-модели это куб) приводит к усилению изотермических зависимостей $\alpha_p(N)^*$, т.е. изоморфы $\alpha_p(N)^*$ для пластинчатых или стержневидных нанокристаллов лежат выше изоморф для нанокристаллов с кубической формой, показанных на рис. 3.

Известно, что удельные (на атом) изохорная (c_v) и изобарная (c_p) теплоемкости связаны выражением: $c_p = c_v (1 + \gamma \alpha_p T)$. Так как параметр Грюнайзена (γ) слабо зависит от размера [1]. Поэтому разница $c_p - c_v$ будет расти при уменьшении N , а величина максимума поверхностного вклада в c_v , оцененная в [2]: $c_{sf}(N_{\min})/k_B = 1.0115$, в случае изобарного процесса может быть существенно больше.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН (проект № П-2.1) и РФФИ (грант № 12-08-96500-р-юг-а).

1. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
2. Магомедов М.Н. О температурной зависимости теплоемкости нанокристалла // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед. – 2012, № 1. – С. 99 – 104.
3. Магомедов М.Н. Об изменении модуля упругости при уменьшении размера нанокристалла // Письма в Ж. Техн. Физики. – 2013. – Т. 39, № 9. – С. 9 – 17.

ОБ ИЗМЕНЕНИИ КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ПРИ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА, КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

М.Н. Магомедов

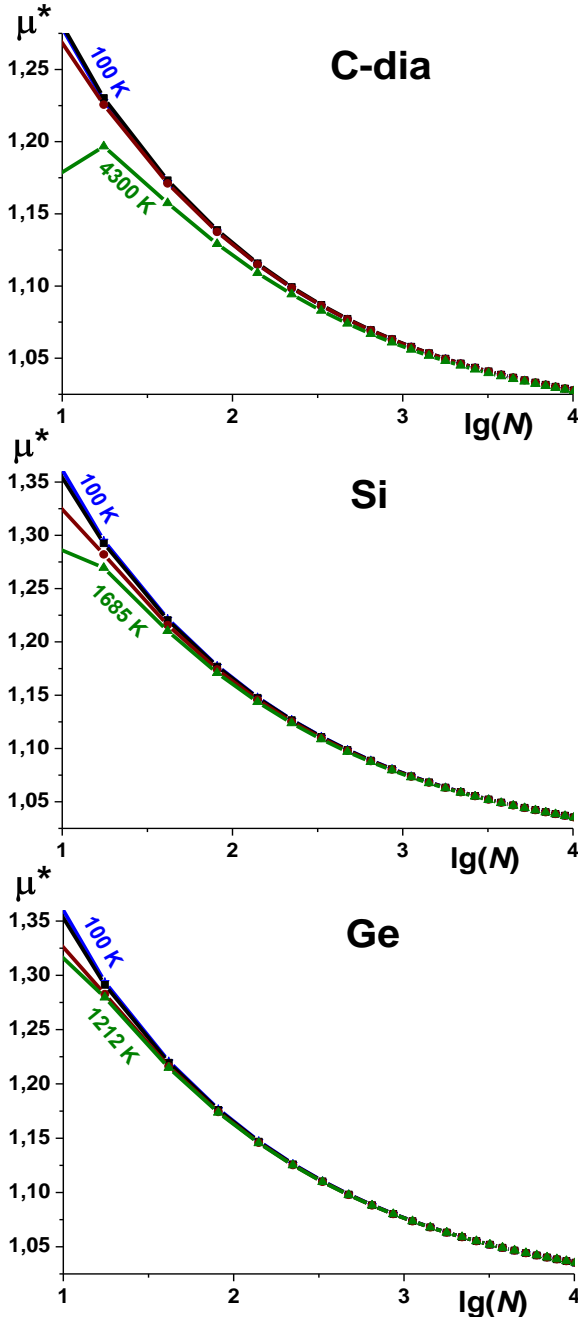
Институт проблем геотермии Даг. НЦ РАН, Россия, E-mail: mahmag4@mail.ru

Используя модель нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда с варьируемой формой поверхности (RP-модель) [1], изучена зависимость изотермического модуля упругости (B) и коэффициента Пуассона (μ) от размера (числа атомов N) и формы поверхности нанокристалла простого вещества.

Конкретные расчеты нормированных (на значение для макрокристалла) функций $B(N)^*$ и $\mu(N)^*$ проведены для алмаза, кремния и германия вдоль изотерм: 100 К, 300 К, 1000 К, и при температуре плавления макрокристалла ($T_m(\text{C-dia}) \cong 4300$ К).

Показано, что при изоморфном (при данной форме нанокристалла) уменьшении N функция $B(N)^*$ уменьшается тем заметнее, чем выше температура [2]. Коэффициент Пуассона $\mu(N)^*$ возрастает при изоморфном уменьшении размера нанокристалла тем заметнее, чем ниже температура. При отклонении формы нанокристалла от наиболее энергетически устойчивой формы (для RP-модели это куб) изотермические зависимости $\mu(N)^*$ усиливаются.

На рисунке показаны изотермо-изоморфные (для формы куба) зависимости функции μ^* от аргумента $\lg(N)$ для алмаза, Si и Ge (сверху вниз). В каждой четверке изотерм верхняя кривая – $T = 100$ К, нижняя – T_m . Зависимости $\mu(N)^*$ при 100 и 300 К в данном масштабе сливаются. Символы на изоморфах указывают положение разрешенных (для формы куба) значений N в нанокристалле.



Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН (проект № П-2.1) и РФФИ (грант № 12-08-96500-р-юг-а).

1. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
2. Магомедов М.Н. // Письма в ЖТФ. – 2013. – Т. 39, № 9. – С. 9 – 17.

ВЛИЯНИЕ КРУЧЕНИЯ ПОД КВАЗИГИДРОСТАТИЧЕСКИМ ДАВЛЕНИЕМ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ 06МБФ

**Майер Г.Г.¹, Астафурова Е.Г.¹, Кошовкина В.С.², Тулеева М.С.¹,
Мельников Е.В.¹, Добаткин С.В.³, Одесский П.Д.⁴**

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,
galinazg@yandex.ru*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г.
Томск, Россия*

³*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва,
Россия*

⁴*Центральный научно-исследовательский институт строительных конструкций
им. В.А. Кучеренко, Москва, Россия*

Проведено экспериментальное исследование структуры и механических свойств стали 06МБФ (Fe-0,1Mo-0,6Mn-0,8Cr-0,2Ni-0,3Si-0,2Cu-0,1V-0,06Nb-0,09C, мас.%) в ферритном состоянии (закалка от 920°C-0,5 ч., затем отпуск 670°C-1 ч.) после интенсивной пластической деформации кручением под квазигидростатическим давлением (КГД). КГД проводили под давлением 4 ГПа на наковальнях Бриджмена при температурах T=20°C (0,16T_{пл}) и T=450°C (0,4T_{пл}) на пять полных оборотов.

Исходная структура стали 06МБФ состояла из глобулярного феррита с размером зерна 2,4 мкм и пластинчатого феррита с толщиной пластин ~ 0,4 мкм. КГД приводит к формированию ультрамелкозернистой структуры в стали со средним размером зеренно-субзеренной структуры ~ 95 нм при T_{КГД}=20°C и 120 нм при T_{КГД}=450°C. На светлопольных электронно-микроскопических изображениях наблюдается большое количество конкурвов экстинкции, границы элементов структуры размыты. Значительные азимутальные размытия рефлексов на электронограммах свидетельствует о высоком уровне внутренних напряжений в зернах и субзернах после КГД. Отличия в размере зеренно-субзеренной структуры, по-видимому, обусловлено тем, что при комнатной температуре кручения процессы возврата подавлены, и, следовательно, плотность дислокаций выше, а размер зерна меньше, чем после теплого КГД, которое, вероятно, сопровождалось частичной релаксацией напряжений при деформации.

Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что КГД вызывает уменьшение интенсивности и увеличение ширины рентгеновских линий. Значения микродеформации кристаллической решетки составляют $\Delta d/d=2,0 \times 10^{-4}$ в исходном состоянии и достигают значений 3×10^{-3} (T_{КГД}=20°C), 4×10^{-3} (T_{КГД}=450°C) после КГД. Размеры областей когерентного рассеяния составляют более 200 нм в исходном состоянии и 40-50 нм после кручения. Плотность дислокаций (ρ), рассчитанная по данным рентгеноструктурного анализа после КГД, возрастает до $\sim 10^{11}$ см⁻² (в исходном состоянии $\rho \sim 10^9$ см⁻²).

Исследование механических свойств стали 06МБФ показало, что КГД приводит к повышению средних значений микротвердости в 3 раза в сравнении с исходным состоянием (от 2 до 6 ГПа), это обусловлено измельчением структуры и наличием легирующих элементов в стали. Температура кручения в исследуемом интервале (T_{КГД}=20°C, T_{КГД}=450°C) слабо влияет на прочностные характеристики стали. Микротвердость в центральной части образца существенно ниже, чем на периферии. С удалением от центра микротвердость резко повышается, что свидетельствует о формировании неоднородной структуры стали 06МБФ при КГД.

МЕРОЭДРАЛЬНОЕ ДВОЙНИКОВАНИЕ И НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ КОМПОЗИЦИЙ.

МАКСИМОВ С.К.¹, МАКСИМОВ К.С.².

1. Национальный исследовательский университет МИЭТ, 2. ФГУП «ВИМИ»

Наноструктурирование возникает, если энергия поверхностного натяжения изменяет химпотенциал. Наноструктурирование связывается со свободными поверхностями и границами зерен. Упорядочение сопровождается формированием антифазных доменов (АФД). Влияние антифазных границ (АФДГ) на наноструктурирование не рассматривалось, поскольку их энергия низка $< 0,5 \text{ Дж/м}^2$, но плотность энергии, запасенной в АФДГ, для наноразмерных АФД может $> 10^2 \text{ Дж/см}^3$. Избыточная энергия требует релаксации, протекающей путем уменьшения суммарной площади границ. Для механизма релаксации посредством укрупнения размеров АФД указанная плотность энергии не достаточна. Теоретически аннигиляция АФДГ может осуществляться при формировании двойников (Д), приводящих к зеркальной симметрии структуры сопрягающихся объемов. Подобные Д ведут к мероздрии и могут именоваться мероздральными (МД). Но мероздрия наблюдается только для некоторых структурных типов, и для них возможность релаксации АФДГ энергии путем МД сомнений не вызывает. $\{111\}$ Д, присущий ГЦК, не является МД; МД для ГЦК может служить запрещенный $\{110\}$ Д. Вопрос: достаточно ли плотности энергии порядка 10^2 Дж/см^3 для генерации МД в ГЦК? – требует разрешения¹. В этих целях проводились электронографические (ЭГ) и электронно-микроскопические (ТЭМ) исследования кристаллов $\text{Ca}_{0,5}\text{La}_{0,5}\text{F}_{2,5}$ со структурой CaF_2 , имеющих упорядоченное распределение ионов Ca^{+2} и La^{+3} типа CuAu в катионной подрешетке и АФД с размерами $\approx 3 \text{ нм}$. На ЭГ для проекции (110) интенсивность нечетных рядов рефлексов была ниже (вплоть до полного их подавления), чем интенсивность четных рядов, что является основным проявлением мероздрального эффекта и, соответственно, $\{110\}$ МД. Однако для этих же кристаллов и проекции $(1\bar{1}2)$ проявления мероздрии отсутствовали, и единственной особенностью, была аномально высокая интенсивность сверхструктурных рефлексов нечетных рядов. Кроме того на проекции (110) расстояние между рядами рефлексов было нерегулярным, а сами ряды искривлены, что является кажущимся нарушением закона Брэгга. Для объяснения аномалий проводилось исследование ЭГ и ТЭМ для тригонального La_2CaF_8 , сформированного в результате замещения Ca^{+2} 1/3 позиций La^{+3} в LaF_3 и имеющего слегка модифицированную структуру LaF_3 . Выбор La_2CaF_8 был обусловлен несколькими моментами: тригональные кристаллы являются типичными мероздриками, мероздрия в LaF_3 была обнаружена при тех же размерах МД, что в наших объектах, направлением упорядочения в La_2CaF_8 является только одно из 3-х $\langle 100 \rangle$ типа, плоскости МД и АФДГ совпадают. Путем исследования семейств проекций (001) , (110) , (111) , $(10\bar{2})$, $(11\bar{6})$ было показано, что подавление нечетных рядов рефлексов (мероздрия) в упорядочивающихся композициях, в отличие от соединений, может наблюдаться или подавляться для проекций одного и того же семейства. Было предположено, что подавление мероздрии обусловлено суммированием фаз рассеянных электронных волн при синхронном пересечении плоскостей МД и АФДГ. Данная гипотеза была подтверждена посредством численного моделирования. Установлено, что мероздрия наблюдается, если направление упорядочения не лежит в плоскости проекций, или если плоскость МД пересекает плоскость проекции по направлению, не являющемуся направлением упорядочения. Если же плоскость МД пересекает плоскость проекции по направлению упорядочения, то мероздрия не реализуется, а нечетные ряды содержат аномально интенсивные сверхструктурные рефлексы. Все возникновение и подавления мероздрии для указанных проекций полностью соответствуют этому правилу. Они полностью объясняют также все аномалии, наблюдаемые ЭГ $\text{Ca}_{0,5}\text{La}_{0,5}\text{F}_2$. **Релаксация напряжений на АФДГ путем возникновения мероздральных двойников – реальный процесс, мероздральные двойники возникают не только в связи с особенностями кристаллической структуры, но также благодаря особенностям структуры дефектной.**

¹ Все образцы для исследований были любезно предоставлены Соболевым Б.П. (ИК РАН).

ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ НАНОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

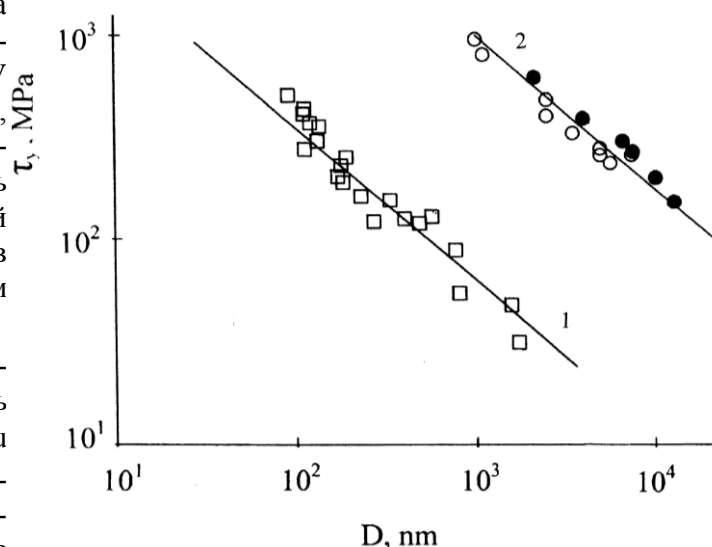
Г.А.Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
194021 Санкт-Петербург, Россия, E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

В последнее десятилетие наряду с нанокристаллическими материалами большое внимание уделяется изучению прочностных и пластических свойств монокристаллических образцов металлов и сплавов, имеющих в одном или двух направлениях поперечные размеры менее 1 мкм [1]. Повышенный интерес к кристаллам таких размеров объясняется двумя связанными друг с другом обстоятельствами, а именно, их высокими прочностными и функциональными свойствами и миниатюризацией различных систем и устройств электромеханики, робототехники, электроники, медицины. Выполненные полвека назад опыты на растяжение металлов с ГЦК и ОЦК решетками в виде выращенных из газовой фазы нитевидных кристаллов (усов) диаметром 5-20 мкм показали, что они обладают высокой прочностью и до 2 % деформируются упруго.

Достижением последних лет является разработка метода получения и исследования механических свойств монокристаллических образцов с поперечными размерами в микронном, субмикронном и нано диапазонах. В основе метода лежит травление поверхности металлического монокристалла фокусированным ионным пучком, в результате чего на поверхности формируются микростолбики (micropillars) материала диаметром 100-2000 нм высотой несколько микрон, которые подвергаются затем деформации сжатия в наноинденторе с уплощенной формой алмазного наконечника. В настоящее время исследована большая группа металлических микро- и нанокристаллов с ГЦК, ОЦК и ГПУ решетками. Опыты показали, что с уменьшением поперечного размера D их прочность приближается к теоретической прочности кристалла на сдвиг в соответствии с законом $\sigma \sim D^{-n}$, где $n \approx 0.6 - 1.0$.

На рисунке для иллюстрации приведена зависимость $\sigma(D)$ для микростолбиков Cu (кривая 1). Для сравнения показана также аналогичная зависимость для микрокристаллов меди (усов) (кривая 2). Видно, что при одинаковом поперечном размере 1 мкм микрокристаллы имеют более высокую прочность, по сравнению с нанокристаллами, полученными травлением поверхности большого кристалла ионным пучком. Столь заметная разница в прочности связана с высоким совершенством поверхности нитевидных кристаллов, выращенных из газовой среды, по сравнению с микростолбиками, содержащими в приповерхностном слое высокую плотность однополюсных дислокационных источников с плотностью $\rho \sim D^{-2}$ и критическими длинами $L = \delta D$, зависящими от поперечного размера кристалла, где $\delta \approx 0.25$. Равновесие между скоростью генерации дислокаций из источников и их уходом из кристалла через его боковую поверхность достигается при напряжении $\sigma \sim D^{-3/4}$, что согласуется с имеющимися экспериментальными данными для ГЦК нанокристаллов (рисунок, кривая 1).



[1] Г.А. Малыгин, УФН **181**(11), 1129 (2011).

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ Eu НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ SBN

Малышкина О.В., Педько Б.Б., Моргушка И.В.
Тверской государственный университет, Тверь, Россия
Olga.Malyshkina@mail.ru

В работе представлены результаты температурных исследований диэлектрических характеристик кристаллов ниобата бария стронция $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$ (SBN) легированного примесью Eu концентрацией 2000, 4000, 8000 и 16000 ppm. Показано, что примесь Eu значительно, особенно при температуре максимума, увеличивает значения диэлектрической проницаемости, при этом снижение температуры Кюри с увеличением концентрации примеси незначительное (табл. 1). Примесь Eu также стабилизирует сегнетоэлектрические свойства в районе температуры фазового перехода, что проявляется в сохранении формы петли до ее полного исчезновения в точке Кюри (рис. 1), в отличие от беспримесного кристалла SBN, у которого петля в процессе нагрева вырождается в «эллипс» диэлектрических потерь [1]. Для всех исследуемых образцов петля имела прямоугольную форму, слабое отклонение от прямоугольной формы наблюдалось только при приближении к точке Кюри.

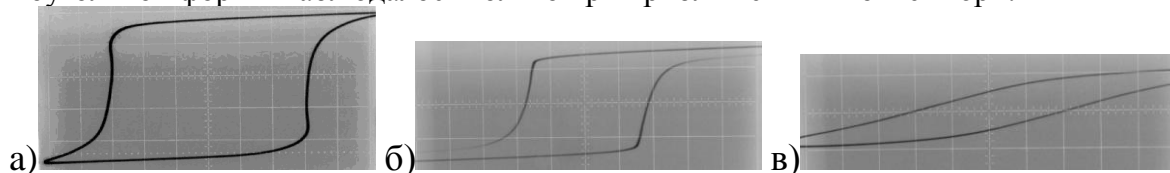


Рис. 1. Вид петель диэлектрического гистерезиса кристалла SBN с примесью Eu 2000 ppm. ось Y – 2В/дел, ось X – 94В/дел

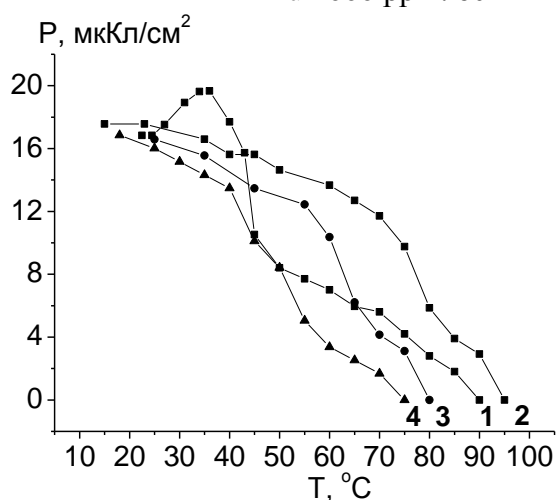


Рис. 2. Температурная зависимость спонтанной поляризации кристалла SBN с примесью Eu. Кривая 1 – 2000, 2 – 4000, 3 – 8000 и 4 – 16000 ppm.

Таблица 1

Eu, at. %	$T_{max}, ^\circ C$	$\epsilon(T_{max})$	$\epsilon(20^\circ C)$	$E_c, В/мм. (20^\circ C)$
0	84	5300	1170	
0,2	80	38200	1590	350
0,4	77	39900	1790	310
0,8	69	33500	2690	215
1,6	56	28700	5840	180

При комнатной ($20^\circ C$) температуре, величина спонтанной поляризации, рассчитанная по петле диэлектрического гистерезиса, практически не зависит от концентрации примеси (рис.2), тогда как коэрцитивное поле с увеличением концентрации Eu уменьшается существенно (табл. 1). Незначительный рост переключаемой поляризации, аналогичный наблюдаемому у беспримесных кристаллов SBN [1], имеет место только у SBN:Eu 2000 ppm.

коэрцитивное поле с увеличением концентрации Eu уменьшается существенно (табл. 1). Незначительный рост переключаемой поляризации, аналогичный наблюдаемому у беспримесных кристаллов SBN [1], имеет место только у SBN:Eu 2000 ppm.

1. О.В. Малышкина, И.Л. Кислова, Б.Б. Педько, З. Каппхан Влияние внешнего электрического поля на диэлектрические свойства монокристаллов ниобата бария стронция конгруэнтного состава // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники 2004. №4. С.40-42.

МАЛОСИГНАЛЬНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

Ф.И. Маняхин

НИТУ "МИСиС", Email: fman@misis.ru

В основе метода лежит измерение температурной зависимости интеграла временной релаксации заряда глубоких центров запрещенной зоны за время действия возбуждающего импульса и ее дифференцировании.

Интегрирование и дифференцирование проводится аппаратным способом при температурном сканировании исследуемого образца. Температурную зависимость времени перезарядки глубоких уровней можно выразить формулой

$$\tau = \eta T^{-2} \exp\left(\frac{\Delta E_t}{bT}\right), \quad (1)$$

где где $b = k/q$; k – постоянная Больцмана, q – элементарный заряд; ΔE_t выражается в электрон-Вольтах (эВ), η – коэффициент, определяемый параметрами полупроводника.

Переходной процесс изменения заряда на барьерной емкости описывается экспоненциальной зависимостью. Ее интегрирование и последующее дифференцирование позволяет получить выражение,

$$\frac{dU_{\text{вых}}}{dT} = B \cdot \left[\frac{2 \cdot (e^{-p} - 1)}{T \cdot p} + \frac{e^{-p} \cdot \left(\frac{2 \cdot p}{T} + \frac{\Delta E_t p}{bT^2} \right)}{p} + \frac{\Delta E_t}{bT^2 p} (e^{-p} - 1) \right]$$

где $B = C_i / (C_b + C_i)$. C_i – емкость зарядовых центров глубоких уровней, C_b – емкости зарядовых центров примеси, Q_0 – заряд импульса возбуждения, $p = a/\tau = a / (\eta T^{-2} \exp(\Delta E_t/bT))$, a – время действия возбуждающего импульса.

Положение энергетического уровня в запрещенной зоне находится из зависимости $\left(\frac{dU_{\text{вых}}}{dT} \right)_{\text{max}} = \frac{B}{b \cdot c} \cdot \frac{\Delta E_t}{T_m^2}$.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАБИТУСНЫХ ФОРМ КРИСТАЛЛОВ САПФИРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИНЦИПОВ ПОДХОДА ПЕРИОДИЧЕСКИХ ЦЕПЕЙ СВЯЗЕЙ (ПЦС)

Маслов В.Н., Бахолдин С.И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия.
эл. адрес: maslov_vn@hotmail.com*

Решение вопросов теоретического расчета ограничения кристаллов имеет большое фундаментальное и практическое значения. Существует ряд работ по изучению ограничения реальных кристаллов корунда. Наиболее подробно изучалось ограничение монокристаллических стержней сапфира, выращенных способом Степанова [1]. В этой работе получены следующие соотношения размеров граней на боковой поверхности цилиндрического стержня $c > r > a$ как 8:4:1. Существуют также работы с расчетами теоретического ограничения. В [2] приведены данные квантового расчета – $c > m > R > a > r$. Видно, что теоретический расчет не совпадает с данными, полученными в результате эксперимента.

Любалиным М.Д. в его работе [3] был предложен математический аппарат для теории периодических цепей связей (ПЦС) [4]. В [3] вводятся параметры ненасыщенности связей (Н) и атомной шероховатости поверхности (Х) и эти параметры рассчитываются для кристаллов кубической и тетрагональной сингоний (данные хорошо согласуются с наблюдаемой формой кристаллов).

В данной работе выполнен расчет параметров Н и Х с помощью компьютерной программы для решетки Al_2O_3 . Показано, что подход, предложенный в [3] не достаточно хорошо отражает реальное ограничение кристаллов сапфира, выращенных способом Степанова. Сделана попытка модифицировать метод, уйдя от силовой характеристики параметра Н, предложенной в [3], и произвести расчет в энергетических величинах с введением коэффициента суммарной длинны участков характеризующихся минимальной энергией, находящихся в пределах постоянной решетки ($c:r:a$ как 1:3,67:9,32). Данные расчеты дали результаты, близкие к реальному ограничению кристаллов сапфира.

Стоит отметить, что на кристаллах корунда выращенных раствор-расплавным методом, а так же на природных кристаллах наблюдаются другие последовательности развития граней. Это может говорить о том, что на ограничение кристаллов корунда оказываю влияние примеси других атомов и среда кристаллообразования. В то же время, результаты расчета по методу ПЦС с нашими модификациями наиболее близки к ограничению кристаллов чистого Al_2O_3 , выращенного из собственного расплава в нейтральной атмосфере.

1. Носов Ю.Г., Бахолдин С.И., Крымов В.М., Ограничение кристаллов сапфира, выращенных из расплава способом Степанова, Журнал технической физики, т.79 вып.2, с.76-82, 2009;
2. Manassidis I., Gillan M.J., Structure and Energetics of Alumina Surfaces Calculated from First Principles, J. Am. Ceram. Soc, 77(2), p.335-338, 1994;
3. Любалин М.Д., Рост Кристаллов в расплаве. Кристаллографический анализ и эксперимент, Наука, 2008;
4. Хартман П., Анализ идеальных кристаллических поверхностей, Рост кристаллов, №7, с.8024-8035, 1967.;

ДИФФУЗИОННАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В НИКЕЛЕ

**Микрюков В.Р.¹, Дябденков В.В.¹, Полетаев Г.М.², Старостенков М.Д.²,
Мясникова В.И.¹, Громов В.Е.¹**

¹*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия*

E-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

²*Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул, Россия*

E-mail: genphys@mail.ru

Методом молекулярной динамики исследовано влияние точечных дефектов на интенсивность самодиффузии вдоль тройных стыков большеугловых границ наклона и границ смешанного типа в никеле. Тройной стык границ наклона создавался в центре расчетного блока путем сопряжения трех зерен, разориентированных относительно друг друга с помощью поворота вокруг оси параллельной линии тройного стыка. Рассматривались две оси разориентации: $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Для исследования влияния точечных дефектов на интенсивность самодиффузии в области тройного стыка моделировался процесс продолжительностью 300 пс при температуре 1500 К. По окончании эксперимента расчетные блоки охлаждались до 0 К во избежание влияния тепловых колебаний атомов на расчет коэффициента диффузии. Кроме коэффициента самодиффузии в каждом случае рассчитывалось среднее значение энергии связи точечного дефекта с тройным стыком (или границами зерен).

Известно, что точечные дефекты существенно влияют на интенсивность диффузии в чистом кристалле. Однако заметного влияния на интенсивность самодиффузии вдоль тройного стыка обнаружено не было: коэффициент диффузии при различном числе введенных дефектов оставался тем же в пределах погрешности вычислений ($1-3 \cdot 10^{-11}$ м²/с). В первую очередь это было связано с тем, что часть введенных в область тройного стыка дефектов в процессе моделирования мигрировали в границы зерен. Это наблюдалось для обоих типов дефектов. При миграции со стыка в границу зерен междоузельного атома смещения атомов в подобных цепочках имели противоположное направление.

Диффузионная проницаемость стыков для всех трех типов образующих стык границ зерен (большеугловых наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ и смешанного типа) была примерно одинаковой. Стыки, образованные малоугловыми или специальными границами, ввиду их относительно более упорядоченной структуры, по всей видимости, должны иметь относительно меньшую проницаемость.

Таким образом, как показало молекулярно-динамическое моделирование, энергия связи точечных дефектов обоих знаков (вакансий и междоузельных атомов) с тройным стыком практически не зависит от числа введенных дефектов (при введении до 10 точечных дефектов на 75 Å длины тройного стыка). Это объясняется тем, что часть дефектов в процессе компьютерного эксперимента мигрирует в образующие стык границы зерен и распределяется в них. По этой же причине не наблюдалось зависимости коэффициента самодиффузии вдоль тройного стыка от числа введенных в область стыка дефектов.

Рассчитанные значения энергии связи вакансий и междоузельных атомов с тройными стыками показали высокую сорбционную способность стыков и границ зерен по отношению к точечным дефектам, причем для междоузельных атомов она, как показали исследования, существенно выше по сравнению с вакансиями.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов №13-02-00301_a, №12-08-98046-p_сибирь_a, №12-02-98000-p_сибирь_a.

ОСОБЕННОСТИ РОСТА НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК ПРИ МАГНЕТРОННОМ РАСПЫЛЕНИИ, ВЫЯВЛЯЕМЫЕ МЕТОДОМ IN-SITU РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

Монахов И.С., Новоселова Е.Г., Нуждин А.Д., Смирнов И.С.

Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия, ismirnov@hse.ru

В настоящее время в большинстве случаев контроль параметров наноразмерных пленок осуществляется после завершения процесса их формирования ex-situ методами, которые имеют ограничения, связанные с процессами адсорбции, окисления и диффузии на поверхности материалов после их извлечения из технологической камеры. Новым подходом является принцип измерения параметров выращиваемых пленок непосредственно в процессе их получения (in-situ методы). Обычно наиболее важными параметрами являются толщина пленки, ее скорость роста, плотность растущей пленки и ее зависимость от толщины, шероховатость поверхности пленки и состояние границ раздела между пленкой и подложкой, а также слоями в многослойной структуре. Использование in-situ диагностики не только предоставляет возможность контроля этих параметров во время осаждения, но также помогает в подборе условий проведения процесса для достижения нужных свойств пленочного покрытия и нахождения связи между ними и параметрами процесса.

В работе метод in-situ рентгеновской рефлектометрии в реальном времени использован для анализа процессов формирования наноразмерных пленок различных материалов при магнетронном распылении. Показана возможность определения зависимости толщины, плотности и шероховатости поверхности растущей пленки от времени напыления. Продемонстрирована чувствительность метода к особенностям начальных стадий формирования пленок, связанным с их несплошностью, обусловленной островковым механизмом роста. Установлена зависимость параметров пленок от технологических режимов осаждения. Полученные результаты сопоставлены с данными атомно-силовой микроскопии. Были исследованы пленки с толщинами в диапазоне 10-100 нм. Показано, что шероховатость поверхности растущей пленки монотонно увеличивается с ростом толщины пленки. Установлено, что плотность формируемых пленок ниже плотности объемного материала, а на начальных стадиях роста она значительно ниже. Полученные результаты проинтерпретированы на основе представлений об эффектах кластеризации в магнетронной плазме

ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Морченко А.Т., Костишин В.Г., Кожитов Л.В., Пилипосян Р.Д.

Подгорная С.В., Костикова А.В., Попкова А.В.

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Москва, Россия

dratm@mail.ru

Одной из тенденций материаловедения является разработка новых композиционных материалов, перспективных для электромагнитного (ЭМ) экранирования, так как постоянное увеличение интенсивности техногенных излучений приводит к повышению требований по защите биологической среды, ЭМ совместимости радиоэлектронных средств, защите информации и т. д. На сегодняшний день выделяют следующие пути увеличения эффективности экранировки или снижения уровня отражения: 1) за счет поглощающих свойств среды; 2) за счет согласования волновых сопротивлений материала покрытия и окружающей среды; 3) за счет интерференции волн, отраженных от разных слоев покрытия.

Эффективность поглощения во многом зависит от структуры и состава материала. Так, например, радиопоглощающие материалы (РПМ) должны обеспечивать поглощение ЭМ излучения в определенном частотном диапазоне при минимальном отражении. ЭМ волна, попадая в структуру, взаимодействует с РПМ и преобразуется в другие виды энергии. При этом одновременно происходят процессы поглощения, рассеяния (из-за структурной и геометрической анизотропии материала) и интерференции волн.

Такие РПМ могут быть получены в виде композиционных материалов, приготовленных на основе магнитных частиц и различных связующих. В частности, для этой цели нами использовались гранулы ферритового порошка, распределенных в диэлектрической среде (парафин, клеи, смолы), а также наночастицы 3d-металлов, их сплавов и соединений (Fe_3O_4 , $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$, Fe_3C , FeNi_3) в полимерных или углеродных матрицах. В качестве примера можно назвать наноккомпозит FeNi_3/C , который является дисперсией наночастиц пермаллоя (<100 нм) в углеродном материале (УМ). Синтез наночастиц FeNi_3 под действием ИК нагрева в среде полиакрилонитрила модифицирует свойства УМ и создает возможность получать наноккомпозиты с контролируемыми электрофизическими и магнитными свойствами.

Развиваемая в настоящей работе модель радиопоглощающих свойств таких материалов учитывает, что в формирование конечного уровня ослабления ЭМ излучения вносят вклад диэлектрические и/или магнитные потери в среде, многолучевая интерференция и электромагнитные потери на токи Фуко.

Разработанные представления могут оказаться полезными для предсказания свойств композиционных материалов и для интерпретации результатов их экспериментального исследования.

Работа выполнена в рамках научных проектов РФФИ № 13-03-01316 «Разработка физических и технологических основ создания перспективных композиционных радиопоглощающих и экранирующих материалов и покрытий на основе упорядоченных магнетиков» и Госконтракта по теме: «Разработка научно-технических основ высокоэффективной радиационно-термической технологии получения ферритовой керамики различного функционального назначения» (шифр 2013-1.3-14-513-0051)

МУЛЬТИФРАКТАЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ПОВЕРХНОСТИ СВЕРХТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СЛОЕВ В КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУРАХ ZNCDTE- НЕСОГЛАСОВАННАЯ И АМОРФНАЯ ПОДЛОЖКА

Москвин П.П., Крижановский В.Б., Кузнецов В.В.¹, Литвин П.М.²,
Рашковецкий Л.В.²

Житомирский государственный технологический университет, Украина,
moskvin@us.zt.edu.ua,

¹Санкт-Петербургский электротехнический университет, Санкт-Петербург, Россия, vvkuznetsov@inbox.ru

²Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева, Киев, НАН Украины.

Композитные структуры на основе полупроводниковых стекол и сверхтонких слоев твердых растворов полупроводников класса A^2B^6 - перспективные системы для нелинейных оптических элементов.

Композитные структуры “ZnCdTe- подложка из халькогенидного стекла или из монокристаллического кремния” получали методом «горячей стенки». Методики синтеза композитных структур являются традиционными. Варьируемыми параметрами процесса осаждения материала из газовой фазы - время осаждения и температура подложки. Для количественного описания состояния поверхности пленок композиций применен мультифрактальный анализ (МФА).

Полученные АФМ изображения поверхности слоев обрабатывали численными методами в соответствии с положениями МФА. В качестве выходной информации для реализации МФА использовались данные о реальном рельефе поверхности слоя. Информация о площади такого фрактального рельефа была получена путем соответствующей обработки цифрового массива АФМ изображения аппроксимационными методами. В качестве параметров состояния поверхностей служили числа Рени D_0 и параметр фрактальной упорядоченности Δ . Типичные значения чисел Рени, полученные в результатах расчетов, превышали значение 2. Это соответствовало ситуации анализа поверхности с развитым на нано уровне рельефом, когда ее хаусдорфова размерность превышает размерность строго плоской поверхности. Найденны взаимосвязи между параметрами мультифрактального спектра поверхности слоев и условиями их синтеза.

ВЛИЯНИЕ СОЕДИНЕНИЯ ЖЕЛЕЗА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ НАНОКОМПОЗИТОВ Fe-Co/C

Муратов Д.Г.^{1,2}, Кожитов Л.В.¹, Попкова А.В.¹, Матвеев К.Е.¹

¹ Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»,
119049, Ленинский пр., д. 4

² Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский пр., д. 29

E-mail: muratovdg@yandex.ru

Композиционные материалы, в т.ч. и наноматериалы, в настоящее время получили широкое распространение. Комплекс физико-химических свойств подобных материалов определяет диапазон применения. Интерес представляют наноконпози- ты, в состав которых входят наночастицы ферромагнитных материалов и сплавов. Так наноматериалы, состоящие из наноструктурированного углерода либо включающие наночастицы металлов и сплавов, в частности металлов группы железа, являются перспективными с точки зрения создания элементов конструкций, эффективно поглощающих ЭМ-излучение.

В работе получены методом ИК-пиролиза металлоуглеродные наноконпози- ты на основе полиакрилонитрила, включающие наночастицы сплава Fe-Co. В качестве источника Со использован ацетат кобальта тетрагидрат (II), в качестве источника железа – ацетилацетонат железа (III) и ферроцен. Использование данных соединений позволяет избавиться от присутствия хлора в процессе, что позволяет применять по- лученные материалы, в том числе, и в различных нефтехимических процессах в качестве катализатора. Соотношение металлов по массе составило 1:1.

По данным РФА установлено, что в интервале температур $T \geq 400$ °C происходит формирование наноконпози- тов, включающих наноразмерные частицы металла. А при температурах $T \geq 600$ °C происходит формирование интерметаллидов Fe-Co. При этом в случае использования ацетилацетоната железа (II) наблюдается только формирование фазы FeCo, тогда как при использовании ферроцена присутствуют как фазы интерметаллида, так и фаза ГЦК-кобальта. Т.к. температура разложения ферроцена выше, чем ацетилацетоната, то есть основания полагать, что формирова- ние интерметаллида происходит за счет растворения железа в фазе кобальта. Однако для ацетилацетоната железа данный процесс начинается при более низких темпера- турах, поэтому фаза кобальта не регистрируется. Средний размер наночастиц сплава составляет 10 – 30 нм в интервале температур синтеза $T = 600 - 800$ °C. Распреде- ление наночастиц по размерам носит характер несимметричной кривой с максимумом в области средних размеров наночастиц сплава. С ростом температуры синтеза мак- симум смещается в область больших размеров. Соотношение компонентов в составе металлической фазы наноконпози- тов близко к исходному соотношению металлов. Форма наночастиц близка к сферической.

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ
ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ
ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ**

Мусяенко А.Ю., Леонов В.П., Козлова И.Р., Паноцкий Д.А.
ФГУП ЦНИИ КМ “ПРОМЕТЕЙ”, Санкт-Петербург, Россия
mail@crism.ru

Для различных типов структур двухфазных ($\alpha+\beta$) титановых сплавов (пластинчатой, глобулярной, бимодальной) проведена оцифровка (извлечение геометрических элементов) и перевод в двумерные конечно-элементные сетки. Получены результаты расчетов напряженно-деформированного состояния с использованием модели пластичности кристаллов, учитывающей кристаллографические сдвиги. Проведено сравнение результатов расчета для различных типов структур на основе энергии деформирования.

КОМПЛЕКСНАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ И ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В МОНОКРИСТАЛЛЕ CdGa₂S₄ НА ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ

Мустафаева С.Н.*, Асадов М.М.** , Гусейнов Д.Т.*

**Институт физики*

Национальной академии наук Азербайджана, Баку

***Институт химических проблем*

Национальной академии наук Азербайджана, Баку

e-mail: solmust@gmail.com

Монокристаллы CdGa₂S₄ обладают широким спектром практически важных физических характеристик, таких как высокая фото-и рентгеночувствительность. Эти кристаллы характеризуются высоким электрическим сопротивлением, однако, в литературе отсутствуют сведения об их диэлектрических свойствах. Изучение диэлектрических свойств и электропроводности полупроводниковых кристаллов на постоянном и переменном токе дает информацию о природе процессов переноса заряда, о локализованных состояниях в запрещенной зоне, а также позволяет определить механизм диэлектрических потерь. Для установления механизма переноса заряда весьма существенно знание частотной зависимости этих параметров. В этом плане монокристаллы CdGa₂S₄ до настоящего времени не изучены. Целью работы явилось изучение электрических и диэлектрических свойств монокристаллов CdGa₂S₄ в переменных электрических полях, установление механизма переноса заряда, природы диэлектрических потерь и определение параметров локализованных в запрещенной зоне состояний.

Соединение CdGa₂S₄ синтезировано нами методом двухтемпературного синтеза сплавлением исходных компонентов высокой степени чистоты ($\geq 99.999\%$). Монокристаллы CdGa₂S₄ были выращены из синтезированного соединения CdGa₂S₄ методом химических транспортных реакций (ХТР) в замкнутом объеме с использованием йода в качестве носителя.

Образцы из CdGa₂S₄ для электрических измерений были изготовлены в виде плоских конденсаторов. В качестве электродов была использована серебряная паста. Толщина монокристаллических образцов из CdGa₂S₄ составляла 0.11 см. Диэлектрические коэффициенты монокристаллов CdGa₂S₄ измерены резонансным методом. Диапазон частот переменного электрического поля составлял 50 кГц -35 МГц. Все диэлектрические измерения проведены при 300 К.

В монокристаллах CdGa₂S₄ изучены частотные зависимости действительной (ϵ') и мнимой (ϵ'') составляющих комплексной диэлектрической проницаемости, тангенса угла диэлектрических потерь и ас-проводимости (σ_{ac}) в области частот $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Гц. Установлено, что при $f = 5 \times 10^4 - 3 \times 10^6$ Гц в CdGa₂S₄ имеют место релаксационные потери, сменяющиеся при $f \geq 3 \times 10^6$ Гц потерями сквозной проводимости. В области частот $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$ Гц ас-проводимость монокристалла CdGa₂S₄ подчинялась закономерности $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, характерной для прыжкового механизма переноса заряда по локализованным вблизи уровня Ферми состояниям. Оценены плотность (N_F) и энергетический разброс (ΔE) этих состояний $N_F = 3.3 \times 10^{18}$ эВ⁻¹·см⁻³, $\Delta E = 30$ мэВ, среднее время (τ) и расстояние (R) прыжков $\tau = 5.7 \times 10^{-8}$ с и $R = 170$ Å.

NH₃ SENSING PROPERTY OF WO₃ NANORODS PREPARED BY ETHANOL CATALYSED HYDROTHERMAL TREATMENT

Nguyen Dac Dien^{1*}, Tong Van Trung¹, Dang Duc Vuong¹, Nguyen Hoang Hung¹,
Nguyen Hong Viet²

¹ Department of Electronic Materials, School of Engineering Physics,
Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

² Moscow University of Science and Technology, Moscow, Russia

* Corresponding author: nddien1980@gmail.com

Keywords: ammonia sensors, hydrothermal treatment, tungsten trioxide, nanostructures.

In this paper, we present the successful synthesis of WO₃ nanorods (NRs) using simple hydrothermal treatment process method with absolute ethanol as catalyst at 120°C for 48 h. The synthesis method is completely different from the most of previously reported process. As-synthesized WO₃ NRs have been characterized in-depth by XRD and SEM to confirm that the obtained NRs have high aspect ratio. Additionally, the NH₃ (ammonia) sensing properties of WO₃ NRs materials have been studied and the result shows a good performance obtained with an operating temperature of 95°C.

In a typical experiment, 8.25 g Na₂WO₄·2H₂O was dissolved in 25 ml distilled water and stirred continuously for 30 min to form a translucent, homogeneous solution. Then, 3 M HCl solution (15 ml) was drop wise added into the Na₂WO₄ solution to pH of 1-1.2 under strictly magnetic stirring for 24 h to fabricate a stable system. The obtained solution had the lemon-yellow color. The system was dissolved in ethanol with volume ratio of 50%. Then the mixed reaction system was transferred to a 20 ml autoclave heated at 120°C for 48 h. Finally, the white glue precipitates received were washed with water by centrifuging at 3000 rounds per minute for 20 minutes to remove Na⁺, Cl⁻, H⁺ ions possibly remnant in the products, and dried in air at 80°C for 24 h.

The sensor response for a given measurement was calculated as follows: $S=R_{\text{gas}}/R_{\text{air}}$ in the low temperature region and $S=R_{\text{air}}/R_{\text{gas}}$ in the high temperature region, where R_{gas} and R_{air} are electrical resistance of the sensor in a tested gas and in air, respectively.

The XRD pattern indicates that all the peaks could be perfectly indexed to a pure monoclinic crystalline phase of WO₃, according to JCPDS Card No.43-1035 with lattice constants of $a=0.729$ nm, $b=0.7539$ nm, $c=0.7688$ nm, $\beta=90.91^\circ$, $\alpha=\gamma=90^\circ$. No impurities and peaks of other phases were detected, indicating that the products were quite purity and the ethanol molecules may not act on WO₃ to produce new phase.

The WO₃ nanorods were successfully synthesized with the length of 100 to 150 nm and the diameter of 20 – 30 nm. Obviously, all samples were homogeneous in size and morphology on a very large area. However, the nanorod surface is rough, not smooth which suggested that the nanorods were formed from many uniform WO₃ nanoparticles binding each other along a certain direction. But the nanorods cannot withstand the further increase of the volume ratio of ethanol to 60% and explode into irregularly shaped fragments.

We measured the responses of as-indicated sensors to ammonia gas at different concentrations ranging from 2.5 to 12.5 ppm. The response reaches maximum at working temperature of 95°C. The sensor showed a response about 1.05 with 2.5 ppm NH₃ and 1.24 when test gas concentration of 12.5 ppm. The response of the sensors based on WO₃ nanorods increases nearly linearly with the NH₃ concentration, the response and recovery times are about 40 s and 150 s, respectively, which are acceptable in practice with WO₃-based sensors.

МЕТОД ОПЕРАТИВНОГО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ СЛАБОГО ОСТАТОЧНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ CaMoO_4

**Набатов Б.В., Набатов В.В., Бузанов О.А.*,
Каневский В.М., Корноухов В.Н.*, Федоров В.А.**

*Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия,
E-mail: fedorov-metrology@yandex.ru
* ОАО «Фомос-Материалс», Москва, Россия*

Спектрофотометрический метод контроля показателя поглощения является наиболее предпочтительным в плане простоты и оперативности получения результатов при обработке технологии выращивания монокристаллов и их массовом контроле.

С целью выработки принципиальных аспектов методики измерения малых величин показателя поглощения образцов исследованы абсорбционные спектральные характеристики в широком спектральном диапазоне (350 – 3300 нм) изотопобогащенных монокристаллов $^{40}\text{Ca}^{100}\text{MoO}_4$, выращенных методом Чохральского – перспективного материала для регистрации процесса двойного безнейтринного β -распада. Рассмотрена методика спектрофотометрического контроля слабого остаточного поглощения в области максимума собственной люминесценции данного сцинтилляционного материала, предназначенного для создания нового поколения детекторов элементарных частиц.

Проанализирована процедура определения слабого остаточного поглощения в кристаллах CaMoO_4 на стандартном спектрофотометрическом оборудовании. Разработана методика измерения и расчета спектральных зависимостей показателя поглощения в видимой области для образцов из кристаллов CaMoO_4 на основе анализа спектров поглощения в спектральном диапазоне 350 – 3300 нм, геометрических параметров пучка спектрофотометра в области каустики, данных дисперсии показателя поглощения.

Для анализа влияния на результаты измерений непараллельности лучей в световых пучках каналов спектрофотометра (Cary 5000, Varian) проведена экспериментальная оценка размеров и сходимости пучков света в измерительной камере. Полученная картина свидетельствует о том, что пучок света, падающего на образец, имеет слегка конусообразную форму, а протяженность области с минимальным поперечным сечением пучка составляет 40–45 мм. Эта область определяет размер образца по длине, при которой погрешность измерения показателя поглощения будет минимальной.

Проведена также оценка влияния сходимости на конечный результат измерений пропускания образцов.

Предложенная методика отличается тем, что процедура определения поглощения серии образцов не является трудоемкой и может проводиться в оперативном режиме, при поточном контроле оптической прозрачности монокристаллов молибдата кальция CaMoO_4 .

Данная методика может быть использована для анализа абсорбционных характеристик и оптического совершенства других одноосных кристаллических материалов с подобными спектральными характеристиками.

Работа была выполнена при поддержке Минобрнауки (ГК № 16.523.11.3013) с использованием оборудования ЦКП ИК РАН.

НЕУПРУГОЕ ПОВЕДЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГИДРОФТАЛАТА КАЛИЯ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ УЛЬТРАЗВУКОМ

Е.К. Наими¹, М.В. Колдаева², Г.В. Бушуева³, Г.М. Зиненкова³, Т.Н. Турская²

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, Москва, Ленинский пр-т, 4. E.mail: e.naimi@mail.ru*

² *Институт Кристаллографии РАН, 119333, Москва, Ленинский пр-т, 59*

³ *Физический фак-т МГУ им. М.В.Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1*

Пьезоэлектрические кристаллы гидрофталата калия (ГФК) перспективны для разработки акустооптических устройств, используются в качестве анализаторов в длинноволновой области рентгеновского спектра и монохроматоров в рентгеновской аппаратуре высокого разрешения. Монокристаллы ГФК – $C_8H_5O_4K$ – относящиеся к ромбической сингонии ($mm2$, $Pca2_1$), характеризуются наличием полярной оси $\langle 001 \rangle$ и плоскости спайности (010); проявляют анизотропию упругих, пьезоэлектрических и оптических свойств. В работе исследовалось неупругое поведение кристаллов ГФК в процессе ультразвукового воздействия.

Исследование неупругих свойств ГФК проводилось на монокристаллах, выращенных из водных растворов методом понижения температуры от 45 до 30°C. Для исследования неупругих свойств – внутреннего трения (ВТ) Q^{-1} и дефекта модуля Юнга (ДМЮ) $\Delta E/E$ – использовался метод двухсоставного пьезоэлектрического осциллятора. Испытания проводились на основной резонансной частоте осциллятора $f_p \approx 90$ кГц при комнатной температуре на воздухе в интервале амплитуд относительной деформации $\epsilon_0 \approx 10^{-6} - 10^{-4}$. В процессе измерений в образце возбуждалась продольная стоячая волна растяжения-сжатия. За изменением состояния образцов следили *in situ* по вольтамперным характеристикам (ВАХ) составного осциллятора. Тангенс угла ВАХ к оси напряжений пропорционален добротности Q осциллятора; ДМЮ определялся по сдвигу резонансной частоты составного осциллятора от ее начального значения при деформации ультразвуком. Наклон зависимости $Q^{-1}(|\Delta E/E|)$ позволял найти время релаксации τ , характеризующее действующий в образце релаксационный процесс неупругой деформации.

Поскольку кристаллы ГФК являются пьезоэлектриками, важна ориентация полярной оси образца к оси деформации. Приготовленные образцы четырех ориентаций имели поперечную, продольную и смешанную поляризацию. Анализ ВАХ и кривых зависимости ВТ и ДМЮ от амплитуды ультразвуковой деформации ϵ_0 показал, что потери энергии механических колебаний на поляризацию образца описываются простым релаксационным процессом зинеровского типа с одним временем релаксации τ .

Найденные времена релаксации для исследованных образцов кристаллов ГФК лежат в интервале $\tau \approx 10^{-8} - 10^{-7}$ с, что по порядку величины соответствует временам ионно-поляризационной релаксации. Обнаружено, что время релаксации зависит и от ориентации плоскости спайности к оси деформации. Наибольшее время релаксации отмечалось в образцах с поперечной и смешанной поляризацией, если плоскость спайности расположена под углом 45° к продольной оси образца, когда фактор Шмида максимален. Дислокационная составляющая неупругой релаксации с типичным временем релаксации $\tau_{\text{дискл}} \approx 5 \cdot 10^{-6}$ с (измеренным для ШГК) в ГФК отсутствует. Таким образом, можно заключить, что неупругое поведение кристаллов ГФК в процессе деформации ультразвуком определяется механизмом ионно-поляризационной релаксации по плоскостям спайности.

ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДА НА СТРУКТУРУ ТЕРМООБРАБОТАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИК-НАГРЕВА

Нгуен Хонг Вьет, Л.В.Кожитов, В.В.Козлов
НИТУ "МИСиС", 117936, Москва, Ленинский пр., 4

Новый метод карбонизации полиакрилонитрила с помощью ИК-нагрева приводит к образованию новых углеродных форм (фуллерено- и тубуленоподобных структур, углеродного нанокристаллического материала, графеновых структур), которые обладают перспективными физическими и химическими свойствами для использования в устройствах электроники.

Цель работы заключается в исследовании влияния кислорода на химическую структуру углеродного материала, полученного на основе полиакрилонитрила под действием ИК-нагрева на автоматизированной установке ИК-нагрева QHS-P610CP.

При ИК-нагреве в полиакрилонитриле происходят физические и химические превращения с образованием углеродного материала, содержащего атомы углерода, азота и водорода. При этом образуется полисопряженная система углеродного материала на основе полиакрилонитрила. С помощью метода ИК спектроскопии на Фурье спектрометре IFS-66v/s Bruker после нагрева при 200⁰C установлены на спектрах полосы валентных колебаний 1600 см⁻¹ (-C=N-) и 1400 см⁻¹ (-C=C-), соответствующие образованию полисопряженной системы углеродного материала на основе полиакрилонитрила. На стадии сушки и предварительной термообработки возникает возможность окисления полиакрилонитрила. Образование функциональных групп, содержащих кислород, подтверждено с помощью ИК-спектров, которые содержат полосы валентных колебаний $\nu=1725, 1790, 1680 \text{ см}^{-1}$, соответствующие функциональным группам сложного эфира и амидов, соответственно.

Полуэмпирическая схема модифицированного пренебрежения двухатомным перекрытием (MNDO) использована для расчета молекулярной структуры углеродного материала с помощью программного пакета GAUSSIAN 03. Для квантово-химических расчетов выбраны структуры C₄₆N₁₄H₁₀, C₄₅N₁₄OH₁₂, C₄₄N₁₄O₂H₁₃, и рассчитаны значения энергии связи (E_{св}), равные 7,40; 7,12; 6,97 эВ, соответственно. Увеличение количества атомов кислорода в УМ до 2 атомов приводит к уменьшению E_{св} от 7,40 до 6,97 эВ, соответственно.

Квантово-химические расчеты подтверждены с помощью анализа химического состава поверхности полиакрилонитрила после ИК-нагрева при 600⁰C (рентгеновский фотоэлектронный спектрометр PHI 5500 ESCA, фирма Physical Electronics). Состав поверхности полиакрилонитрила, равный C_{0,79}N_{0,18}O_{0,03}, показывает увеличение содержания углерода в углеродном материале по сравнению с исходным полимером при наличии остаточного содержания кислорода.

Таким образом, в результате превращений в полиакрилонитриле при ИК-нагреве в структуре полиакрилонитрила после ИК-нагрева при 200⁰C установлены с помощью ИК спектроскопии функциональные группы сложного эфира и амидов ($\nu=1725, 1790, 1680 \text{ см}^{-1}$), которые содержат кислород. Расчеты показывают, что увеличение количества атомов кислорода в углеродном материале до 2 атомов приводит к уменьшению E_{св} от 7,40 до 6,97 эВ, соответственно. Результаты подтверждены с помощью Оже-спектроскопии, и установлен состав поверхности полиакрилонитрила, равный C_{0,79}N_{0,18}O_{0,03}, после ИК-нагрева при 600⁰C, где наблюдается увеличение содержания углерода в углеродном материале.

СВОЙСТВА УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА, ПОЛУЧЕННОГО ПОДДЕЙСТВИЕМ ИК НАГРЕВА ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА

Нгуен Хонг Вьет, А.В.Костикова, Л.В.Кожитов, В.В.Козлов

*Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС",
г.Москва, Россия*

e-mail: nhviet1980@gmail.com

В последние годы для создания функциональных углеродных нанокристаллических материалов на основе полимеров используют экономически эффективный метод с применением ИК нагрева. При взаимодействии электромагнитного излучения с полимером в ИК диапазоне наблюдается синергетический эффект, ускоряющий превращения в полимере на основе принципа самоорганизации.

Однако до настоящего времени не существует данных о количественном и качественном влиянии атомов углерода, азота, водорода или металла на стабильность и конфигурацию структуры углеродного материала (УМ) на основе полиакрилонитрила (ПАН). Поэтому целью работы является выявление оптимальной пространственной структуры и геометрических параметров монослоя УМ, полученного путем ИК нагрева ПАН, влияния содержания атомов N и H на структурирование УМ и анализ распределения зарядовой плотности в системе.

Моделирование структуры УМ выполнено с использованием модели молекулярного кластера и полуэмпирической квантово-химической расчетной схемы MNDO (модифицированного пренебрежения двухатомным перекрыванием) в рамках программного пакета Gaussian 03. Для создания УМ был использован ПАН ($M_n=1 \cdot 10^5$), синтезированной по окислительно-восстановительной методике, который термообработывали с помощью ИК-нагрева на установке QHC-P610CP. Элементный анализ образцов проводили с помощью методов атомно-абсорбционной спектроскопии и пиролизной хроматографии на спектрометре AAS-30 и на хроматографе "CarloErba", соответственно.

Представляет интерес для контролируемого синтеза УМ с перспективными физико-химическими свойствами выполнить моделирование структуры углеродного материала термообработанного ПАН и исследовать влияние на структуру УМ содержания атомов N и H. Рассмотрены четыре возможных варианта структур монослоев УМ: $C_{46}N_{14}H_{10}$, $C_{44}N_{16}H_{12}$, $C_{44}N_{16}H_{22}$, $C_{42}N_{18}H_{14}$, содержащие различное количество атомов N и H и составленные согласно значениям ковалентности атомов, содержащихся в этих структурах.

Впервые с использованием полуэмпирической квантово-химической расчетной схемы MNDO для структуры УМ на основе термообработанного ПАН установлено, что увеличение содержания N от 14 до 18 атомов в монослоях УМ $C_{46}N_{14}H_{10}$, $C_{44}N_{16}H_{12}$, $C_{42}N_{18}H_{14}$ и H от 12 до 22 атомов в монослоях УМ $C_{44}N_{16}H_{12}$, $C_{44}N_{16}H_{22}$ приводит к уменьшению энергии связи (E_{cb}) от 7,40; 7,12 до 6,88 и 6,25 эВ, соответственно; и увеличению разности между максимальными и минимальными значениями длины связи (Δl), валентного угла ($\Delta \Theta$) и локального заряда (Δq) от 0,176 Å; 12,0°, 0,487 до 0,238 Å; 20,8°, 0,613, соответственно, и способствует искривлению структуры УМ. Результаты квантово-химического моделирования подтверждены с помощью данных элементного анализа образцов УМ и нанокompозита FeNi₃/C. Рост температуры ИК нагрева от 30 до 500 °C способствует снижению концентраций N (C_N) и H (C_H) в углеродном материале и нанокompозите FeNi₃/C от 27 до 18 и 10 масс. % и от 6 до 1 и 0,5 масс. %, соответственно.

**ИЗГИБНЫЕ КОЛЕБАНИЯ ДИСЛОКАЦИИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ
ОРИЕНТАЦИИ ВБЛИЗИ ТОЧКИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА**
Нечаев В.Н., Дежин В.В.

*ФГБОУ ВПО Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия, viktor.dezhin@mail.ru*

При исследовании изгибных колебаний дислокации использовалось найденное авторами выражение для функции линейного отклика дислокации.

Рассмотрены длинноволновые изгибные колебания дислокации. В низкочастотном пределе получено дисперсионное уравнение, из которого найден квадрат собственной частоты колебаний дислокации $\omega^2 q_z = \xi_0^2 + 2\xi_0\xi_1 c_t^2 q_z^2$, где q_z – компонента волнового вектора вдоль линии дислокации, ξ_0 отвечает скорости волны в отсутствие взаимодействия упругого поля с мягкой модой; ξ_1 – малая добавка к скорости, связанная с вкладом мягкой моды. Таким образом, учет взаимодействия упругого поля с мягкой модой приводит к увеличению эффективной массы и эффективной жесткости дислокации, перенормировке скорости изгибных волн вдоль дислокации. Величина поправок не зависит от близости к температуре фазового перехода T_c .

С учетом затухания мягкой моды найдена комплексная собственная частота $\omega = \omega'' q_z - i\gamma q_z$, где γq_z – коэффициент затухания дислокационных колебаний, связанный с рассеянием энергии при колебаниях параметра порядка, сопутствующих колебаниям дислокации. Показано, что найденный вклад в затухание сравним с известными фононными механизмами рассеяния энергии дислокации. Так же, как и выше, нетрудно убедиться, что величина γq_z не зависит от близости к T_c .

Кроме рассмотренной выше ветви изгибных колебаний, которую естественно назвать "квазиакустической", существует еще одно решение дисперсионного уравнения, определяющее ветвь колебаний, для которой ωq_z отлична от нуля при $q_z = 0$. Эту ветвь по аналогии с колебаниями сложных решеток удобно назвать "квазиоптической". Относительная величина отщепления локальной моды $\omega^2 q_z - \omega_0^2 / \omega_0^2$ зависит от упругих свойств материала. С приближением к T_c она уменьшается пропорционально $\ln|T - T_c|^{-1}$. Из полученных выражений видно, что "квазиоптическая" мода лежит значительно выше по частоте, чем "квазиакустическая" мода при всех допустимых волновых векторах.

ФУНКЦИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА ДИСЛОКАЦИИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ОРИЕНТАЦИИ ВБЛИЗИ ТОЧКИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Нечаев В.Н., Дежин В.В.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия, viktor.dezhin@mail.ru

Исследовалась динамика дислокации в окрестности структурного фазового перехода. Данный переход описывается параметром порядка η согласно теории Ландау. Наличие дислокаций приводит к появлению добавки $\eta_1 \vec{r}, t$ к термодинамически равновесному значению η_s , зависящей в общем случае как от координат \vec{r} , так и от времени t . Рассмотрена дислокация смешанного типа, лежащая вдоль оси Oz с единичным вектором касательной к линии дислокации $\vec{e}_0 = 0, 0, -1$, вектором Бюргерса $\vec{b} = b_x, 0, b_z$ и единичным вектором нормали к плоскости скольжения $\vec{n} = 0, 1, 0$. Ограничивались случаем малых колебаний дислокации вблизи положения равновесия. В линейном по смещению дислокации $u = u(z, t)$ приближении, учитывая заданную ориентацию дислокации, получены уравнения, описывающие колебания кристалла с дислокацией смешанного типа вблизи точки структурного фазового перехода:

$$\begin{aligned} \eta_1 \vec{r}, t = & -3\eta_s g \int \chi \vec{r} - \vec{r}', t - t' p \vec{r}', t' d\vec{r}' dt', \quad (1) \\ & \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 (b_x \sigma_{xy} + b_z \sigma_{yz})}{\partial t^2} - \Delta (b_x \sigma_{xy} + b_z \sigma_{yz}) + \frac{3}{1+\nu} \left(b_x \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y} + b_z \frac{\partial^2 p}{\partial y \partial z} \right) - \\ & - 2\mu g \eta_s \left(b_x \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial x \partial y} + b_z \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial y \partial z} \right) = -\rho b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \delta(x) \delta(y) + \\ & + \mu \left[b_x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \delta(x) \delta(y) - 2b_x b_z \frac{\partial u}{\partial z} \delta'(x) \delta(y) - b_z^2 \delta'(x) \delta(y) - u \delta''(x) \delta(y) \right], \quad (2) \\ & \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \Delta p + \frac{4}{3} \mu \frac{1+\nu}{1-\nu} g \eta_s \left[\frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial t^2} - \Delta \eta_1 \right] = \\ & = -\frac{2}{3} \mu \frac{1+\nu}{1-\nu} \left[b_x \delta(x) - u \delta'(x) \delta'(y) - b_z \frac{\partial u}{\partial z} \delta(x) \delta'(y) \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

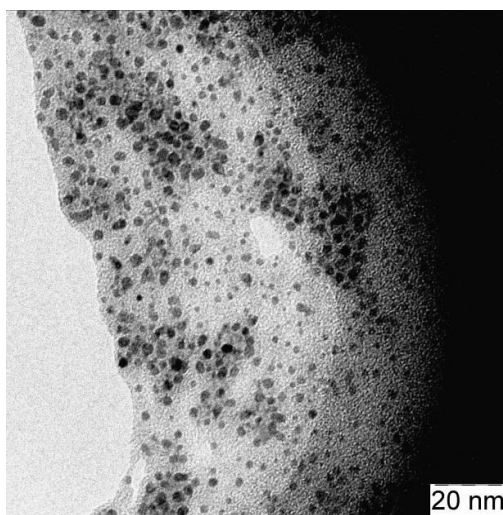
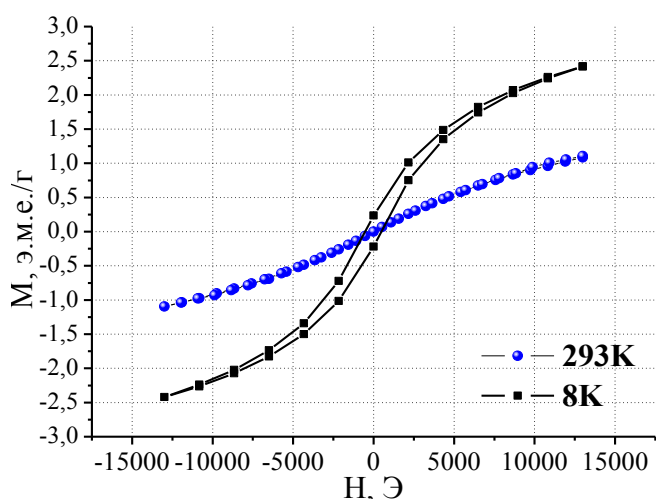
Здесь $\chi = \chi \vec{r}, t$ – функция отклика параметра порядка на гидростатическое давление $p = -\sigma_{ll}/3$, c_t и c_l – скорости поперечного и продольного звука, σ_{lm} – тензор напряжений, ν – коэффициент Пуассона, μ – модуль сдвига, g – постоянный стрикционный коэффициент, ρ – плотность вещества кристалла. Из решения системы уравнений (1)-(3) в представлении Фурье с граничным условием (равенство нулю силы Пича-Келера на линии дислокации) найдена функция линейного отклика дислокации произвольной ориентации на приложенную к ней внешнюю силу. В связи с громоздким выражением не представляется возможным записать эту функцию в настоящем сообщении.

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ 4 НМ НАНОЧАСТИЦ МАГГЕМИТА

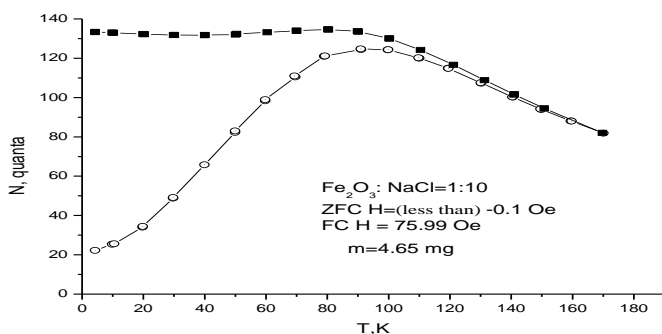
Никифоров В.Н. *, Гольдт А.Е. *, Гудилин Е.А. *, Средин В.Г. **,
Игнатенко А.Н. ***, Ирхин В.Ю. ***

* Московский госуниверситет имени М.В.Ломоносова, ** Военная академия РВСН им. Петра Великого, *** Институт физики металлов Уральского отделения РАН

Магнитные частицы шпинелей $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ были получены с использованием метода пиролиза аэрозолей, который позволяет получать химически однородные однофазные материалы в высокодисперсном состоянии. Для получения неагрегированных (слабоагрегированных) магнитных наночастиц маггемита с использованием метода пиролиза аэрозолей были сформированы соляные водорастворимые «микрокапсулы», состоящие из NaCl и $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Для композита $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3 - 10\text{NaCl}$ было проведено изучение микроморфологии с помощью ПЭМ, которое показало, что образовавшиеся микросферы являются полыми и их оболочка состоит из наночастиц практически одного и того же размера менее 10 нм. Кривые намагниченности для образца, полученного при температуре горячей зоны печи 650°C , измеренные при температурах 8 и 300 К, демонстрируют поведение, характерное для суперпарамагнитных наночастиц, что согласуется с данными Мессбауэровской спектроскопии. Данные мессбауэровской спектроскопии показали, что при температурах пиролиза (температурах горячей зоны реактора) $650 - 700^\circ\text{C}$ образуется маггемит.



На микрофотографиях присутствовали наночастицы с размером около 4 нм.



Точность метода определения среднего размера наночастиц из максимума кривой ZFC мала. Для получения точных результатов нужно учитывать не только магнито-кристаллическую анизотропию, но и поверхностную.

Магнетизм наночастиц магнетита: эффекты конечного размера и покрытия

В. Н. Никифоров, А.Н. Игнатенко В. Ю. Ирхин

Выполнены исследования по влиянию размера кластера магнетита на различные магнитные свойства (магнитный момент, температура Кюри, температура блокировки и т.д.). Рассмотрены как чистые частицы, так и покрытые органическим слоем. Обсуждаются метрологические параметры для размера нанокластеров.

Экспериментальные данные интерпретированы на основе модели «ядро-оболочка» (core-shell), аналогичной феноменологическому подходу Вайцзеккера в ядерной физике. В этой модели вводятся разные значения поверхностного и объемного обменных интегралов. Проведены симуляции методом Монте-Карло для классической модели Гейзенберга с различными объемными и поверхностными магнитными моментами.

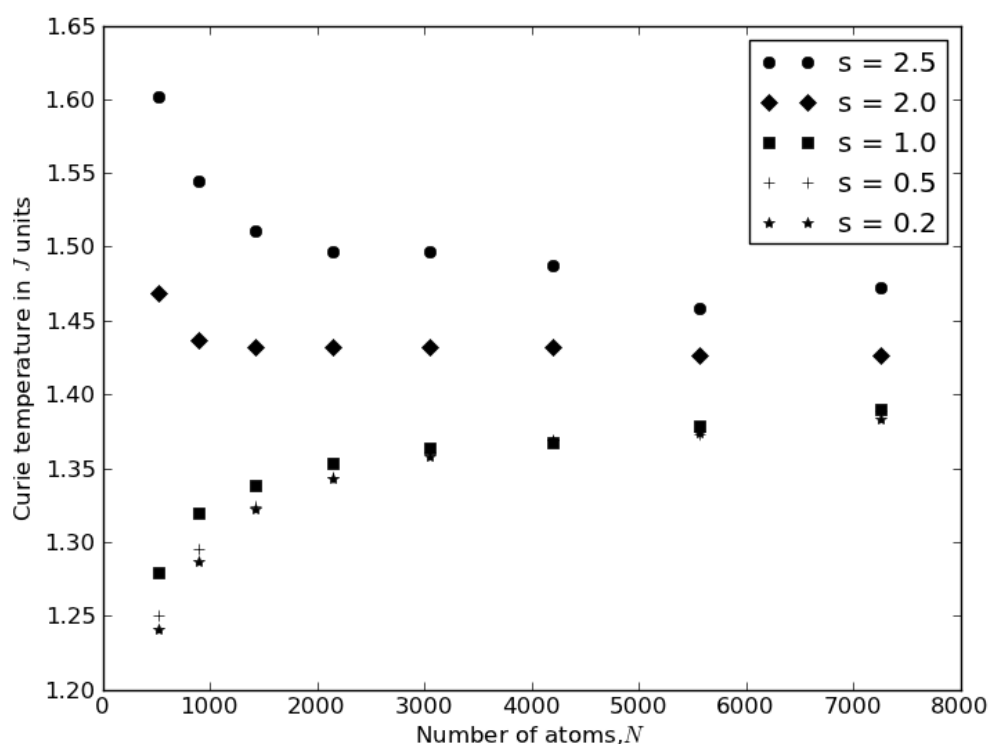


Рис. 1 Зависимость температуры Кюри от числа атомов в сферической частице при различных значениях отношения поверхностного и объемного обменных интегралов s .

О НЕКОТОРЫХ ПРОБЛЕМАХ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ ДИАГНОСТИКИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРЯМОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Никифорова Н.А.¹, Михеев Н.Н.², Степович М.А.^{1,3,4}

¹ Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, г. Калуга,
Россия, nikiforova.nadya@gmail.com, m.stepovich@rambler.ru

² Филиал Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН – Научно-
исследовательский центр «Космическое материаловедение», г. Калуга, Россия,
kmikran@spark-mail.ru

³ Ивановский филиал Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова,
г. Иваново, Россия, m.stepovich@rambler.ru

⁴ Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва,
Россия, m.stepovich@rambler.ru

Катодолюминесцентная (КЛ) микроскопия является одним из немногих методов локальной неразрушающей бесконтактной диагностики полупроводниковых объектов микро- и нанoeлектроники. Искомые параметры материала (диффузионная длина, коэффициент диффузии неравновесных неосновных носителей заряда – и др.) получают из сравнения теории и эксперимента, при этом корректность получаемых результатов во многом зависит от используемой математической модели исследуемого явления.

В настоящей работе рассмотрены основные модели количественной КЛ прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники, основанные на использовании зависимостей от энергии электронов пучка интенсивности монохроматической КЛ, проведены оценки возможностей их практического использования и обсуждены имеющиеся проблемы КЛ диагностики полупроводников. Рассмотрены возможности КЛ диагностики при реализации линейной или квадратичной рекомбинации неосновных носителей заряда, а также случай одновременного описания в математической модели и линейной, и квадратичной рекомбинаций; расчёты и измерения КЛ проведены для комнатной, азотной и гелиевых температур (см., например, [1-5]).

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011), а также Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 12-02-97519).

1. Гагарин Ю.Е., Петров В.И., Степович М.А. // Известия РАН. Серия физическая. 2000. Т. 64, № 8. С.1624-1628.

2. Михеев Н.Н., Степович М.А., Петров В.И., Невструева Е.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2000. № 2. С.75-79.

3. Гагарин Ю.Е., Михеев Н.Н., Поляков А.Н., Степович М.А. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. № 9. С.35-41.

4. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. // Известия РАН. Серия физическая. 2012. Т. 76, № 9. С.1082-1085.

5. Никифорова Н.А., Степович М.А. // Научные труды Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2013. С.32-37.

ДЕФОРМАЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ НИОБИЯ И БРОНЗЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Никулин С.А.¹, Рожнов А.Б.¹, Рогачев С.О.¹, Дергунова Е.А.²,
Алиев Р.М.², Трактирникова Н.В.², Хаткевич В.М.¹

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва, Россия

²ОАО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», г. Москва, Россия
nikulin@misis.ru

Бронза и ниобий являются основными компонентами, из которых изготавливаются многожильные композиционные сверхпроводники на основе сверхпроводящего соединения Nb₃Sn. Технология производства композиционных сверхпроводников на основе Nb₃Sn включает многократную совместную деформацию композиционной заготовки, состоящей из бронзовой матрицы и распределенных в ней ниобиевых стержней. Основными этапами «бронзовой» технологии является сборка композиционной заготовки, ее прессование при высокой температуре и последующее волочение с промежуточными термообработками.

Механические характеристики бронзы и ниобия при различных температурах определяют их способность к устойчивой пластической деформации при обработке давлением. В связи с этим важной задачей является определение механических свойств бронзы и ниобия при высоких температурах с высокими скоростями деформации, моделирующими этапы деформационной обработки в производственных условиях.

Механические свойства бронзы и ниобия определяли по испытаниям на сжатие на установке Gleeble System 3800 цилиндрических образцов бронзы (Cu-14,5%Sn) и чистого ниобия длиной 15 мм и диаметром 6 мм при температурах 20; 500; 700 и 1100 °С (для бронзы максимальная температура испытания составила 700 °С) и при трех скоростях деформации: 0,1; 1 и 30 с⁻¹. Используемая скорость нагрева обеспечивала нагрев до указанных температур в течение 1 мин. Испытания проводили в вакууме 10⁻⁴ мм. рт. ст, что обеспечило отсутствие окисления образцов в процессе испытаний. Температуру контролировали с помощью термопар припаяваемых непосредственно к образцу. При испытаниях регистрировали диаграммы деформации при сжатии в координатах «напряжение – относительное укорочение», по которым рассчитывали основные механические характеристики.

Повышение скорости деформации, равно как и снижение температуры испытания приводит к повышению прочностных характеристик обоих материалов. При этом изменение скорости деформации и температуры оказывает большее влияние на изменение прочностных характеристик бронзы, по сравнению с ниобием.

Наибольшее влияние на изменение прочностных характеристик материалов скорость деформации оказывает при высоких температурах испытания, 1100 и 700 °С для ниобия и бронзы, соответственно. При температуре испытания 700 °С увеличение скорости деформации с 0,1 до 30 с⁻¹ приводит к повышению напряжения сжатия при степени деформации 50 % для ниобия и бронзы с 344 до 545 МПа и с 112 до 318 МПа, соответственно, т.е. в 1,6 и 2,8 раз, соответственно.

Наибольшая чувствительность прочностных характеристик материалов к изменению температуры испытания наблюдается при скорости деформации 0,1 с⁻¹. Повышение температуры испытания с 20 до 700 °С приводит к понижению напряжения сжатия при степени деформации 50 % для ниобия и бронзы с 760 до 344 МПа и с 1750 до 112 МПа, т.е. в ~2 и ~16 раз, соответственно.

MECHANICAL PROPERTIES and DEFECT NANOSTRUCTURE CHANGING of Si, Si + SiO₂, GeSi and AUTOMATED SYSTEM of ANISOTROPY VISUALIZATION

Onanko A.P., Lyashenko O.V., Prodayvoda G.T., Onanko Y.A., Lyashenko I.O.
Kyiv national university, Kyiv, Ukraine,
e-mail: onanko@univ.kiev.ua

The dislocation density and the depth of broken layer are measured for Si, Si + SiO₂ wafer-plates. GeSi crystal with orientation [111], which periodic mechanical tension is added to, and which is under the combined influence of external electric field and magnetic field is considered.

For measuring of elastic module E and IF the impulse method on frequency $f \approx 1,67$; 5 MHz and the method of complete piezoelectric oscillator on frequency $f \approx 118$ kHz were used at deformation $e \approx 10^{-6}$ in vacuum $P \approx 10^{-3}$ Pa. A measuring error relative change of the elastic module $\frac{\Delta E}{E_0} \approx 0,5\%$ [1].

After an irradiation there is diminishing of the velocity value of longitudinal ultrasound elastic waves V_{\parallel} , of the velocity value of transversal ultrasound elastic waves V_{\perp} , elastic module E and shear module G of specimen. There was a small value of IF background in SiO₂ $Q^{-1}_0 \approx 2 \cdot 10^{-6}$ to $T \approx 385$ K.

It's showed, that inelastic Q^{-1} and elastic E characteristics are essentially depended from morphology of surface layer. 3D atomic-force microscopy (AFM) of microstructure image of Si type KEF-7,5 with orientation (100) after irradiation by $^{11}\text{B}_5^+$ ions with doze D $\approx 1 \cdot 10^{15}$ ion/sm² and energy W ≈ 130 KeV is represented on fig. 1.

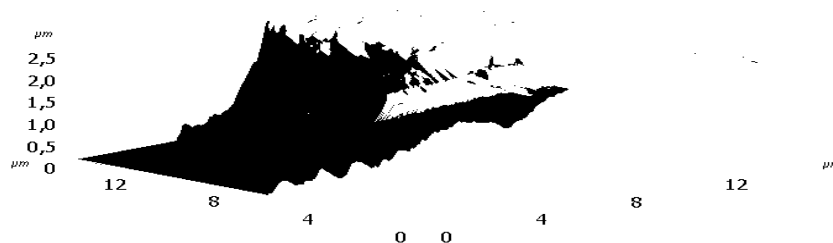


Figure 1. 3D atomic-force microscopy of microstructure image of Si type KEF-7,5 with orientation (100) after irradiation by $^{11}\text{B}_5^+$ ions with doze $D \approx 1 \cdot 10^{15}$ ion/sm² and energy $W \approx 130$ KeV at $T = 293$ K (15x15 mkm).

The method of AFM is found out the increase of roughness of Si surface as a result of irradiation by the $^{11}\text{B}_5^+$ ions. It is showed that after irradiation the electrons e^- there is destruction of Si surface layer, predefined the accumulation of vacancy complexes V-V-V. Irradiation of Si surface by $^{11}\text{B}_5^+$ ions with doze $D \approx 1 \cdot 10^{15}$ ion/sm² and with energy $W \approx 130$ KeV, when energy output in volume unit considerably anymore at the same run-length particles of these energies in Si $L_{11\text{B}_5^+} \approx 360\ 000$ nm, results to formation of high concentration of defects in Si surface layer, interstitial atoms Si_i .

Thus, the study of influence of structure defects on attenuation of elastic vibrations in Si + SiO₂ wafer-plates allows to estimate the degree of nanostructure. Outcomes of an evaluation of dynamic characteristics interstitial atoms Si_j , vacancy V and O-complexes can be applied for account of a condition of an annealing with the purpose of deriving specific structural defects in Si + SiO₂.

[1] A.P. Onanko. Influence of hydrogen on directional surface of inelastic-elastic body Ti_{0.5}Al_{0.5} alloy // Metalphysics and new technology. – 2011. – V. 33, № 2. – P. 253-261.

АКТИВАТОРНЫЕ ЦЕНТРЫ СВЕЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ CsI:Eu.

Н.В. Овчаренко¹, В.Ю. Яковлев², Л.Н. Трефилова¹, А.Н. Карнаухова²

¹Институт сцинтилляционных материалов, Украина, Харьков,

ovcharenko@isma.kharkov.ua

²Томский Политехнический университет, Россия, Томск, yak999@rambler.ru

Исследованы спектрально-кинетические характеристики фотолюминесценции кристаллов CsI:Eu, выращенных методом Стокбаргера в вакуумированных кварцевых ампулах. Концентрация активатора в исследуемых образцах, определенная усовершенствованным вольтамперметрическим методом с точностью более, чем $5 \cdot 10^{-5}$ масс%, составляла 8×10^{-4} ; $1,9 \times 10^{-3}$; 5×10^{-3} ; 1×10^{-2} ; 2×10^{-2} ; $3,2 \times 10^{-2}$; $1,3 \times 10^{-1}$ и $3,9 \cdot 10^{-1}$ масс%. Свечение возбуждалось излучением азотного лазера ($\lambda=337,1$ нм; $t_{1/2}=5$ нс; $Q=1$ мДж) при 78 К. Закалка образцов от 650К до 295К проводилась со скоростью 5К/с.

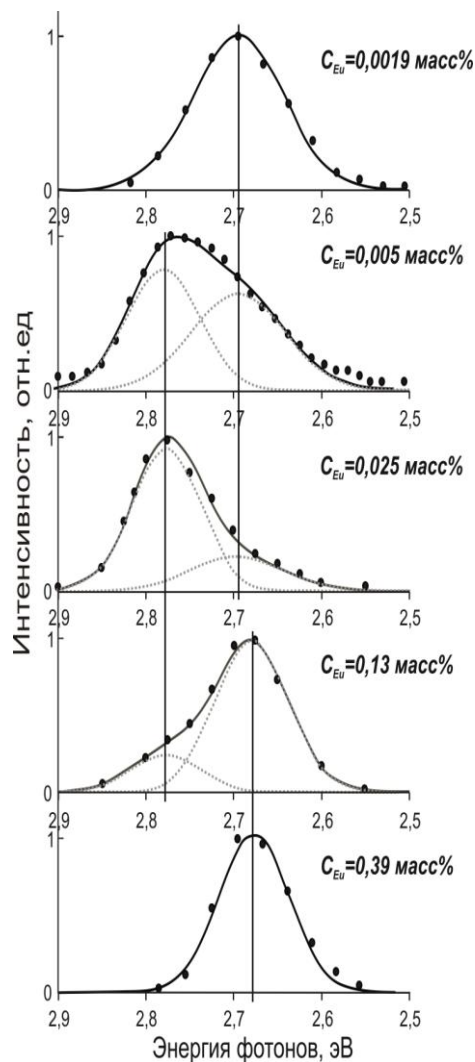


Рис. 1. Нормированные спектры фотолюминесценции кристаллов CsI:Eu, измеренные через 100 нс после затухания импульса возбуждения.

Обнаружено, что спектры люминесценции всех образцов CsI:Eu могут быть представлены одной или суммой двух полос из набора трех подгоночных гауссиан с максимумами 2,69; 2,78 и 2,67 эВ (Рис.1). При концентрации $Eu < 2 \times 10^{-3}\%$ спектр свечения состоит из одной полосы с максимумом 2,69 эВ. При концентрации Eu в пределах $2 \times 10^{-3} - 3,2 \times 10^{-2}\%$ спектр аппроксимируется двумя полосами с максимумами 2,69 эВ и 2,78 эВ. Свыше $3,2 \times 10^{-2}\%$ Eu полоса 2,69 эВ исчезает и появляется полоса с максимумом 2,67 эВ. Спектр кристалла с максимальной концентрацией $3,9 \cdot 10^{-1}\%$ Eu состоит из одной полосы с максимумом 2,67 эВ. Свечение в полосах 2,69 и 2,67 эВ затухает экспоненциально с временными константами 0,42 и 0,9 мкс, соответственно. Кинетика затухания свечения 2,78 эВ содержит два экспоненциальных компонента с временными константами 0,15 и 0,51 мкс. Концентрационные зависимости выхода свечения в каждой из полос с максимумами 2,69; 2,78 и 2,67 эВ интерпретируются в рамках модели центров свечения, согласно которой полоса 2,69 эВ обусловлена одиночными диполями $Eu^{2+}-v_c^-$, а полосы 2,78 и 2,67 эВ обусловлены их двух- и трехдипольными кластерами. Совпадение спектров свечения состаренного CsI: $8 \times 10^{-4}\%$ Eu и закаленного CsI: $1 \times 10^{-2}\%$ Eu образцов подтверждает предложенную модель. Закалка образца CsI: $1 \times 10^{-2}\%$ Eu приводит к диссоциации двухдипольных кластеров на одиночные диполи, и вместо полосы с максимумом 2,78 эВ в спектре наблюдается полоса с максимумом 2,69 эВ.

АНАЛИЗ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ $ZnGeP_2$ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ И ФОТОУПРУГОСТИ
Окунев А.О.¹, Верозубова Г.А.², Ткаль В.А.³, Стащенко В.А.¹, Жуковская И.А.³

¹*ФГБОУ ВПО Новгородский государственный университет
имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия*

²*Учреждение Российской академии наук Институт мониторинга климатических
и экологических систем Сибирского отделения РАН, г. Томск, Россия*

³*Новгородский филиал Санкт-Петербургского государственного университета
сервиса и экономики, Великий Новгород, Россия
Alexei.Okunev@mail.ru*

Монокристаллы $ZnGeP_2$, полупроводникового соединения из группы $A^2B^4C^5_2$, являются одним из наиболее важных нелинейно-оптических материалов ИК-диапазона благодаря своим уникальным оптическим и нелинейно-оптическим свойствам. Более широкое использование $ZnGeP_2$ в нелинейной оптике в значительной мере зависит от успехов в выращивании монокристаллов $ZnGeP_2$ высокого структурного и оптического качества. В данной работе для исследования дефектов структуры $ZnGeP_2$ использовались метод рентгеновской топографии на основе эффекта Бормана [1] и метод поляризационно-оптического анализа.

Методом рентгеновской топографии на основе эффекта Бормана в кристаллах $ZnGeP_2$, выращенных вертикальным методом Бриджмена в Институте мониторинга климатических и экологических систем (ИМКЭС) СО РАН и Харбинском технологическом университете (НТ), выявляются все типы дефектов кристаллической решетки: трехмерные или объемные (поля макронапряжений, сетки дислокаций, границы блоков, макровключения), двухмерные или плоскостные (двойники, дефекты упаковки), одномерные или линейные (индивидуальные дислокации), квазиточечные (микродефекты, т.е. микровключения и малые дислокационные петли), полосы сегрегационной неоднородности. Для идентификации дефектов использовались особенности их изображений на различных отражениях и анализ изображений в виде розеток интенсивности в совокупности с теоретическим расчётом контраста от дефектов по методике, развитой в [1].

Характерными чертами слитков, выращенных как в ИМКЭС, так и в НТ, является преобладание краевых и смешанных дислокаций системы скольжения $\{10\} \{10\}$ с осями, параллельными и наклонными к оси [001] роста кристаллов. Кристаллы, выращенные в НТ, обладая большей средней плотностью дислокаций, содержали большие области напряжений и деформаций кристаллической решетки, блоки, двойники и дефекты упаковки. Подавляющее число микродефектов в кристаллах $ZnGeP_2$ по формируемым им розеткам контраста интерпретируются как когерентные микровключения второй фазы, фиксируется контраст от специфичных дефектов материала – цепочек включений «solute trails» и дислокаций с мощными примесными атмосферами.

Показаны большие возможности поляризационно-оптического метода при анализе пластин $ZnGeP_2$, вырезанных вдоль плоскости оптической изотропии (001). Поляризационно-оптические изображения соответствуют преимущественно макроскопическим полям деформаций, включениям в объеме кристалла и рядам дислокаций, фиксируются также розетки контраста от отдельных дислокаций в малоугловых границах.

1. Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Ткаль В.А. Рентгеновская топография на основе эффекта Бормана. LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, 2012, p. 348.

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДАМИ EBIC И LBIC СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Орлов В.И.^{1,2}, Феклисова О.В.¹, Якимов Е.Б.¹

¹ Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов,
РАН, г. Черноголовка, Россия, yakimov@iptm.ru

² Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Производство и использование мультикристаллического кремния в качестве основного материала для изготовления солнечных элементов диктует необходимость развития методов эффективной диагностики таких структур. Для выявления неоднородностей электрических свойств и рекомбинационно активных протяженных дефектов в солнечных элементах широкое применение нашли метод наведенного электронным пучком тока в растровой микроскопии (EBIC) и метод тока, индуцированного световым пучком (LBIC). Однако современные методы выращивания поли- и мультикристаллического кремния и технологии изготовления позволяют получать солнечные элементы с такими параметрами, когда чувствительность указанных методов уже не всегда достаточна для эффективной диагностики таких структур. Именно поэтому и возникает вопрос об оптимальном использовании этих методов и их предельных возможностях. Для сравнения возможностей методов EBIC и LBIC в настоящей работе проведены исследования солнечных элементов на основе мультикристаллического кремния вышеуказанными методами.

Изображения фрагмента промышленного солнечного элемента на основе мультикристаллического кремния, полученные двумя методами, представлены на Рис. 1. Несмотря на схожесть, в изображениях имеются явные различия. Особенно сильно отличаются изображения в левой части рис.1(а) и 1(в). Эта часть образца является краем солнечного элемента, и на LBIC изображении эта часть кристалла является более светлой. Также на рис.1(в) наблюдается темная область П-образной формы, отмеченная стрелкой. На EBIC изображении указанных особенностей контраста не наблюдается. Анализ показал, что обе эти особенности на изображениях связаны с наличием омических контактов на обратной стороне элемента, влияние которых на EBIC изображение пренебрежимо мало вследствие малой глубины проникновения электронов.

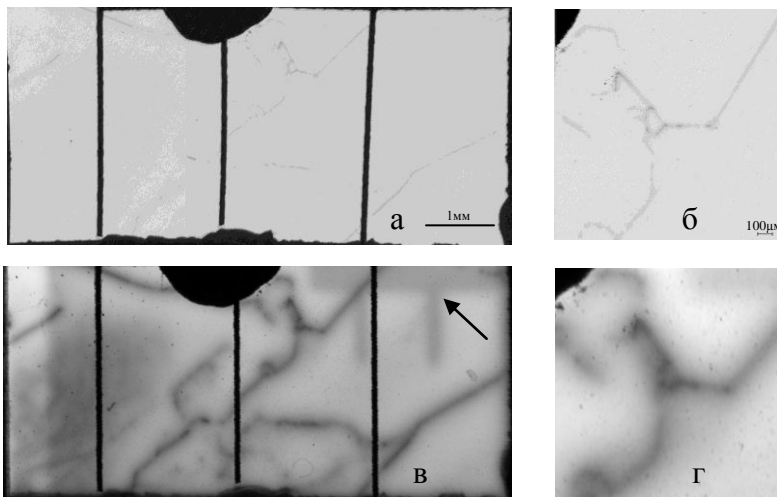


Рис. 1. Изображения, полученные методами EBIC (а, б) и LBIC (в, г)

Контраст границ зерен (темные линии) в методе LBIC существенно выше (Рис.1 (в, г)), тогда как в методе EBIC существенно выше пространственное разрешение (Рис.1 (а, б)). Обсуждаются физические причины

наблюдаемых различий в изображениях, полученных методами EBIC и LBIC. Приводятся результаты расчета контраста двумерного дефекта для обоих методов в зависимости от диффузионной длины и ширины оптического пучка.

Работа частично поддержана грантом РФФИ (13-02-00021).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПО-ТОМОГРАФИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ

Осадчая А.С.¹, Золотов Д.А.¹, Беседин И.С.¹, Бузмаков А.В.¹, Асадчиков В.Е.¹,
Смирнов И.С.²

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук, Москва, Россия, secr@crys.ras.ru

² Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета "Высшая школа экономики", Москва, Россия, met@miem.edu.ru

Метод рентгеновской топо-томографии является одним из новых направлений рентгеновской топографии и применяется для неразрушающего исследования внутренней структуры кристаллических объектов.

Основной особенностью метода является выбор оси вращения параллельной вектору обратной решетки одной из отражающих плоскостей кристалла. В результате, при получении проекционных изображений, каждый раз при повороте гониометра на детекторе фиксируются соответствующие брэгговские отражения (топограммы). Применение тех же алгоритмов реконструкции, как и в случае абсорбционной томографии, позволяет получить трехмерное представление внутренней структуры исследуемого объекта.

На рис. 1 представлена схема микротомографа 0, модифицированного для реализации метода топо-томографии в лабораторных условиях.

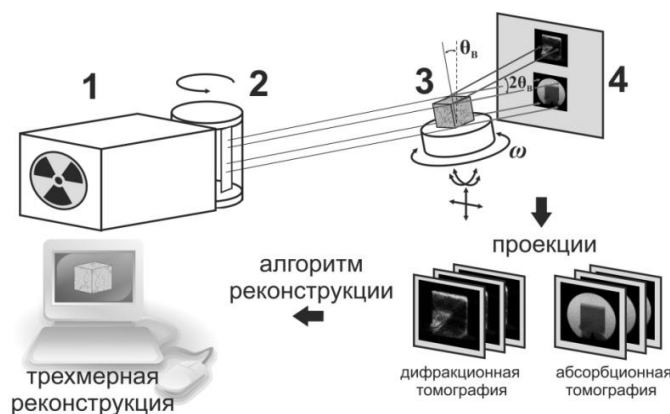


Рис.1. Схема эксперимента: 1 – источник рентгеновского излучения; 2 – кристалл-монокроматор; 3 – исследуемый кристалл; 4 – двумерный детектор (2048×2048 ячеек с размером 13×13 мкм²).

В настоящей работе представлено развитие метода топо-томографии, направленное на изучение реальной трехмерной структуры кристаллов с использованием лабораторных источников рентгеновского излучения.

Данная работа выполнена в рамках проекта РФФИ 13-02-00552А

[1] Д. А. Золотов, А. В. Бузмаков, В. Е. Асадчиков, А. Э. Волошин, В. Н. Шкурко, И. С. Смирнов //Кристаллография. 2011. Т. 56. № 3. С. 426

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОСТЕЙШИХ И СМЕШАННО-СЛОИСТЫХ ОКСИДОВ ВИСМУТА

Осибян В.Г.

филиал ФГБОУ ВПО "МГИУ" в г. Вязьме, Российская Федерация

<http://www.vfmgiu.ru/>

Сегнетоэлектрическое семейство сложных оксидов висмута $A_{n-1}Bi_2V_nO_{3n+3}$ (1), в котором перовскитоподобные слои $[A_{n-1}V_nO_{3n+1}]^{2-}$ чередуются со слоями висмута $[Bi_2O_2]^{2+}$, впервые описал Ауривиллиус [1]. Приведенная формула семейства сегнетоэлектрических соединений Ауривиллиуса (СССА) предполагает большое число типов атомов, которые могут находиться в позициях А и В, что и подтверждается многочисленными исследованиями. СССА имеют высокие температуры Кюри и сохраняют сегнетоэлектрические свойства в широком интервале температур. Они могут применяться для изготовления конденсаторов, пьезообразователей, фильтров, гидроакустических устройств, пироэлектрических приемников инфракрасного диапазона, в качестве нелинейных элементов и в устройствах оперативной памяти с исключительно высокой устойчивостью к многократному переключению поляризации (до 10^{12} циклов). К перечисленному следует добавить, что своеобразная структура СССА и наличие интересных разновидностей внутри семейства делает их превосходными объектами для изучения различных типов фазовых переходов.

В этом плане следует выделить составы с $n=1$ (простейшие СССА) и составы со смешанно-слоистой структурой, в которых имеет место чередование $n, n+1$ слоев.

В данной работе на основе анализа особенностей структур простейших и смешанно-слоистых СССА предлагаются единые кристаллохимические формулы как для описания указанных разновидностей, так и для всего семейства в целом.

При $n=1$ катионная А-подрешетка отсутствует, и формула семейства принимает вид Bi_2VO_6 (2) или $[Bi_2O_2]^{2+}[VO_4]^{2-}$. Условие электронейтральности формульной единицы $X_A V_A + X_B V_B = 6n$, где X- концентрация иона, V- его валентность, согласно (1) можно записать в виде $(n-1)V_A + nV_B = 6n$, и при $n=1$ сводится к $V_B = 6$. Известны, однако, составы с катионами В с более низкими валентностями; и для общего описания простейших СССА предлагается кристаллохимическая формула $Bi_2VO_{3+V_B/2}$. При $V_B = 6$ предлагаемая формула принимает вид (2).

Смешанно-слоистые СССА (так называемые структуры прорастания) можно описать формулой $Bi_4(A_{n-1}A'_n)_{2n-1}(B_nB'_{n+1})_{2n+1}O_{6n+9}$ с последовательным чередованием n и $n+1$ слоев. Условие электронейтральности для таких структур запишется в виде $X_A V_A + X_{A'} V_{A'} + X_B V_B + X_{B'} V_{B'} = 6(2n+1)$. Наблюдаемые фазы прорастания с высоким периодом идентичности решетки по направлению «С» (001) до 180 \AA [2] предполагают возможность образования смешанно-слоистых структур типа $n/n+1/n+2/n+3/n+2/n+1/n$ с периодом идентичности $C_n + C_{n+1} + C_{n+2} + C_{n+3} + C_{n+2} + C_{n+1} + C_n \sim 180 \text{ \AA}$. Можно предположить, что образование смешанно-слоистых структур определяется условиями синтеза и не представляет исключительного явления.

Литература

1. Aurivillius B. Mixed Bismuth Oxides with Layer Lattices: II. Structure Type of $Bi_4Ti_3O_{12}$ // Arkiv.Kemi. 1949. V.1. №58.
2. Яновский В.К., Воронкова В.И. //Тез.докл.П Всесоюз.конф. по физ.-хим.основам технологии сегнетоэлектрических и родственных материалов.- М.: Наука, 1983.-с.47.

КРИСТАЛЛЫ И ГЕКСАТИКИ – НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА СТРОЕНИЕ ФАЗ С ПОНИЖЕННЫМ ТРАНСЛЯЦИОННЫМ ПОРЯДКОМ

Островский Б.И.

ФГБУН Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, ostr@cea.ru

На основе рентгеновских дифракционных экспериментов рассмотрены особенности структуры ряда низкоразмерных фаз жидких кристаллов (ЖК). Основное внимание уделено различию в строении кристаллов и гексатических ЖК. Последние представляют собой среды с одномерным трансляционным порядком в направлении нормали к слоям, состоящих из стержнеобразных молекул, и ближним позиционным порядком в плоскости слоев. Одновременно в плоскости слоев наблюдается дальний порядок в ориентации сторон локальных гексагонов – так называемый порядок в ориентации связей.

Дан анализ результатов рентгеновских экспериментов высокого разрешения свободно подвешенных пленок гексатиков в окрестности фазовых переходов кристалл-гексатик и гексатик – смектик. Измерения были проведены на источнике синхротронного излучения PETRA III в DESY (Гамбург, Германия). Рентгеновские измерения проводились в геометрии на пропускание с использованием двумерного детектора. Применение формализма углового рентгеновского кросс-корреляционного анализа к измеренным наборам двумерных дифракционных картин позволило определить параметры порядка в ориентации связей в гексатической фазе ЖК. Были рассчитаны также температурные зависимости позиционных корреляционных длин в плоскости гексатических слоев. Обнаружено, что корреляционные длины, отвечающие различным гармоникам Фурье разложения ориентационных параметров порядка, возрастают по мере увеличения номера гармоник. Подобное поведение указывает на сильное взаимодействие порядка в ориентации связей с позиционным порядком в гексатических ЖК. Полученные данные позволяют уточнить условия применимости различных микроскопических подходов к описанию гексатических ЖК.

МОДЕЛЬ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ ПЛОЩАДИ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ И МОДУЛЯ ЮНГА

Павлов Д.А., Лихачев А.Н.

БГТУ «ВОЕНМЕХ», Санкт-Петербург, Россия

zontik_z@mail.ru

Разработана модель, напряженно-деформированного поведения материалов, деформация которых может достигать более чем 500 %, при этом необходимо подобрать всего две не физические константы. Отличительной особенностью, полученной модели, является учет изменения площади поперечного сечения, и модуля Юнга материала в зависимости от удлинения.

Из существующих моделей позволяющих описывать поведение гиперупругих материалов, таких как модифицированная модель Гука, Муни-Ривлина, Йео, Джен-та, Арруда – Бойса только модель Огдена позволяет с минимальным числом коэффициентов осуществить аппроксимацию экспериментальной кривой при деформациях около 500%. Модель Огдена устанавливает следующую зависимость между одноосной деформацией и силой эту деформацию вызывающей

$$f(\varepsilon) = y_0 \cdot z_0 \mu_1 \{[(\varepsilon + 1)^{\alpha_1 - 1} - (\varepsilon + 1)^{-(\alpha_1 + 1)}]\} + \mu_2 \{(\varepsilon + 1)^{\alpha_2 - 1} - (\varepsilon + 1)^{-(\alpha_2 + 1)}\} \quad (1)$$

где $\mu_1, \mu_2, \alpha_1, \alpha_2$ – константы материала, y_0, z_0 – начальная длина и толщина образца соответственно, f – сила, ε - относительная деформация.

Модифицируя закона Гука с учетом существенного изменения площади поперечного сечения образца и изменением модуля Юнга материала получим следующую зависимость между одноосной деформацией и силой эту деформацию вызывающей

$$f(\varepsilon) = E(\varepsilon) \cdot S_{\perp}(\varepsilon) \cdot \varepsilon = E_0 \left(\frac{A}{\varepsilon + A} + B\varepsilon^2 \right) \cdot \frac{S_0}{\varepsilon + 1} \cdot \varepsilon \quad (2)$$

где S_0, S_{\perp} – площадь поперечного сечения до и после деформации, E_0 – модуль Юнга при нулевой деформации; A, B – константы материала.

Согласование экспериментальной зависимости представленной в [1] дает следующее значение коэффициентов для модели Огдена $\mu_1 = 68500 \text{ Па}$, $\mu_2 = 767 \text{ Па}$, $\alpha_1 = 0.700$, $\alpha_2 = 3.441$, а для полученного уравнения (2) $A=4.85$, $B=0.0326$, $E_0 = 8.95 \cdot 10^4 \text{ Па}$.

Общее выражение для описание поведения гиперупругих материалов выражаемое из (2) можно записать в виде

$$E_0 S_0 B \varepsilon^4 + E_0 S_0 B A \varepsilon^3 - f \varepsilon^2 + (E_0 S_0 A - f(1 + A)) \varepsilon - f A = 0 \quad (3)$$

Литература

1. G. Kofod, “Dielectric elastomer actuators”, 2001. – 130 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ, ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОЕВ

Л.В.Панина, А.Т.Морченко, В.Г.Костишин,
Н.А.Юданов, С.П.Курочка, А.А.Сергиенко, Н.Н.Крупа

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия
dratm@mail.ru

В технологии наногетероструктур для магнитной электроники и микросистемной техники при контроле параметров пленок важным является выбор неразрушающего метода, позволяющего проводить измерения различных характеристик отдельных слоев в дистанционном режиме в реальном масштабе времени. В случае магнитных пленок имеет смысл объединение традиционной эллипсометрии и магнитооптики (МО), для описания которых может быть использован общий подход в рамках представлений матричной оптики.

При этом в любых эллипсометрических измерениях большое значение имеет адекватный выбор модели. Для *in situ* мониторинга в технологии наногетероструктур во многих случаях разумным является предположение о постоянной скорости роста пленок и стабильных оптических параметрах. В стандартном эллипсометрическом анализе требуется определять модельный отклик от каждого слоя. В результате при характеристике всей структуры в целом по мере последовательного наращивания слоев возможные ошибки накапливаются, по крайней мере, в силу двух причин: 1) вероятности образования реальных переходных слоев с химическим и фазовым составом, отличным от материалов соседствующих пленок (эта проблема устраняется с помощью введения в расчетную модель дополнительного слоя с различными вариантами предполагаемого состава и выбора из них наиболее подходящего при проведении процедуры подгонки); 2) влияния на регистрируемый сигнал не только верхних слоев, но и (из-за чрезвычайно малой толщины последних) низлежащих слоев. В последнем случае весьма плодотворной оказывается идея использования представления о виртуальном интерфейсе, в котором все ранее нанесенные слои с измеренными характеристиками заменяются неким эффективным слоем, выступающим в роли псевдоподложки.

В настоящей работе с помощью спектральной МО-эллипсометрии изучены оптические, геометрические и магнитооптические свойства наноразмерных магнитных гетероструктур с немагнитными прослойками. Регистрировались спектры эллипсометрических параметров ψ и Δ , по которым восстанавливались оптические характеристики и толщины слоев. Магнитооптические спектры регистрировались в геометрии экваториального эффекта Керра, который полностью совместим с методикой эллипсометрических измерений. Для этого производилось многократное измерение и усреднение значений ψ и Δ при двух противоположных направлениях магнитного поля. Для расчета использовались оптические данные, полученные из эллипсометрических измерений в отсутствие магнитного поля.

Предложенный метод позволяет также проводить измерения в динамическом режиме при переменном магнитном поле и может использоваться для *in situ* характеристики магнитных гетерогенных структур в процессе их изготовления.

Исследование выполнено в рамках Госконтракта № 14.513.11.0015 от 11 марта 2013 г. (шифр 2013-1.3-14-513-0001-043)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ НЕДИАГОНАЛЬНОГО МАГНИТОИМПЕДАНСА ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДАТЧИКОВ СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ И ТОКОВ

Л.В.Панина, Н.А.Юданов, А.Т.Морченко, В.Г.Костишин

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

kolyan2606@mail.ru

Важным направлением в магнитометрии является развитие некриогенных технологий миниатюрных систем с высокими чувствительностью и пространственным разрешением на основе эффекта магнитного импеданса в тонких магнитных проводах и пленках. Достижение чувствительности на уровне 0,1-1 нЭ в сочетании с микронными размерами, линейным и управляемым операционным режимом и высокой стабильностью открывает возможность создания технологичных и компактных систем контроля и мониторинга для биологии, токсикологии, дефектоскопии и других отраслей.

Фундаментальные исследования в области современных некриогенных магнитометрических систем, таких как магниторезистивных, спин-туннельных, тонкопленочных, магнитомодуляционных, позволили получить заявленную выше чувствительность, а в некоторых случаях – даже на уровне 10 пЭ]. Однако достижение таких чувствительностей в миниатюрных сенсорных системах с учетом частотных характеристик детектируемых сигналов и стабильности остается проблематичным. Модельные исследования, проведенные нами, показывают принципиальную возможность снижения уровня магнитных шумов и саморегулирования операционного режима в однородно намагниченных импедансных элементах – тонких проводах и пленках со спиральным типом магнитной анизотропии при импульсном возбуждении.

Эффект магнитного импеданса (МИ), чувствительность которого достигает 600 %/Э, является весьма перспективным для разработки высокочувствительных магнитных сенсоров. При этом для сенсорных приложений более предпочтительной является использование недиагональной конфигурации МИ в силу линейности его сигнала по отношению к внешнему магнитному полю. В данной работе исследуются два типа возбуждения: гармоническое с частотой 8 МГц и импульсное с продолжительностью импульса ~50 нс. В первом случае чувствительность значительно увеличивается при использовании дополнительного возбуждения постоянным током, который намагничивает провод в циркулярном направлении. При оптимальной конфигурации сенсорного элемента достигается чувствительность ~60 мВ/Э. Импульсное возбуждение не требует дополнительного подмагничивания, так как уже включает низкочастотные компоненты. Хотя чувствительность при импульсном возбуждении оказывается ниже, последнее является более перспективным для создания интеллектуальных датчиков.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-08-01319 «Миниатюрные магнитоимпедансные сенсоры для регистрации слабых магнитных полей с высоким пространственным разрешением»

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ОБРАЗОВАНИЕ ВСТРОЕННЫХ ЗОН В БЕРИЛЛИИ.

Папиров И.И.¹, Николаенко А.А.¹, Шокуров В.С.¹, Тузов Ю.В.²

¹Национальный Научный Центр “Харьковский физико-технический институт”,
Институт физики твердого тела, материаловедения и технологий, ул. Академи-
ческая, 1, 61108 г. Харьков, Украина

²Высокотехнологичный научно исследовательский институт неорганических
материалов им. академика А.А. Бочвара, г. Москва, Россия.

E-mail: nikoleanko@kipt.kharkov.ua

Целью данной работы является обобщение длительных исследований влияния условий деформации на образование встроенных зон (ВЗ), а также их морфологии, условий и механизмов образования. ВЗ - новая разновидность пластического течения, обнаруженная ранее авторами при изучении сверхпластической деформации (СПД) поликристаллического бериллия [1-2].

Хотя свидетельства существования некоторых характерных полос на поверхности образцов при высокотемпературной деформации появились еще в шестидесятые годы, долгое время было неясно, можно ли считать различные наблюдения, включая и наши, результатом идентичных процессов при СПД металлических материалов. Различные группы исследователей дали таким полосам разные названия (обедненные зоны, полосчатые зоны, деформационные зоны), а также по-разному описали механизм их образования и роста (диффузионный крип, диффузионный крип в комплексе либо со скольжением по границам зерен, либо с их миграцией, одновременное скольжение по границам в группе зерен и др.).

Методом прицельной электронно-микроскопической съемки панорам поверхности образцов после различных степеней сверхпластической деформации изучено образование новой разновидности пластического течения - встроенных зон. Образование встроенных зон может быть результатом модифицированного крипа Херринга-Набарро, особенностями которого являются короткие пути между источниками и стоками и ускоренная диффузия по дислокациям.

Методика стереосъемки на электронном микроскопе, примененная нами, позволила обнаружить исключительное разнообразие структур и деформационных рельефов на поверхности деформированных образцов, связанное, по-видимому, как с различным типом границ зерен, участвующих в деформации.

Литература:

1. В.С. Шокуров, И.И. Папиров, Л.А. Корниенко, А.А. Николаенко, Исследование новой разновидности пластического течения - образование встроенных зон, ФММ, (1980), 50, вып. 2, с. 397-405.
2. И.И. Папиров, А.А. Николаенко, В.С. Шокуров, В.А. Шкуропатенко, Электронно-микроскопическое исследование встроенных зон в бериллии, доклад на 49 международную конференцию «Актуальные проблемы прочности», 14-18 июня, 2010, г. Киев.

ИЗМЕНЕНИЕ МИКРОТВЕРДОСТИ КРИСТАЛЛОВ TGS И ZnO В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ И В СХЕМЕ ЭПР РАДИОДИАПАЗОНА

Петржик Е.А., Альшиц В.И., Иванова Е.С., Даринская Е.В.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия
petrzhik@ns.crys.ras.ru

В работе изучалось изменение дефектной структуры кристаллов под действием слабых магнитных полей. Исследовались кристаллы номинально чистого триглицинсульфата (TGS), выращенные в сегнетофазе методом снижения температуры, и ZnO, выращенные методом гидротермального синтеза. Детектором изменений в кристалле служила микротвердость, измеряемая до магнитной обработки, сразу после нее, через каждый час в течение первых 4-6 часов, а затем 1-3 раза в течение нескольких последующих суток. Использовались два типа магнитной обработки: постоянным магнитным полем (1-2) Тл; и скрещенными магнитными полями – полем Земли (49,9 мкТл) и перпендикулярным ему полем переменного тока (3,12 мкТл). Частота переменного поля варьировалась в интервале 1,37-1,41 МГц.

Было показано, что предварительная магнитная обработка обоих типов приводит к тому, что в ZnO микротвердость возрастает, а в TGS – убывает. В постоянном магнитном поле максимальное изменение достигается через 3 часа после выдержки и составляет ~ 10% для TGS и ~ 20% для ZnO. Далее наблюдается постепенный возврат микротвердости к исходному значению. При обработке скрещенными магнитными полями обнаружено резонансное изменение микротвердости – наибольшее изменение происходит при частоте поля накачки 1,39 МГц, которая отвечает условию ЭПР с g -фактором, близким к двум. При этом величины максимального изменения микротвердости и времена ее достижения близки к найденным в случае постоянного магнитного поля. После достаточной паузы (1-2 недели) эффекты полностью воспроизводятся в тех же условиях. Показано, что “магнитная память” обладает сильной анизотропией по отношению к взаимной ориентации кристаллов и магнитных полей. Эффект исчезает при совпадении оси симметрии кристалла с вектором магнитной индукции постоянного поля или поля Земли.

В сегнетоэлектрических кристаллах примеси играют существенную роль в образовании доменов и движении доменных границ, поэтому магнитная обработка может влиять не только на их механические, но и на электрические характеристики. Обнаружено увеличение значения диэлектрической проницаемости TGS в области фазового перехода после обработки кристаллов постоянным магнитным полем. Максимальное изменение (на 15-20%) достигается примерно через 2 часа после экспозиции (аналогично поведению микротвердости). Далее в течение 2-3 суток наблюдается ее постепенный возврат к первоначальному значению. Эффект полностью повторяется только после специального отжига (в отличие от микротвердости).

По-видимому, изменение свойств кристаллов происходит вследствие магнитоиндуцированного преобразования структуры примесных центров (благодаря спин-зависимым электронным переходам). Роль магнитного поля заключается не в силовом или энергетическом воздействии, а в иницировании нового пути релаксации. Эти релаксационные изменения происходят за диффузионные времена, что выглядит как задержка реакции материала на магнитное воздействие.

Работа частично поддержана Президиумом РАН (Программа № 24) и РФФИ (грант №13-02-00341).

ДЕФОРМАЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПРИ КОНТАКТНОМ НАГРУЖЕНИИ

Петржик М.И., Бычкова М.Я., Левашов Е.А.
НИТУ “МИСиС”, Москва, Россия, petrzhik@shs.misis.ru

Современные технологии позволяют управлять структурой, составом и свойствами материалов на микронном, субмикронном и нанометровом уровне и создавать направленно модифицированные «функциональные поверхности» (ФП) с повышенным сопротивлением деформации и разрушению.

Аттестация свойств таких поверхностей требует разработки специальных видов испытаний [1], которые были успешно внедрены в Испытательной Лаборатории Функциональных Поверхностей (ИЛФП) НИТУ «МИСиС», аккредитованной в ААЦ «АНАЛИТИКА» и «РОСНАНО». В рамках государственных контрактов 16.648.12.3020 и 16.513.11.30.92 были разработаны и аттестованы методики измерительного индентирования, царапания и скольжения, также государственные стандартные образцы модуля упругости и коэффициента трения.

В докладе рассмотрены методы изучения перспективных ФП в условиях скольжения, вдавливания и царапания при механическом контакте с контртелом более высокой твердости, которые основаны на модели Герца. Приведены и обсуждаются экспериментально определенные свойства наноструктурных сверхтвердых покрытий [2], литых микропроводов [3] и других нанокомпозитов [4], в том числе износостойких, содержащих квазикристаллы [1, 5], а также массивных металлических стекол и покрытий на их основе [6] и сплавов с памятью формы [7].

1. Петржик М.И., Левашов Е.А. Кристаллография, 52, (2007), №6, 1002.
2. Tam E., Petrzhik M., Shtansky D., Delplancke-Ogletree M.-P. J. Mat. Sci. Tech., 25, (2009), 63.
3. Замяткина Е.В., Петржик М.И. Деформация и разрушение материалов. М., 2010.-№7.-41.
4. Левашов Е.А., Петржик М.И., Тюрина (Бычкова) М.Я. и др.// Металлург.- М., 2010.-№9.-66.
5. Шайтура Д. С., Теплов А. А., Чикина Е. А. и др. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2010, № 11, 87.
6. Petrzhik M.I., Vakaev P.V., Chueva T.R. et al. J. Metastable and Nanocrystalline Mat., 24-25, (2005) 101.
7. E.A. Levashov, M.I. Petrzhik, D.V. Shtansky et al. Mat. Sci. Eng. A, 570 (2013) 51.

ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ БИОСОВМЕСТИМОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-Nb-Ta ПРИ ФОРМОВАНИИ И СПЕКАНИИ

М.И. Петржик, А.В. Касимцев*, Свиридова Т.А., Чернавин Н.В.
НИТУ “МИСис”, Москва, Россия, petrzhik@shs.misis.ru
*ОАО «Метсинтез», Тула, Россия

В настоящее время биосовместимые сплавы с эффектом псевдоупругости являются перспективными металлическими материалами для имплантологии. Более всего изучены сплавы на основе никелида титана TiNi. Однако канцерогенность никеля ограничивает медицинские применения, поэтому ведутся разработки безникелевых псевдоупругих сплавов, например, на основе твердых растворов титана. Сплавы Ti-Nb-(Ta,Zr) обладают эффектом памяти формы и псевдоупругостью, которые основаны на термоупругом мартенситном превращении α “(ромб.) \leftrightarrow β (ОЦК) [1-2] и являются био- и цитосовместимыми [3], поскольку как компоненты сплавов, так и их оксиды инертны в организме человека. Поэтому они перспективны для применения в хирургической ортопедии.

Однако высокая температура плавления Ta (2996 °С) и Nb (2468 °С) затрудняют технологию выплавки однородных слитков таких сплавов. Поэтому актуальной является разработка альтернативной технологии получения низко модульных изделий из гидридно-кальциевых порошков Ti-Nb-Ta методом порошковой металлургии. В ходе работы было изучено влияние давления прессования на структуру, свойства и деформационное поведение плотных спеченных образцов из гидридно-кальциевых порошков Ti-Nb-Ta, которые перспективны как биосовместимые материалы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-03-00273).

1. Петржик М.И и др. МиТОМ, 1992, №3 С.25-27.
2. Жукова Ю.С., Петржик М.И., Прокошкин С.Д. //Известия РАН. Металлы. 2010. №6. С. 77-84.
3. Brailovski V., et al // Mater. Sci. Eng. C. 2011. V. 31. P. 643-657.
4. Петржик М.И., Левашов Е.А. Кристаллография, 2007, Т.52, №6, 1002-1010.

ЭВОЛЮЦИЯ РАЗМЕРОВ ДОМЕНОВ ПРИ ПЕРЕКЛЮЧЕНИИ СОСТОЯНИЙ ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ДЕФЕКТАМИ

Петухов Б.В.

*Федеральное государственное учреждение науки Институт кристаллографии им.
А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия, petukhov@crys.ras.ru*

Кинетика распада метастабильных состояний в совершенных материалах успешно описывается известной статистической теорией Колмогорова–Джонсона–Мела. В предлагаемой работе эта теория обобщается с учетом влияния хаотически расположенных дефектов, создающих задержки для распространения границ новой фазы, применительно к одномерным системам. Рассчитывается случайно неоднородная в пространстве и времени картина (pattern) фазового превращения в зависимости от плотности препятствий и длительности создаваемых ими времен задержек. Модель также иллюстрируется результатами кинетического Монте Карло моделирования.

Теория применима к протяженным контактам больших интегральных схем, магнитным нанопроволокам, интеркапсулированным в углеродные нанотрубки квазиодномерным полупроводникам, биологическим макромолекулам и многим другим системам.

IN SITU РЕГИСТРАЦИЯ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ СДВИГЕ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ МЕТОДОМ НЕПРЕРЫВНОГО ИЗМЕРЕНИЯ КРУТЯЩЕГО МОМЕНТА

Печина Е.А.¹, Иванов С.М.¹, Юшкова Д.Р.², Дорофеев Г.А.¹, Ладьянов В.И.¹

¹⁾Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия, el_pechina@mail.ru

²⁾Ижевский государственный технический университет им.М.Т. Калашникова,
г. ИжевскРоссия

Метод непрерывной регистрации крутящего момента при ИПД кручением позволяет обнаружить образование и растворение фаз в сплавах непосредственно в процессе деформации [1]. Эволюция структуры оценивается из сравнения кривой «момент кручения (М) – число оборотов наковальни (n)», полученной для исследуемого материала, с эталонной для чистого металла. На кривой М(n) для чистых металлов можно выделить стадии пластического течения, тогда как для сплавов - характерные участки, обусловленные образованием и/или растворением фаз в ходе проведения ИПД кручением. Для достоверного описания стадийности пластической деформации и ее связи со структурно-фазовыми превращениями в сплавах с привлечением этого метода представляет интерес изучение влияния количества второй фазы и ее деформационного поведения на характер кривой момента кручения от числа оборотов.

С целью изучения влияния количества второй фазы на зависимости сопротивления деформации в работе проведены исследования образцов систем Al-Al₂O₃ и Cu-Zn в наковальнях Бриджмена при сдвиге под квазигидростатическим давлением. В качестве объектов с устойчивой к растворению второй фазой выбрана система Al-Al₂O₃. Для этого использованы компакты порошков алюминия марки ПА-1 с разной степенью дисперсности в диапазоне от 50 до 750 мкм, что позволило варьировать количество оксида алюминия в металлической матрице без дополнительного его введения. Для изучения объектов с растворимым компонентом и образующим ряд различных фаз использована система Cu-Zn с перитектическими превращениями. Для этого приготовлены компакты порошков меди и цинка, а также отливки α - и ($\alpha+\beta'$)-латуни. Деформация образцов проведена с непрерывной регистрацией момента кручения в наковальнях Бриджмена с наконечниками из стали ШХ15 по методике [2]. Микротвердость образцов измеряли на приборе ПМТ-3. Металлографические исследования проведены на микроскопе Neophot 21. Рентгеноструктурный и фазовый анализ проведен с использованием ДРОН-6. Анализ на содержание кислорода в компактах выполнен на анализаторе МЕТАВАК-АК.

Показано, что метод непрерывного измерения крутящего момента в процессе ИПДК в наковальнях Бриджмена позволяет успешно *in situ* определять стадии пластической деформации в материалах и с малой долей второй фазы. На примере компактов Al порошков с различной дисперсностью определена стадия максимального упрочнения и показана чувствительность метода к степени дисперсности порошков, наличию малого (0,1 - 1,2 мас.%) количества оксида алюминия. Для компактов Cu-Zn выявлено образование фаз из высококонцентрированной области равновесной диаграммы состояния. При деформации ($\alpha+\beta'$)-латуни с различным содержанием второй фазы метод позволил зарегистрировать стадию деформационно-индуцированного растворения β' -фазы.

[1] Печина Е.А., Иванов С.М., Ладьянов В.И., Чуков Д.И., Дорофеев Г.А., Кузьминых Е.В., Мокрушина М.И. // Деформация и разрушение материалов. 2013. №4. С.41-48.

[2] Иванов С.М., Печина Е.А., Ладьянов В.И., Дорофеев Г.А., Пилюгин В.П., Кузьминых Е.В. // Зав. лаборатория. Диагностика матер. 2013. Т.79, №7, ч.1. С.49-51.

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЛОКАЛИЗОВАННОГО ПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ В ГПУ - СПЛАВОВ ЦИРКОНИЯ

Полетика Т.М.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,
poletm@ispms.tsc.ru*

Представлены результаты изучения колебательной неустойчивости локализованного пластического течения, обнаруженного при растяжении ГПУ-сплавов циркония [1] и связанного с возникновением и развитием градиента скорости деформации в образце. Данное явление проявляется в дискретном уменьшении показателя деформационного упрочнения n после перехода к значениям $n < 0.5$, показывающего момент потери устойчивости пластического течения образца при формировании шейки. Нелинейная кинетика процесса проявляется в самосогласованном колебательном изменении локальных скоростей упрочнения и последующего разупрочнения в очаге деформации, как в поперечном, так и продольном направлениях [2].

Исследована взаимосвязь кинетики макролокализации пластического течения с эволюцией микроструктуры и микротекстуры в очаге деформации материала с привлечением методов рентгеноструктурного анализа, дифракции обратно рассеянных электронов, электронной микроскопии. Показано, что неустойчивость пластического течения связана с структурно-ориентационной неустойчивостью в очаге деформации и, независимо от дислокационного, сопровождается упрочнением, имеющим геометрическую природу, определяемую ориентацией плоскостей призматического скольжения относительно оси нагружения. Установлена взаимосвязь переменной активности легкого скольжения с цикличностью дислокационных превращений, сопровождающейся колебательным изменением плотности дислокаций и периодической релаксацией внутренних напряжений в результате локально протекающего низкотемпературного деформационного возврата по механизму коалесценции субзерен, которая возникает по достижении критической фрагментированной структуры как необходимый аккомодационный механизм мезоуровня деформации. Установлена взаимосвязь цикличности структурных перестроек с изменением скорости деформации в режиме «упрочнение-разупрочнение»: упрочнение обеспечивается накоплением дислокаций и формированием субструктуры, а разупрочнение - разрушением субграниц и перераспределением дислокаций с уменьшением их плотности.

Таким образом, корреляция структурных превращений на микро- и мезомасштабных уровнях с закономерностями макролокализации деформации обуславливает немонотонное деформационное поведение ГПУ- сплавов циркония. Причина связана с высокой пространственной неоднородностью пластического течения анизотропных материалов, обеспечивающей выход деформации на мезоуровень (уровень зерна) и макроуровень (раннее формирование шейки), а затем и потерю устойчивости деформации практически с самого начала нагружения. Высокая способность таких материалов к пластическому формоизменению достигается путем реализации локальных релаксационных процессов на микро- и мезомасштабных уровнях, обеспечивающих аккомодацию градиентов внутренних напряжений, например, динамического возврата путем атермической коалесценции.

1. Полетика Т. М., Нариманова Г. Н., Колосов С. В. // ЖТФ. 2006. Т. 76, вып. 3. С.44.
2. Полетика Т.М., Пшеничников А.П. // ЖТФ. 2009. Т. 79, вып.3. С. 54.

ВЛИЯНИЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В НИОБАТЕ ЛИТИЯ НА РАБОТУ ИНТЕГРАЛЬНО-ОПТИЧЕСКОГО МОДУЛЯТОРА ИНТЕНСИВНОСТИ

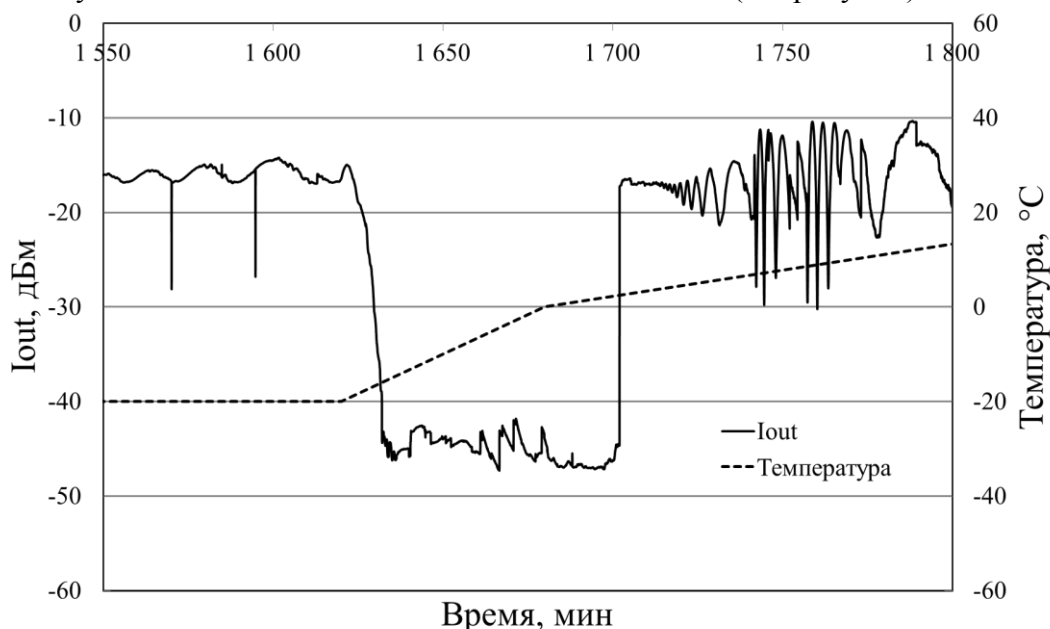
Пономарев Р.С.¹, Волынцев А.Б.¹, Вобликов Е.Д.²

¹Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия, rsponomarev@gmail.com

²Пермский национальный исследовательский политехнический университет

Было исследовано влияние пироэлектрического эффекта на работу интегрально-оптического амплитудного модулятора на базе интерферометра Маха-Цендера. Экспериментальные образцы представляли собой интегрально-оптические схемы на ниобате лития с волноводами, сформированными методом протонного обмена. В ходе эксперимента образцы термоциклировались в термокамере Espes MC-711 в диапазоне температур от -40 до +60 °С и при скорости изменения температуры до 6 °С/мин. В качестве источника излучения использовался лазер с длиной волны 1,55 мкм, оптическая мощность I_{out} записывалась при помощи экстинометра General Photonics ERM-102, соединенного с ПК. Источник и приемник излучения находились при проведении эксперимента вне термокамеры.

Было показано, что при нагревании образцов может происходить резкая деградация значения I_{out} , эквивалентная исчезновению волновода для данной длины волны с последующим восстановлением волноводных свойств (см. рисунок).



Указанное явление не наблюдалось для модуляторов с подавленным пироэлектрическим эффектом и для модуляторов с замкнутой системой электродов. Указанное явление было обнаружено на множестве образцов и только при их нагревании. При анализе экспериментальных данных не было обнаружено значения температуры исчезновения волновода, характерной для всех образцов.

Наблюдаемое явление с точки зрения интегральной оптики является выходом волновода из режима, в котором поддерживается распространение фундаментальной моды излучения и может быть связано с экранирующим действием заряженных дефектов, находящихся вблизи волновода. Исследование данного явления является актуальным с точки зрения стабильности интегрально-оптических устройств, применяемых как в системах передачи данных, так и в волоконно-оптических гироскопах.

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ И АНИЗОТРОПИИ ЭНЕРГИИ ДИСЛОКАЦИИ В АЛЮМИНИИ НА ТРАЕКТОРИИ ТЕПЛООВОГО ДВИЖЕНИЯ ВКЛЮЧЕНИЙ ЖИДКОГО СВИНЦА, СВЯЗАННЫХ С НЕЙ

Прокофьев С.И.¹, Йонсон Э.², Дамен У.³

1. *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, prokof@issp.ac.ru*

2. *Nano Science Center, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark*

3. *National Center for Electron Microscopy, LBNL, Berkeley, CA, USA*

С помощью *in-situ* просвечивающей электронной микроскопии при 485^oС исследовано тепловое движение четырех нано-включений жидкого Рb, связанных с закрепленной на концах дислокацией в сплаве Al – 0.65 ат. % Рb¹. Наблюдения записывались на видео. В результате их покадровой обработки были получены координаты точек проекции траекторий включений на плоскость изображения.

Анализ траекторий показал, что включения хаотически осциллируют вблизи линии дислокации. Как было показано ранее [2-4], это связано с отталкиванием включений друг от друга и от закрепленных концов дислокации, что обусловлено ее линейным натяжением. При этом оказалось, что средние положения включений на линии дислокации приблизительно эквидистантны.

Траектории теплового движения включений, усредненные по 1 нм или 2 нм интервалам вдоль дислокации, представляют собой приблизительно параллельные линии. Поскольку средние положения включений ассоциируются со средним положением линии дислокации, с которыми они связаны, то их усредненные траектории можно рассматривать как «визуализированные» части среднего положения линии дислокации, см. Рис. 1. Прямые точечные линии схематически

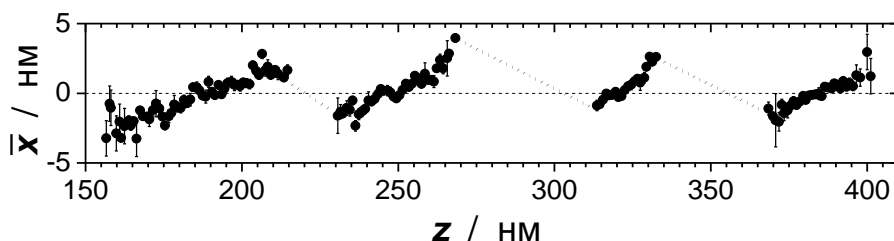


Рис. 1.

представляют на Рис. 1 ненаблюдаемые участки дислокации. Таким образом, проекция среднего положения дислокации на плоскость изображения имеет зигзагообразную форму.

Наблюдаемая зигзагообразная форма среднего положения дислокации качественно объясняется, как результат влияния анизотропии энергии дислокации на ее тепловые колебания в случае, когда с дислокацией связаны включения.

1. E. Johnson, S. Steenstrup, M. Levinsen, et al., *J. Mater. Sci.*, 40, (2005) 3115.
2. S. Prokofjev, V. Zhilin, E. Johnson, et al., *Def. Diff. Forum* 237-240 (2005) 1072.
3. E. Johnson, S. Prokofjev, V. Zhilin, U. Dahmen, *Z. Metallk.* 96 (2005) 1171.
4. S.I. Prokofjev, E. Johnson, V.M. Zhilin, U. Dahmen, *Adv. Sci. Technol.* 46 (2006) 98.

¹ Ранее эта система рассматривалась в [1], где были определены коэффициенты диффузии включений

ТЕПЛОВОЕ ДВИЖЕНИЕ ВКЛЮЧЕНИЙ ЖИДКОГО СВИНЦА, СВЯЗАННЫХ С ЗАКРЕПЛЕННЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ В АЛЮМИНИИ

Прокофьев С.И.¹, Йонсон Э.², Дамен У.³

1. *Институт физики твердого тела РАН, Черногловка, Россия, prokof@issp.ac.ru*
2. *Nano Science Center, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark*
3. *National Center for Electron Microscopy, LBNL, Berkeley, CA, USA*

С помощью *in-situ* просвечивающей электронной микроскопии исследовано тепловое движение включений жидкого Рб, связанных с закрепленными на концах дислокациями в сплавах на основе Al. Наблюдения записывались на видео. В результате их покадровой обработки были получены координаты точек траекторий включений.

Анализ траекторий показывает, что включения, связанные с закрепленными дислокациями, хаотически осциллируют вблизи их линии. Это связано с их отталкиванием друг от друга (когда их несколько) и от закрепленных концов дислокации, что обусловлено ее линейным натяжением [1-3].

Из экспериментальных данных получены эффективные потенциалы, в которых осциллируют включения, и эффективные потенциалы их взаимодействия. Взаимодействие включений, связанных с одной дислокацией, должно приводить к их коллективному коррелированному движению. Действительно, показано, что их тепловое движение характеризуется рядом корреляций.

1. S. Prokofjev, V. Zhilin, E. Johnson, et al., Def. Diff. Forum 237-240 (2005) 1072.
2. E. Johnson, S. Prokofjev, V. Zhilin, U. Dahmen, Z. Metallk. 96 (2005) 1171.
3. S.I. Prokofjev, E. Johnson, V.M. Zhilin, U. Dahmen, Adv. Sci. Technol. 46 (2006) 98.

**КРИСТАЛЛОФИЗИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ТЕРМОУПРУГИХ
МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ С ТЕРМИЧЕСКИ-,
ДЕФОРМАЦИОННО- И МАГНИТНОУПРАВЛЯЕМЫМИ ЭФФЕКТАМИ
ПАМЯТИ ФОРМЫ**

**Пушин В.Г., Белослудцева Е.С., Куранова Н.Н.,
Марченкова Е.Б., Пушин А.В., Уксусников А.Н.**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового
Красного Знамени Институт физики металлов Уральского отделения Российской
академии наук, Екатеринбург, Россия
pushin@imp.uran.ru*

Разработка перспективных конструкционных и функциональных материалов нового поколения и новых прорывных технологий их создания с заданными физическими, механическими, химическими и эксплуатационными характеристиками является одной из важнейших приоритетных проблем современного материаловедения. В данной работе выполнены исследования сплавов на основе систем В2-TiNiMe и L2₁-Ni₂MnGa с термоупругими мартенситными превращениями (ТМП), которые объединяют целый ряд необычных эффектов: однократно и многократно обратимые ЭПФ, осуществляющиеся при изменении температуры, давления, магнитного поля, эффекты сверхупругости и высокой обратимой деформации превращения под нагрузкой (при прямом превращении) или ее снятии (при обратном превращении). Были использованы структурные методы рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии высокого разрешения, исследований текстуры и элементного состава, а также измерения ряда физических свойств. Установлено и систематизировано влияние легирования и внешних воздействий на магнитные и структурные фазовые превращения и свойства данных сплавов с магнитно-, термо- и механоуправляемой памятью формы. Определены структура, последовательность ТМП с образованием различных мартенситных фаз и кристаллогеометрические особенности их образования. Построены фазовые диаграммы магнитных и мартенситных превращений в ряде сплавов, бинарных, тройных, четырехкомпонентных, синтезированных по разным схемам легирования. Впервые исследовано влияние сверхбыстрой закалки на внутреннюю структуру и измельчение зерна сплавов. Обнаружено деформационно индуцированное атомное разупорядочение в сплавах Гейслера с образованием нанокристаллической ГЦК(A1)-структуры и последующее восстановление дальнего порядка по типу L2₁ при низкотемпературном отжиге. В бинарных и легированных сплавах TiNi показано, что использование механотермических обработок путем многократных кручения под высоким давлением, прокатки или волочения приводит к сильному упрочнению и измельчению зерна (вплоть до аморфизации). В таком случае применение низкотемпературного отжига позволяет создать в сплавах однородное наноструктурное состояние с контролируемым размером зерна уже в интервале 50-200 нм и обеспечить эффективное регулирование физико-механическими свойствами. Установлено, что нано- и субмикроструктурные сплавы испытывают практически те же мартенситные превращения, что и крупнозернистые прототипы. При этом могут быть реализованы полипакетные, монопакетные двойникованные или монокристаллические структуры мартенсита в зависимости от размера зерен. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проектами РФФИ 11-02-00021, 13-02-96012, Президиума РАН 12-П-2-1060 и УрО РАН офи 12-2-2-005-Арктика.

Проявление случайных деформаций кристаллической решетки в оптических спектрах высокого разрешения

Пыталев Д.С.

Институт спектроскопии РАН, Москва, Троицк

Как известно, несовершенство кристаллической решетки кристаллов приводит к неоднородному уширению спектральных линий редкоземельных (РЗ) ионов. Одним из механизмов уширения являются случайные деформации кристаллической решетки. В то время как полносимметричные компоненты кристаллического поля приводят к сдвигу и уширению спектральных линий, наличие низкосимметричных компонент может привести к расщеплению вырожденных штарковских уровней и снятию запрета на электродипольные переходы внутри РЗ ионов (для кристаллов с центром инверсии). Учет подобных механизмов уширения важен, в частности, при оценке качества кристаллов для квантовой памяти.

В данной работе представлены результаты исследований проявлений случайных деформаций в оптических спектрах различных монокристаллов. Приводятся конкретные примеры экспериментально наблюдаемых форм линии в оптических спектрах примесных центров различной симметрии: монокристаллы со структурой шеелита $\text{LiYF}_4:\text{Tm}^{3+}$, циркона $\text{YPO}_4:\text{Tm}^{3+}$, а также кубические эльпасолиты Cs_2NaYF_6 и $\text{Cs}_2\text{NaScF}_6$ легированные Yb^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+} или Sm^{3+} .

Для теоретического описания было получено явное выражение для обобщенной функции распределения локальных напряжений, вызванных случайными точечными дефектами в упругом континууме. Наблюдаемые спектральные профили были воспроизведены построенной моделью, которая включает в себя только два подгоночных параметра: ширину распределения деформаций γ и ширину линий Δ отдельных одноионных переходов. Значения этих параметров были найдены из сравнения рассчитанных и измеренных форм линий.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-02-31284).

СЛОЖНОСТИ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОГО АНАЛИЗА ГЕТЕРОФАЗНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Л.А. Пьянкова, Ю.О. Пунин, А.Г. Штукенберг, А.А. Комиссаров
ЗАО «Научные приборы», СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия, lyuba@pyankova.ru

Кристаллы $\text{NH}_4\text{Cl}:\text{Me}^{2+}$ являются сложными композитами, состоящими из блоков материнской фазы и синтаксических вростков трех типов примесей [1], а из-за разложения исследуемого вещества сложно объективно подтвердить критерий оценки истинности рассчитанной величины физического уширения β , среднего размера блока D и областей когерентного рассеяния (ОКР). Правильность используемой методики определения ОКР методом рентгенографии можно подтвердить лишь косвенными методами - атомно-силовой микроскопией [2], и сравнением данных с результатами других исследователей.

Дифракционным методом было исследовано 25 гетерофазных кристаллов $\text{NH}_4\text{Cl}:\text{Me}^{2+}$ на рентгеновском дифрактометре ДИФРЕЙ (ЗАО «Научные приборы») с помощью программного комплекса Diffract. По результатам рентгеноструктурного анализа на основании анализа уширений дифракционных профилей был проведен расчет среднего размера областей когерентного рассеяния (ОКР) $D_{\text{рент}}$ по логарифмически-нормальному закону (который однако не учитывает морфологию кристаллитов) и по формулам Селякова-Шеррера.

Оценка размеров вростков примесей по полуширинам дифракционных максимумов показала, что размеры микроблоков в кристаллах хлорида аммония без примесей соответствуют $\sim 15000 \text{ \AA}$ ($1.5 \cdot 10^{-6} \text{ м}$), а в кристаллах с примесью марганца близки и равны $300 - 2000 \text{ \AA}$. Данная оценка размерности структурных единиц хорошо согласуется с данными АСМ [2]. При общем увеличении дефектности с возрастанием концентрации примесей в кристаллах закономерная связь этих характеристик совершенно отсутствует при расчете размеров ОКР по стандартной формуле Селякова-Шеррера, и имеет четкий тренд при расчете по логарифмически-нормальному закону с описанием уширения физических профилей функциями Фойгта, являющимися свертками функций Коши и Гаусса. Несмотря на интенсивное развитие макродефектности (трещинообразование, двойникование, расщепление), которое должно «смазывать» любые возможные закономерности образования микродефектов, увеличение содержания примеси в кристаллах приводит к уменьшению размеров как ОКР, так и самих монокристаллов. Кроме того, увеличение примеси в кристаллах $\text{NH}_4\text{Cl}:\text{Mn}$ приводит к увеличению числа микроблоков и закономерному увеличению угла разориентации микроблоков в кристаллах.

Таким образом, показано, что для гетерофазных кристаллов (кристаллов с аномальным изоморфизмом) характерны те же закономерности что и для изоморфных кристаллов, т.е. физические свойства макроуровня имеют место быть и на микроуровне.

[1] Pyankova L. A., Shtukenberg A. G., Punin Y. O. Anomalous isomorphism and mixed crystals in the systems $\text{NH}_4\text{Cl}:(\text{Cu},\text{Mn})$ // J. Crystal Growth & Design, 2012, 12, p.5283–5291

[2] Пьянкова Л.А., Бочаров С.Н., Штукенберг А.Г., Пунин Ю.О., Бахвалов А.С., Франке В. Д. Комплексное исследование распределения синтаксических вростков в гетерофазных кристаллах $\text{NH}_4\text{Cl}:(\text{Mn}^{2+},\text{Cu}^{2+})$ // Вестник СПбГУ. Сер. 7, вып.1, 2011, с.45-54

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРОЕНИЯ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР НА ИХ СВОЙСТВА НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

О.И. Рабинович, А.Р. Кушков

ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 119049, Москва, Ленинский пр-т, 4

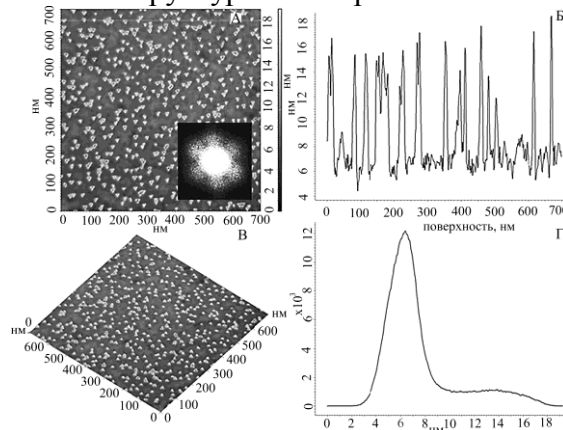
rawork2008@mail.ru

Исследовано влияние условий процесса выращивания на характер распределения островков пленки на основе PbSe по размерам.

Самоорганизованные квантово-размерные точки (КТ) на основе селенида свинца имеют перспективу практического использования для высокоэффективных светоизлучающих диодов, лазеров, работающих в ИК-диапазоне. Физико-химические процессы, лежащие в основе получения и управления процессами роста КОС на основе полупроводниковых соединений, образующихся в системах с легколетучим компонентом, посредством инконгруэнтного испарения пленочной структуры заданного состава в области первичной кристаллизации промежуточной фазы инконгруэнтного испарения отличаются технологией создания концентрационного насыщения раствора - расплава в зоне роста. Здесь концентрационное насыщение создается в изотермических условиях, посредством контролируемого испарения легколетучего компонента из объема жидкой пленки заданного состава, приводящего к смещению фазовых равновесий в области первичной кристаллизации соединения. При этом рост островковой фазы происходит в соответствии с фазовыми равновесиями, протекающими в системе, где формируется промежуточная фаза.

Целью настоящей работы явилось установление возможности роста и исследования свойств КОС пленок на основе селенида свинца методом инконгруэнтного испарения пленок состава $Pb_{1-x}Se_x$.

Структурные исследования выращенных островковых материалов проводились методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на приборе Solver Pro EC. Анализ АСМ изображений с целью выявления особенностей в распределении островков по характеристическим размерам (высота, диаметр) проводился с применением программ обработки АСМ-изображений, входящих в состав математического обеспечения «Nova». На рисунке приведены типичные для всех образцов АСМ-изображения поверхности экспериментальных структур I и II партий.



Как видно из АСМ-изображений поверхности, подложки покрыты образованиями островкового типа. Установлено, что рост и распределение островков носит ориентированный характер. Островки имеют вид трехгранных пирамид, причем пространственно ориентированных по отношению друг другу.

ПОЛУЧЕНИЕ И СТРУКТУРА ТОНКИХ ПЛЕНОК КОМПОЗИТОВ GaSb-FeGa_{1,3} и InSb-MnSb

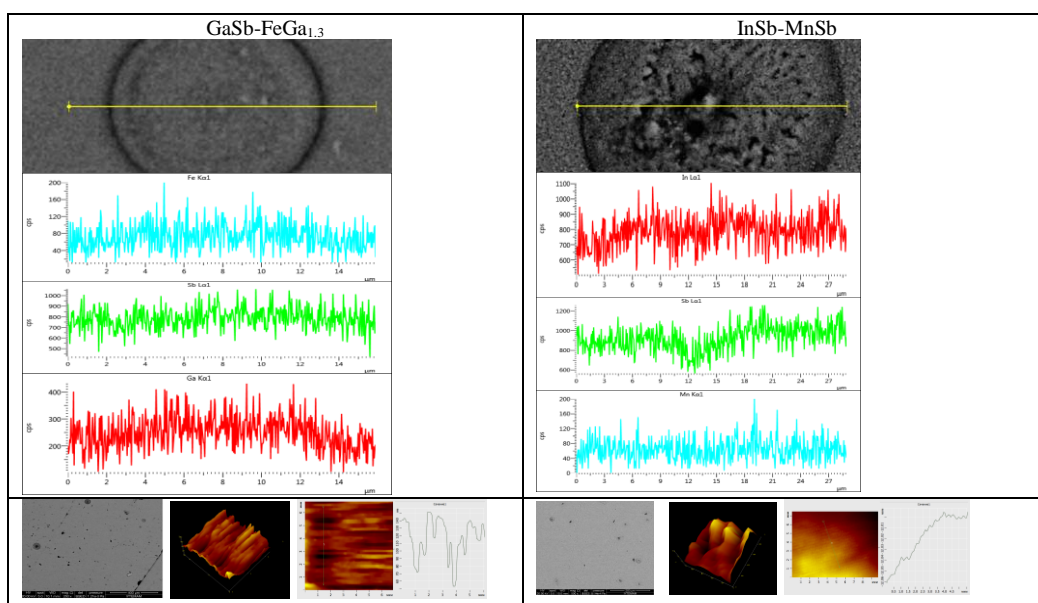
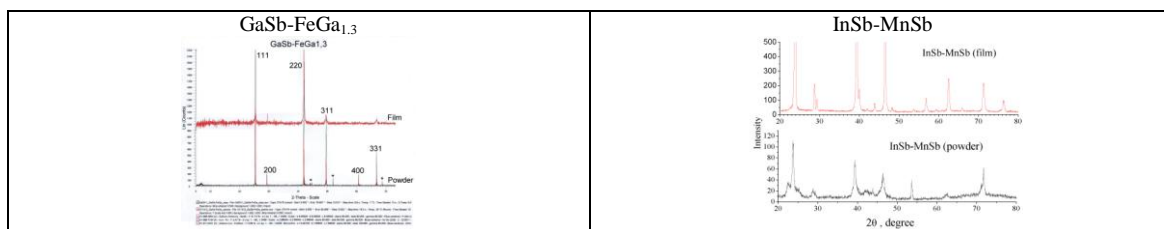
Р.Н. Рагимов¹, И.Х.Мамедов², Д.Г.Араслы¹, А.А. Халилова¹, М.И. Алиев¹
К.И.Янушкевич³, А.В.Галяс³

¹Институт Физики НАН Азербайджана;

²Национальная Академия Авиации Азербайджана;

³ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»

Тонкие пленки композитов GaSb-FeGa_{1,3} и InSb-MnSb получены в два этапа: массивные образцы получены методом Бриджмена со скоростью передвижения фронта кристаллизации 1мм/мин, затем методом мгновенного испарения (flash evaporation method) получены их тонкие пленки толщиной 0.4÷1.0 μm. На дифрактометре «Advance 8D» с CuK_α-излучением проведен рентгенофазовый анализ, установлена двухфазность системы и ее кристалличность. В дифрактограммах массивных образцов и пленок интенсивные линии соответствовали линиям GaSb и InSb, а слабые - Fe₃Ga₄ и MnSb. Сканирующим микроскопом «FEI Quanta FEG» проведен микроструктурный анализ и выявлено скопление металлических включений FeGa_{1,3} и MnSb в виде кружочков размерами 5÷30μm и 3÷25μm, соответственно. Определен элементный состав композитов спектрометром "EDS system - Oxford Inca X-act". Установлено, что атомы Fe и Mn локализуются, в основном, в включениях. По данным исследований на атомно-силовом микроскопе NC-AFM рельефы тонких пленок композитов GaSb-FeGa_{1,3} и InSb-MnSb меняются в пределах 30÷80нм и 10÷40нм, соответственно.



СТРУКТУРА ИЗНОСОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ, НАПЛАВЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОДУГОВЫМ МЕТОДОМ

Райков С.В., Ващук Е.С., Кобзарева Т.Ю., Будовских Е.А., Громов В.Е.
ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный индустриальный университет», г.
Новокузнецк, Россия, vaschuk@bk.ru

Увеличение срока службы конструкционных материалов обеспечивается путем нанесения покрытий, обладающих высоким уровнем требуемых свойств. Одним из простых и эффективных процессов восстановления поврежденных и изношенных деталей является электродуговая наплавка порошковой проволокой. За счет содержащихся в порошковой проволоке добавок легирующих элементов обеспечивается надежная защита расплавленного металла от воздействия воздуха и высокие механические свойства покрытий. Целью настоящей работы явилось изучение структуры износостойких покрытий, наплавленных электродуговым методом на мартенситную сталь, которая используется в качестве износостойкого материала, подвергающегося абразивному износу в условиях ударных нагрузок.

Наплавку осуществляли порошковыми проволоками – EnDOtec DO*30 (проволока 1), EnDOtec DO*33 (проволока 2) и SK A 70-G (проволока 3) диаметром 1,6 мм. Наплавку проводили в среде защитного газа состава Ar 82 %, CO₂ 18 % при сварочном токе 250...300 А и напряжением на дуге 30...35 В. В качестве материала исследования применяли сталь Hardox 400.

Световая микроскопия поперечных шлифов покрытий показала, что толщина наплавленных слоев достигает 5,0...5,5 мм. По глубине покрытий выделяются 4 слоя, которые отличаются друг от друга контрастом травления, – поверхностный 1, приповерхностный 2, промежуточный 3 и тонкую прослойку 4 на границе с основой. Их толщина составляет 3,5...4,0, 0,25...0,40, 0,25 и 0,01 мм соответственно. В зоне термического влияния, располагающейся ниже покрытия, также выделяется тонкий слой 5 толщиной 0,04 мм. Общая толщина зоны термического влияния составляет 4 мм. В структуре слоя 1 выделяются дендриты с осями второго порядка. Среднее значение расстояния между ними составляет 3 мкм. Расстояние между осями дендритов первого порядка составляет 20 мкм. Между ними наблюдаются кристаллические включения размерами от 2 до 16 мкм. Исходя из спецификации наплавленной проволоки, можно считать, что кристаллические включения являются карбидами или боридами железа и ниобия. В слое 1 выявляются продольные и поперечные трещины, что говорит о его хрупкости, обусловленной наличием карбидов и боридов. Микротвердость включений составляет 1500 HV. Слой 1 плавно переходит в слой 2, который характеризуется скоплением включений боридов и карбидов, характерные размеры которых достигают 6 мкм. В слое 2 формируется мелкодисперсная структура с размерами зерен около 3 мкм. В слое 3, имеющем мелкодисперсную структуру, выделяются дендриты с осями второго порядка, среднее расстояние между которыми составляет 5 мкм. Расстояние между осями дендритов первого порядка составляет 15...50 мкм. В слоях 2 и 3 также наблюдаются включения карбидов и боридов. В слое 3 карбиды и бориды располагаются между осями дендритов второго порядка. Отношение плотностей распределения карбидов и боридов в слоях 1–3 равно 1:3:7 соответственно, что говорит об увеличении плотности распределения боридов и карбидов железа и ниобия по глубине. Зона термического влияния имеет закалочную структуру с кристаллами мартенсита пакетного и пластинчатого типа и характеризуется наличием пористости.

Работа выполнена при госзадании Минобрнауки № 2.4807.2011.

ИЗНОСОСТОЙКИЕ ПОКРЫТИЯ СИСТЕМЫ TiC-Mo, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОГО НАПЫЛЕНИЯ

Д.А. Романов, О.В. Олесюк, Гагарин А.Ю., Будовских Е.А., Громов В.Е.
Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия
romanov_da@physics.sibsiu.ru

Композиционные покрытия системы TiC-Mo обладают высокой износостойкостью и микротвердостью. Формирование таких покрытий в настоящее время реализовано методом плазменного напыления в воздушной среде и в вакууме. Они используются в машиностроении для защиты деталей, испытывающих повышенные нагрузки при работе в агрессивных средах и высоких температурах, в частности, в поршневых системах автомобильных двигателей внутреннего сгорания. Однако структура таких покрытий имеет ряд недостатков, таких как пористость, которая ухудшает их теплопроводность, и низкая адгезия.

Цель настоящей работы заключалась в создании методом электровзрывного напыления (ЭВН) композиционных покрытий системы TiC-Mo, изучении топографии их поверхности и структуры.

Сканирующая электронная микроскопия показала, что поверхность покрытий сформирована многочисленными неравномерно распределенными деформированными микрокаплями диаметрами от 1 до 50 мкм, осевшими на ней из тыла струи. Рентгеноспектральный микроанализ различных участков покрытия показал, что область набора рентгеновского, выбранная на включении размером 8 мкм образована титаном. Область спектра, выбранная на участке покрытия без включений, – молибденом, спектров, выбранных на участках покрытия, образованными матрицей и включениями – молибденом и титаном в различном соотношении. На основании этих данных можно утверждать, что покрытие обладает композиционной наполненной структурой, представляющей собой молибденовую матрицу с расположенными в ней упрочняющими включениями карбида титана. Микрокапли образованы молибденом и частицами порошка карбида титана. Микротрещины на поверхности покрытия образуются вследствие высокоскоростной кристаллизации покрытия. Оптическая интерферометрия показала, что среднее арифметическое отклонение профиля $Ra = 3.0$ мкм. Полученные значения параметров шероховатости обусловлены тем, что покрытия были получены при электровзрывной обработке, для которой характерно осаждение на поверхность преимущественно жидких частиц продуктов взрыва из тыла струи с последующей самозакалкой. Согласно данным РЭМ поперечных сечений покрытий их толщина составляет 55–70 мкм. На границе покрытия с основой вследствие термосилового воздействия плазменной струи на поверхность, нагреваемую до температуры плавления, формируется рельеф, который позволяет увеличивать адгезию.

Впервые электровзрывным способом получены покрытия из молибдена и карбида титана, параметр шероховатости которых Ra изменяется в пределах 3.0 мкм. Морфология поверхности покрытий представлена композиционными микрокапли TiC-Mo диаметрами от 1 до 50 мкм. Толщина покрытий составляет 55–70 мкм. На границе покрытия с основой формируется рельеф. Покрытие обладает композиционной наполненной структурой, представляющей собой молибденовую матрицу с расположенными в ней упрочняющими включениями карбида титана, причем соотношение матрицы и упрочняющих включений составляет 2:1, 1.5:1, 1:1.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки №2.4807.2011

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОГО СОВЕРШЕНСТВА,
ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ
ГРУППЫ ЛАНТАНГАЛЛИЕВОГО СИЛИКАТА**

Рошупкин Д.В., Иржак Д.В., Плотицына О.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем
технологии микроэлектроники и особых чистых материалов Российской академии
наук, Черноголовка, Россия, rochtch@iptm.ru*

Развитие современной акустоэлектроники требует применения новых перспективных пьезоэлектрических кристаллов с высокими значениями пьезоэлектрических констант и хорошими термическими свойствами. Большие перспективы связаны с применением кристаллов группы лантангаллиевого силиката, которые активно исследуются в последнее десятилетие. Кристаллы группы лантангаллиевого силиката, как и кристалл пьезокварца SiO_2 , обладают пространственной группой симметрии 32. Кристаллы данной группы обладают хорошими термическими свойствами. Следует отметить, что коэффициенты электромеханической связи данных кристаллов уступают кристаллу LiNbO_3 , но превосходит соответствующее значение для кристалла кварца. Интерес к кристаллам группы лантангаллиевого силиката также связан с небольшими скоростями распространения акустических волн, что позволяет создавать миниатюрные акустоэлектронные устройства, и отсутствием фазовых переходов вплоть до температуры плавления, что позволяет использовать кристаллы при экстремально высоких температурах.

В настоящем докладе представлены результаты исследования пьезоэлектрических и акустических свойств неупорядоченных ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.3}\text{Al}_{0.2}\text{O}_{14}$) и упорядоченных ($\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$) кристаллов семейства лангасита. Для исследования кристаллов были использованы методы рентгеновской топографии и дифрактометрии на лабораторных и синхротронных источниках рентгеновского излучения.

Для измерения независимых пьезоэлектрических модулей в кристаллах семейства лангасита был использован метод высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии, основанный на измерении изменения межплоскостных расстояний в условиях обратного пьезоэлектрического эффекта при приложении к кристаллам внешнего электрического поля.

Для измерения скоростей и углов сноса потока энергии поверхностных акустических волн в кристаллах были использованы методы рентгеновской топографии и дифрактометрии. Так метод рентгеновской топографии в условиях эффекта Тальбота на источниках синхротронного излучения 3-го поколения позволяет визуализировать акустические волновые поля в кристаллах в режиме реального времени. Метод рентгеновской дифрактометрии в условиях брэгговской дифракции на основе анализа дифракционных спектров был использован для исследования как поверхностных, так и псевдоповерхностных акустических волн. Показано, что поверхностные и псевдоповерхностные акустические волны обладают не только разными скоростями акустических волн, но и разными по величине и знаку углами сноса потока акустической энергии.

Для изучения температурных зависимостей акустических и пьезоэлектрических свойств также были использованы методы высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии на основе анализа дифракционных спектров в температурном диапазоне $20\div 600^\circ\text{C}$.

ФОРМИРОВАНИЕ ВЫСОКОПРОЧНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ОСНОВЕ КОМБИНИРОВАННЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СТАЛЯХ.

Русаненко В.В., Филиппова В.П., Блинова Е.Н., Макушев С.Ю.

*Институт металловедения и физики металлов
ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», 105005 г. Москва, ул. 2-я Бауманская 9/23,
Россия, E-mail: v.v.-rusanenko@mail.ru*

Исследована взаимосвязь формирования наноструктурных состояний и физико-механических свойств высокопрочных мартенситно-стареющих сталей на основе систем железо-никель-титан, железо-никель-алюминий и железо-никель-ванадий после различных способов обработки. Установлено, что после закалки, термоциклической обработки, холодной деформации и старения мартенсита изученных МС сталей происходит уменьшение размеров кристаллов мартенсита, выделение интерметаллидов и образование наноструктурного состояния, которое включает мартенситные нанокристаллы размером около 100 нм и частицы упрочняющих интерметаллидных нанофаз. В стали Н18М2Т2 выделяются дисперсные частицы интерметаллида Ni_3Ti размером 5-10 нм, в стали Н18М2Ю1 образуется интерметаллидная нанофаза $NiAl$ размером 10-20 нм. Упрочнение в стали Н15К10М5Ф5 связано с образованием частиц интерметаллидов двух типов: Fe_2Mo и Ni_3V , размер которых составляет 10-20 нм 15-30 нм соответственно. Образование в структуре МС сталей дисперсных частиц интерметаллидов приводит к нанофазному упрочнению. Вышеназванные наноструктурные изменения, обусловленные протеканием комбинированных мартенситных бездиффузионных и диффузионных фазовых превращений, оказывают существенное влияние на характеристики МС сталей. Формирование высокопрочных наноструктурных состояний обеспечивает создание многофункциональных сталей, обладающих свойствами конструкционных, стойких к циклическим нагрузкам, магнитно-твердых и магнитно-полутвердых материалов. На мартенситно-стареющих сталях Н18М2Т2, Н18М2Ю1 и Н15К10М5Ф5 в результате формирования наноструктурного состояния и нанофазного упрочнения достигается сочетание высоких механических и магнитных свойств (предел прочности 2100-2400 МПа, намагниченность насыщения 1,2-1,9 Тл, регулируемая коэрцитивная сила 1,5-17,0 кА/м) и высокой стойкости к малоцикловой усталости. Исследованные мартенситно-стареющие стали могут найти применение в качестве высокопрочных многофункциональных материалов для изготовления различных деталей и конструкций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-02-00506)

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ОПТИКО-ЛЮМИНИСЦЕНТНЫЕ ПАРАМЕТРЫ КРИСТАЛЛОВ ZnSe И ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Рыбалка И.А., Галкин С.Н., Лалаянц А.И.

Институт сцинтилляционных материалов НАН Украины, Харьков, Украина

e-mail: iren@isma.kharkov.ua

Работа посвящена изучению условий формирования структурных дефектов, а также выявлению взаимосвязи процессов дефектообразования с механическими, оптическими и сцинтилляционными свойствами кристаллов ZnSe и твердых растворов на их основе ZnSe-ZnTe.

В работе проведено комплексное исследование дефектов структуры и структурно-чувствительных характеристик кристаллов ZnSe и $ZnSe_{1-x}Te_x$ ($x = 0 \div 0,015$), выращенных из расплава. В настоящее время эти материалы нашли широкое применение в качестве сцинтилляционных детекторов ионизирующих излучений и используются в производстве рентгеновской аппаратуры рядом ведущих зарубежных фирм.

Изучено влияние легирования ZnSe изовалентной примесью теллура на структурное совершенство, электрические свойства и сцинтилляционные параметры кристаллов. Установлено, что в кристалле $ZnSe_{1-x}Te_x$ в диапазоне концентраций легирующей примеси теллура $x = 0,003 \dots 0,007$ стабилизируется решетка сфалерита, а величина светового выхода достигает максимального значения, что свидетельствует о корреляционной связи степени структурного совершенства и сцинтилляционной эффективности.

Изучены механические свойства кристаллов твердых растворов $ZnSe_{1-x}Te_x$ ($x = 0 \div 0,015$) с помощью метода индентирования в двух его вариантах: вдавливание и царапание. Показано, что при изменении содержания теллура в твердом растворе ZnSe-ZnTe в пределах $x = 0,002 \div 0,015$ величина микротвердости в кристалле линейно увеличивается на 23 %. Данный факт можно объяснить локальными искажениями кристаллической решетки ZnSe атомами теллура и связанным с этим снижением подвижности дислокаций, что приводит к повышению прочности материала. Изучена реальная структура кристаллов путем исследования уровня напряжений и анизотропии механических характеристик. Установлено, что распределение напряжений обладает осевой симметрией, которая нарушается в случае смещения теплового поля в кристаллизационном аппарате, а пластическая деформация приобретает преимущественное направление.

Изучено влияние термической обработки исследуемых кристаллов в инертной атмосфере. Показано, что термообработка приводит к уменьшению уровня термоупругих напряжений и выравниванию радиального поля напряжений в кристалле, а также повышает предел его прочности, что является важным для выбора режимов механической обработки данного материала и уровня вибростойкости сцинтилляционных детекторов.

В ходе исследований определены оптимальные режимы термической обработки кристаллов ZnSe, что при условии легирования примесью теллура в установленном концентрационном диапазоне обеспечило получение сцинтилляторов с высоким уровнем структурного совершенства (сфалерит без дефектов упаковки), удовлетворительной механической прочностью (увеличение предела прочности на 20 % по сравнению с ZnSe) и заданной сцинтилляционной эффективностью (60 000 фотон/МэВ).

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ИТТРИЕМ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ Er^{3+} , Tm^{3+} , Ho^{3+} , И ИК-ЛАЗЕРЫ НА ИХ ОСНОВЕ.

Рябочкина П.А.¹, Ломонова Е.Е.², Малов А.В.¹, Сидорова Н.В.¹, Ушаков С.Н.²,
Чабушкин А.Н.²

1-ФГБОУ ВПО Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Россия, г. Саранск

2-Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Россия, г. Москва

Кристаллы с разупорядоченной кристаллической структурой, активированные редкоземельными (РЗ) ионами, привлекают интерес исследователей, занимающихся поиском новых активных сред для создания лазеров, перестраиваемых по частоте излучения лазерной генерации.

Кристаллы стабилизированного иттрием диоксида циркония, активированные РЗ-ионами, характеризуются разупорядоченной кристаллической структурой, вследствие чего полосы поглощения и люминесценции в этих кристаллах, обусловленные внутрицентровыми межмультиплетными f-f переходами РЗ-ионов, значительным образом неоднородно уширены. Этот факт обуславливает интерес к исследованию спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик этих кристаллов для создания на их основе твердотельных лазеров, перестраиваемых по частоте, а также генерирующих короткие импульсы лазерного излучения.

В настоящей работе выполнены исследования спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик кристаллов стабилизированного иттрием диоксида циркония, активированных ионами Er^{3+} , Tm^{3+} , Ho^{3+} .

Для кристаллов ZrO_2 -12мол.% Y_2O_3 -2мол.% Tm_2O_3 при $T=300\text{K}$ зарегистрированы спектры поглощения с основного состояния $^3\text{H}_6$ на возбужденные мультиплеты $^1\text{G}_4$, $^3\text{F}_2$, $^3\text{F}_3$, $^3\text{H}_4$, $^3\text{H}_5$, $^3\text{F}_4$ ионов Tm^{3+} . Для данных кристаллов получен спектр люминесценции лазерного перехода $^3\text{F}_4 \rightarrow ^3\text{H}_6$ ионов Tm^{3+} при возбуждении на уровень $^3\text{H}_4$ этих ионов. Сделана оценка эффективности процесса кросс-релаксации ($^3\text{H}_4 \rightarrow ^3\text{F}_4$, $^3\text{H}_6 \rightarrow ^3\text{F}_4$) ионов Tm^{3+} в кристаллах ZrO_2 -12мол.% Y_2O_3 -2мол.% Tm_2O_3 , которая превышает 90%.

Впервые получена лазерная генерация ($\lambda_{\text{ген}}=2046$ нм) на переходе $^3\text{F}_4 \rightarrow ^3\text{H}_6$ ионов Tm^{3+} на кристаллах ZrO_2 -12мол.% Y_2O_3 -2мол.% Tm_2O_3 в условиях лазерной диодной накачки.

Для кристалла ZrO_2 -13,6мол.% Y_2O_3 -0,4мол.% Ho_2O_3 впервые получена лазерная генерация на переходе $^5\text{I}_7 \rightarrow ^5\text{I}_8$ ионов Ho^{3+} на кристалле ZrO_2 -13,6мол.% Y_2O_3 -0,4мол.% Ho_2O_3 в условиях накачки лазером на кристалле $\text{YLiF}_4:\text{Tm}$ с длиной волны излучения 1,905 мкм. Длина волны генерации лазера на кристалле ZrO_2 -13,6мол.% Y_2O_3 -0,4мол.% Ho_2O_3 составила 2,17 мкм.

Используя спектральные зависимости сечения поглощения $\sigma_a(\lambda)$ и люминесценции $\sigma_e(\lambda)$ для переходов $^4\text{I}_{13/2} \leftrightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ионов Er^{3+} в кристаллах ZrO_2 -6мол.% Y_2O_3 -5,85мол.% Er_2O_3 , получена спектральная зависимость сечения усиления $\sigma_g(\lambda)$ предполагаемого лазерного перехода $^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ионов Er^{3+} для различных значений параметра относительной инверсной населенности. Из данной зависимости установлено, что область усиления для кристалла ZrO_2 -6мол.% Y_2O_3 -5,85мол.% Er_2O_3 соответствует спектральному интервалу 1610–1720 нм.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОКЛАСТЕРОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Самсонов В.М., Бембель А.Г., Васильев С.А.

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

samsonoff@inbox.ru

В [1, 2] представлены результаты молекулярно-динамического моделирования плавления и кристаллизации нанокластеров никеля и золота с использованием потенциала сильной связи. Как видно из рис.1, полученная нами размерная зависимость температуры плавления гораздо лучше согласуется с результатами прямого эксперимента, чем молекулярно-динамические результаты других авторов.

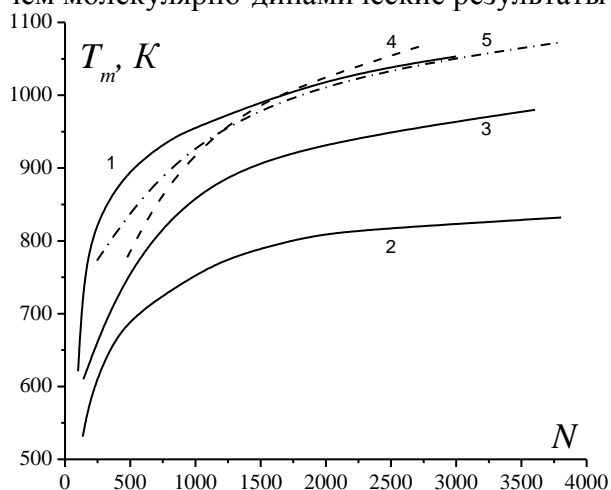


Рис.1. Размерная зависимость температуры плавления T_m для нанокластеров Au. 1 – наши результаты, 2 и 3 – молекулярно-динамические результаты других авторов ([3] и [4] соответственно), 4 и 5 – прямой эксперимент ([5] и [6] соответственно).

К настоящему нами проведено сравнительное исследование гистерезиса плавления и кристаллизации для нанокластеров нескольких переходных металлов, включая никель, золото, серебро и медь. Наряду с общей закономерностью, отвечающей уменьшению как температуры плавления, так и температуры кристаллизации с уменьшением размера наночастиц, выявлены специфические особенности гистерезиса плавления и кристаллизации для нанокластеров различных металлов. В частности установлено, что для нанокластеров никеля следует ввести в рассмотрение температуры начала и завершения соответствующего фазового перехода первого рода, тогда как плавление и кристаллизация нанокластеров золота и серебра происходят при вполне определенных температурах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-03-00119).

Список литературы

1. Самсонов В.М., Бембель А.Г. // Ядерная физика и инжиниринг, 2013. Т.4. № 6. С.578.
2. Самсонов В.М., Бембель А.Г., Шакуло О.В., Васильев С.А.// Кристаллография, 2013 (в печати).
3. Головенько Ж.В. Анализ особенностей формирования структуры нанокластеров золота при процессах кристаллизации Дисс. канд. физ.-мат. наук, Барнаул, 2012.
4. Zhang Yan-Ning, Wang Li, Bian Xiu-Fang // Acta Phys. –Chim. Sin. 2003 V.19 P.35.
5. Buffat Ph., Borel J-P. // Phys. Rev. A 1976 V.13 P.2287.
6. Dick K., Dhanasekaran T., Xhang Z. and Meisel D. // J. Am. Chem. Soc. 2002 V.124 P.2312.

ТЕПЛОВАЯ МОДЕЛЬ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ДВУХДИАПАЗОННОГО МАТРИЧНОГО ФОТОПРИЕМНОГО УСТРОЙСТВА НА ОСНОВЕ HgCdTe В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Сахаров М.В., Средин В.Г., Дуванов Б.Н., Астраускас Й.И., Гостев А.А.

*Военная академия РВСН имени Петра Великого, Москва, Россия,
m_sakharov@mail.ru*

Известные модели [1, 2] взаимодействия лазерного излучения (ЛИ) с полупроводниковыми фоточувствительными материалами, основывающиеся на решении уравнений теплопроводности, описывают возникновение и эволюцию температурного поля на облучаемой поверхности и в объеме материала, что позволяет судить о протекающих в нем физических процессах и изменениях оптических, теплофизических, электрофизических и других характеристик. Особенностью моделирования воздействия лазерного излучения на HgCdTe матричные фотоприемники (МФП) является то, что они представляют собой гетероструктуры, состоящие из большого числа слоев, отличающихся характеристиками. В настоящее время большое внимание уделяется созданию МФП, позволяющих формировать тепловые изображения объектов одновременно в двух и более диапазонах.

Целью настоящей работы являлась разработка тепловой модели воздействия ЛИ на двухдиапазонный HgCdTe МФП, учитывающей параметры воздействующего излучения, топологию матрицы, многослойную структуру чувствительных элементов, температурные зависимости оптических и теплофизических характеристик фоточувствительного материала [3].

Последствия такого воздействия существенно зависят от множества факторов: соотношения энергий кванта лазерного излучения и ширины запрещенной зоны для слоев, обеспечивающих детектирование в обоих диапазонах, энергетических, пространственных и временных параметров лазерного излучения, исходного распределения примесей и дефектов кристаллической структуры и др.

Разработанная тепловая модель основана на решении трехмерного уравнения теплопроводности методом конечных разностей. Для автоматизации расчетов разработана программная модель, использующая для визуализации результатов расчета технологию построения трехмерных изображений OpenGL.

Использование разработанной модели позволяет прогнозировать результаты воздействия ЛИ на двухдиапазонный HgCdTe МФП, которые зависят от поведения температурного поля во времени, а при импульсном воздействии – и от скорости ввода энергии в каждый чувствительный элемент МФП.

Список литературы

1. Средин В.Г., Сахаров М.В. Математическая модель воздействия лазерного импульса на многослойную полупроводниковую фоточувствительную структуру. / Прикладная физика, № 2, 2011 г. – С. 5-11.
2. Суханов Я.А., Сахаров М.В., Дяченко И.В. и др. Взаимодействие лазерного излучения с материалами оптико-электронной техники. Монография. / Под ред. Н.С. Захарова. – Сергиев-Посад: ЦФТИ МО РФ, 2004. – 175 с.;
3. Берченко Н.Н., Кревс В.Е., Средин В.Г. Полупроводниковые твердые растворы и их применение. Монография./ Под. ред. Средин В.Г. М.: Воениздат, 1982. – 208 с.

О ВЛИЯНИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ И ОБЪЕМНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ПЛАВЛЕНИЕ-КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ

Сдобняков Н.Ю., Ванюшева Т.А., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н.,
Новожилов Н.В., Михайлов А.С.

Тверской государственный университет, Тверь, Россия, nsdobnyakov@mail.ru

В рамках настоящей работы нами произведено исследование влияния вакансий на термодинамические характеристики на примере нанокластеров алюминия. В целях реализации компьютерного эксперимента нами была разработана компьютерная программа, в основу работы которой был положен метод Монте-Карло (схема Метрополиса) [1]. Для описания взаимодействия между атомами в кластере использовался многочастичный потенциал Гупта [2]. В процессе моделирования нами был проведён анализ термодинамических и структурных характеристик нанокластеров алюминия различных размеров, содержащих от 43 до $N > 1000$ атомов с содержанием поверхностных и объемных дефектов (вакансий) от 5 до 15 %. На основе анализа калорических зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии нанокластеров алюминия с различной долей вакансий в кластере соответствующего размера установлено, что температуры плавления всех нанокластеров, содержащих поверхностные и объемные дефекты (вакансии), лежат ниже температуры плавления как макроскопического образца (соответствующие температуры взяты из [3]), так для наночастицы соответствующего размера в отсутствие вакансий [4]. На основе вычисленных значений потенциальной части внутренней энергии кластеров и оценок для энергии эквивалентного количества атомов находяющихся в массивной фазе может быть рассчитана избыточная энергия Ψ изучаемых систем. Согласно [5], для кластера, состоящего из N атомов, избыточная энергия Ψ может быть рассчитана по формуле $\Psi = U_c(N) - U_{tot}$, где $U_c(N)$ - полная энергия кластера, состоящего из N атомов, U_{tot} - энергия того же числа атомов в фазе сравнения, в качестве которой в данном случае может рассматриваться массивная металлическая фаза ($U_{tot} = NU_1$, U_1 - энергия в расчете на один атом массивной фазы). Для расчетов в качестве $U_c(N)$ была использована средняя энергия равновесного состояния системы. Чтобы определить значение U_{tot} мы использовали среднюю энергию атомов кластера находящихся в центре моделированной частицы. Конкретизация радиуса малого объекта позволяет ввести в рассмотрение удельную полную поверхностную энергию $\varepsilon R = \Psi/4\pi R^2$, которая при 0K для эквимолекулярной разделяющей поверхности будет совпадать с энергетическим поверхностным натяжением $\gamma(R)$, определяемым как работа образования малого объекта в расчете на единицу площади выбранной поверхности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №№ 12-03-31593-мол-а, 13-03-00119-а).

1. Metropolis N. et al // Journal of Chemical Physics. 1953. V. 21. № 16. P. 1087-1092.
2. Gupta R.P. // Physical Review B. 1981. V. 23. №. 12. P. 6265-6270.
3. Физические величины. Справочник. М.: Энергия, 1991. С. 289.
4. Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В. // Нанотехника. 2012. №2(30). С. 11-16.
5. Samsonov V.M., Bazulev A.N., Sdobnyakov N.Yu. // Journal of Physical Chemistry. 2003. V. 77. Suppl. 1. P. 158-161.

ОПТИЧЕСКАЯ ОДНОРОДНОСТЬ И ФОТОРЕФРАКТИВНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ НИОБАТА ЛИТИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ КАТИОНАМИ Zn^{2+}

Сидоров Н.В.,¹ Яничев А.А.,¹ Габаин А.А.,¹ Палатников М.Н.,¹ Пикуль О.Ю.²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В.Тананаева Кольского научного центра РАН, г.Апатиты

²Федеральное государственное бюджетное учреждение образования Дальневосточный государственный университет путей сообщения, г.Хабаровск

E-mail: pikoul2008@gmail.com

Методами лазерной коноскопии и фоторефрактивного рассеяния света исследованы структурная и оптическая однородность и фоторефрактивные свойства кристаллов ниобата лития, легированных катионами Zn^{2+} ($LiNbO_3:Zn$; $[Zn] = 0,018 \div 0,88$ вес.%). Методика выращивания монокристаллов и приготовление шихты подробно описаны в работе [1].

В экспериментах по ФРПС применялся аргоновый лазер фирмы “Spectra Physics” (модель 2018–RM, $\lambda_0 = 514,5$ нм). Лазерный луч был направлен вдоль оси Y, а вектор напряженности электрического поля E параллелен оси Z, совпадающий с направлением полярной оси (Ps) кристалла. Форма индикатрисы рассеяния ФРПС имеет вид ассиметричной восьмерки. Спекл-структура ФРПС во всех кристаллах $LiNbO_3:Zn$ является трехслойной. Форма второго и третьего слоев, имеющих точечную структуру, в общем виде повторяют форму первого слоя. Спекл-структура ФРПС исследованных кристаллов имеет свои особенности, зависящие от состава кристалла ниобата лития, а также тонкие особенности в каждом слое, анализируя которые, можно исследовать структуру, микро и макрооднородность кристаллов, а также чувствительность к повреждению лазерным излучением.

Коноскопический метод при сканировании лазерным лучом входной грани кристаллов $LiNbO_3:Zn$ [0,018 вес.%] показывает отсутствие аномальной двуосности в исследуемых образцах. Вместе с тем отмечаются некоторые искажения в области одной из ветвей-изогир «мальтийского креста» в виде снижения контраста и отсутствие четких контуров одной из ветвей «мальтийского креста». Коноскопический анализ кристаллов $LiNbO_3$ с содержанием катионов Zn [0,52 ÷ 0,88 вес.%] показывает для всех образцов наличие коноскопических картин, соответствующих одноосному кристаллу, а также коноскопических картин с признаками аномальной двуосности. При этом большая степень отступлений от одноосности характерна для коноскопических картин образцов с содержанием катионов Zn [0,52 вес.%] и [0,62 вес.%]. Степень искажения коноскопических картин образца с самым высоким процентным содержанием катионов Zn [0,88 вес.%], напротив, заметно снижается.

Отличия в ФРПС и коноскопических картинах исследованных кристаллов обусловлены неравномерным распределением дефектов в объеме кристалла и неравномерным вхождением катиона Zn^{2+} в решетку. Это приводит к появлению в кристалле локальных изменений его упругих характеристик и к появлению механических напряжений, локально искажающих оптическую индикатрису и, соответственно, коноскопическую картину.

Литература

1. Палатников М.Н. Материалы электронной техники на основе сегнетоэлектрических монокристаллов и керамических твердых растворов ниобатов-танталатов щелочных металлов с микро- и наноструктурами. Дисс. ... д.т.н. Апатиты. 2010. 488 с.

Дислокационный энгармонизм и магнитопластичность кремния

А.А. Скворцов, А.В.Каризин

[1] Университет машиностроения, Б.Семёновская, 38, Москва, 107023, Россия
SkvortsovAA2009@yandex.ru

При изучении магнитопластичности кремния, вопрос о динамике взаимодействия дислокаций со стопорами после обработки кристалла в постоянном магнитном поле рассмотрен явно недостаточно [1]. Данная работа посвящена изучению процессов взаимодействия дислокационной линии со стопорами после выдержки дислокационного кремния в магнитном поле (МП). Для этого нами акустическим методом регистрировался нелинейный модуль упругости 4 порядка β , пропорциональный плотности N_d дислокаций и длине колеблющегося дислокационного сегмента L^4 : $\beta \sim N_d L^4$ [2].

Поскольку обработка дислокационного кремния в МП при комнатной температуре не меняет величину N_d , то наблюдаемая (рис.1) зависимость $\beta(t)$ может быть связана лишь с изменением средней длины колеблющегося дислокационного сегмента и, следовательно, динамикой стопоров после обработки образцов в постоянном МП (рис.2). Обнаружено, что предварительная обработка дислокационного кремния в постоянном МП в течении 30 минут при комнатной температуре приводит к увеличению L на 30 %. Это согласуется с полученными ранее данными [3] о влиянии постоянных магнитных полей динамику дислокационных сегментов в кремнии.

Работа выполнена при поддержке АВЦП проект №7.5397.2011 и РФФИ №13-07-00514.

Литература

[1] Коплак О.В., Дмитриев А.И., Моргунов Р.Б. ФТТ. **54**, 1350 (2012).

[2] Скворцов А.А., Орлов А.М., Никитин К.Е., Литвиненко О.В. Письма в ЖТФ **26**, 82 (2000).

[3] Скворцов А.А., Каризин А.В. ЖЭТФ **140**, 1 (2012).

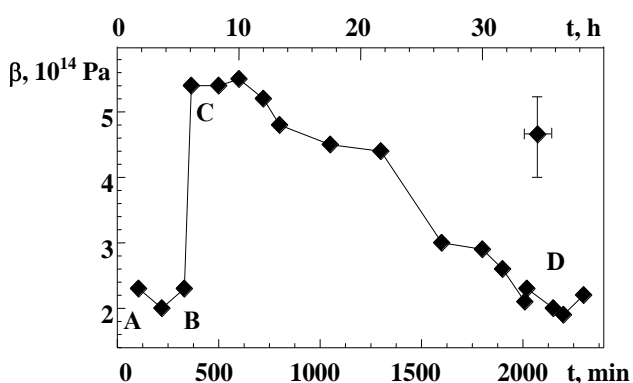


Рис.1. Эволюция нелинейного модуля β в процессе хранения образцов в естественных условиях: **AB**- до обработки в МП; **CD** - после 30 минутной обработки в магнитном поле $B=1$ Т при комнатной температуре.

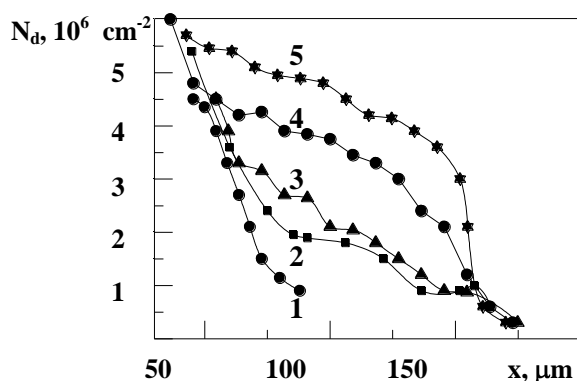


Рис.2. Распределение дислокационных ямок травления около царапины после отжига пластин ($\sigma=60$ МПа, $T=675$ °С, $t=60$ минут) с предварительной выдержкой образцов в постоянном магнитном поле в течении 30 мин. при комнатной температуре: **1**- 0,1; **2**- 0,3; **3**-0,5; **4** -0,8; **5**- 1,0 Тл

Миграция расплавленных включений Al-Si в поле структурной неоднородности кремния

А.А. Скворцов, М.В. Корячко

Университет машиностроения, Б.Семёновская, 38, Москва, 107023, Россия
SkvortsovAA2009@yandex.ru

Известно, что на образование и динамику макроскопических жидких включений в полупроводниках влияют электрические и тепловые поля [1], а также поля структурной неоднородности [2]. Данная работа посвящена изучению процессов образования и направленной миграции расплавленных зон типа металл-полупроводник в монокристаллическом кремнии в присутствии поля градиента плотности дислокаций.

Опыты проводились на монокристаллическом кремнии n-типа размером $3 \times 3 \times 15 \text{ мм}^3$ ($\rho = 1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$). Градиент дислокаций создавался изгибом образцов при температуре 1323 К. Полученные образцы скрайбировались в месте максимального градиента, после чего между торцами образцов зажималась тонкая пленка алюминия и производился отжиг в инертной атмосфере в диапазоне температур $T = 800\text{--}1100 \text{ }^\circ\text{C}$.

В результате исследований установлено, что возникновение расплавленных зон в объеме матрицы при отжиге связано с процессами сплавообразования примесной металлической пленки с монокристаллом на границе раздела металл-полупроводник. Перемещение примеси в объеме полупроводника осуществлялось в виде расплавленных включений за счет различия химических потенциалов атомов на “тыльной” и “лобовой” границах включения. Экспериментально обнаружены размерные зависимости скорости движения вторых фаз в диапазоне $T = 1100\text{--}1300 \text{ К}$ (рис.1).

Работа выполнена при поддержке проектов АВЦП №7.5397.2011, РФФИ №12-07-00620-а.

1. Гегузин Я.Е., Кривоглаз М.А. Движение макроскопических включений в твердых телах. Металлургия, М. 1971. 344 с.
2. Дзюба А.С. ФТТ **19**, 78 (1977).
3. Орлов А.М., Скворцов А.А. Неорганические материалы **43**, 542 (2007).

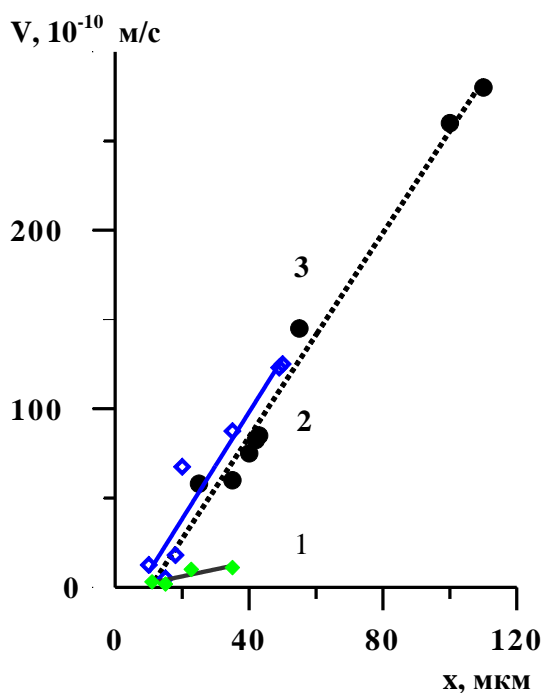


Рис.2. Вид закристаллизованного включения Al-Si после отжига монокристаллов Si

Изучение высокоэффективных пористых материалов на основе наноструктурированного диатомитового сырья

А.А. Скворцов, В.П. Хортов, П.А.Скворцов

Университет машиностроения, Б.Семёновская, 38, Москва, 107023, Россия
SkvortsovAA2009@yandex.ru

Известно, что диатомит является природным материалом и представляет собой кремнистую породу, сложенную мельчайшими опаловыми створками древних диатомовых водорослей, размер которых колеблется в пределах от 5 до 200 мкм. Сами створки - структуры фрактального характера с размером отдельных частей порядка 0,1 мкм и высоко пористой поверхностью. Химически диатомит на 96% состоит из водного кремнезема (опала).

В настоящее время выделяют два наиболее перспективных направления его применения: 1.Фильтрация жидкостей (материал обладает высокопористой структурой, жесткой кремниевой основой, стабилен к механическим и термическим воздействиям, содержит в своём составе диоксида кремния (до 90%) и оксиды алюминия, железа, кальция, калия, натрия. 2.Создание высокопористых теплоизоляционных материалов. Для значительного улучшения параметров теплоизоляционного материала предлагается использовать новые технологические методы его получения и обработки, что позволяет сформировать жесткую фрактальную структуру с необходимыми параметрами по механической прочности, теплопроводности, химической стойкости и стабильностью структуры вплоть до температур ~1200 °С. Высокая пористость материала (до 80%) заметно снижает его механические свойства. Вот почему целью работы является анализ механических свойств пенодиатомитовой керамики в зависимости от изотермического отжига образцов.

Динамический модуль упругости керамики определялся резонансным методом на изгибных колебаниях образца. В работе по экспериментальным резонансным частотам колебаний образцов (1,9–2,6 КГц), проведено измерение средних значений динамического модуля упругости ($H=0,30$ ГПа) и скорости звуковых колебаний основного тона в образцах. Основные данные сведены в таблицу.

Таблица

Влияние отжига на характеристики керамики.

Т отжига, °С	$\Delta m/m$, %	$\Delta l/l$, %	ρ , кг/м ³	Е, ГПа	V, м/с ²
До отжига	0	0	447	0,32	846
800	2	1	456	0,33	850
900	3	2	477	0,41	923
950	3	6	535	0,53	992
1000	3	10	577	0,61	1031

Показано также, что в процессе отжига в диапазоне температур (850–1000 °С) в материале одновременно протекают процессы спекания и фазообразования. Наиболее заметную роль в изменении геометрических размеров образцов играют процессы спекания. Обнаружено заметное влияние посторонних включений на динамический модуль упругости и дисперсию звука в материале.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 12-08-13114-офи_м_РЖД.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПЛАСТИЧНОСТЬ КОВАЛЕНТНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА

Скворцова Н.П.

Учреждение Российской Академии наук Институт кристаллографии РАН,
г. Москва, Россия, e-mail: skvortsova49@mail.ru

Экспериментально изучались потеря устойчивости пластического течения и локализация деформации кристаллов парателлурита при деформировании их методом активного нагружения. В работе использовались монокристаллы α -TeO₂, выращенные методом Чохральского в направлении $\langle 110 \rangle$ на воздухе при атмосферном давлении [1]. Исходная плотность дислокаций, выявляемых в плоскости (110) методом избирательного химического травления, составляла $10^7 - 10^8 \text{ м}^{-2}$. Механические испытания образцов, ориентированных вдоль направлений [100], [110] и [221], проводились в интервале температур $T=733-993 \text{ К}$ со скоростью деформации $1.05 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. Методами оптической и интерференционной микроскопии исследована диссипативная структура в ансамбле микросдвигов.

Характерной особенностью высокотемпературной деформации монокристаллов парателлурита является возникновение узких микрополос сдвига при температурах $T > 900 \text{ К}$. При сжатии вдоль [221] активизируется первичная система скольжения (001)[100] с ориентационным множителем $f = 0.3$. При сжатии вдоль [110] действуют две ортогональные системы скольжения $\{010\} \langle 100 \rangle$ с одинаковым ориентационным множителем Шмида $f = 0.5$. Локальные сдвиги (микрополосы) ориентированы вдоль наиболее активных систем скольжения. Это обстоятельство свидетельствует о том, что физический механизм локализованной деформации осуществляется путем активации процессов быстрого лавинообразного движения близкорасположенных дислокаций.

В работе [2] исследовано распределение микрополос сдвига по ширине d при температуре $T = 943 \text{ К}$ и деформации $\epsilon = 4,2\%$ в кристаллах, ориентированных вдоль направлений [110] и [221]. Для данных условий деформации средние значения $\langle d \rangle$ составляют ~ 28.3 и $\sim 39.7 \text{ мкм}$ в образцах с ориентацией оси сжатия вдоль [110] и [221] соответственно. Увеличение деформации приводит к самопроизвольному появлению новых микросдвигов и развитию сдвигов, уже имеющих в образце.

Выявлены различные каналы потери устойчивости деформации: высокотемпературный “зуб” текучести, прерывистое немонотонное течение и глобальная потеря устойчивости, проявляющаяся в катастрофическом развитии трещин и разрушении материала при деформации $\epsilon > 10\%$. Установлена надежная корреляция между периодическими спадами (скачками) деформирующего напряжения малой амплитуды $\Delta\sigma \sim (0.2-0.5) \text{ МПа}$ на деформационных кривых и числом микрополос сдвига. Средние значения относительных амплитуд $\langle \Delta\sigma/\sigma \rangle$ скачков, соответствующих локальным сдвигам, изменяются в пределах от десятых долей процента до $\sim 1\%$. Интерпретация эффекта основывается на представлениях о самоорганизации дефектной микроструктуры в зонах интенсивного течения материала.

[1]. Скворцова Н.П., Ломонов В.А., Виноградов А.В. // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 1. С. 72-76.

[2]. Скворцова Н.П. // Вестник ТГУ. Серия: Естественные и технические науки. 2013. Т. 18. № 4. С. 1652-1654.

РОЛЬ ЦЕНТРАЛЬНОГО ЭЛЛИПСОИДА ИНЕРЦИИ В ОПРЕДЕЛЕНИИ ХИРАЛЬНОСТИ ПРОИЗВОЛЬНОГО ОБЪЕКТА

Смирнов Б.Б.

ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Москва

В предыдущих работах^{1,2} установлено, что в процессе определения хиральности произвольного объекта радиусы-векторы его точек имеет смысл представлять в виде чисто мнимых кватернионов. В том же виде следует представлять и радиусы кривизны его центрального эллипсоида инерции (ЦЭИ).

При этом оставалось неясным, требуют ли особого подхода случаи, когда ЦЭИ представляет собой поверхность вращения. Если бы удалось доказать, что ЦЭИ хирального объекта не может быть сферой, то в таких случаях точки объекта, радиусы-векторы которых пересекают ЦЭИ в его вершинах (точках скругления), можно было бы исключать из рассмотрения.

В данной работе установлено, что даже у заведомо хирального объекта ЦЭИ может быть сферой, т.е. поверхностью, любая точка которой есть точка скругления.

Из этого вытекает необходимость единого подхода ко всем точкам любого объекта.

Выработка такого подхода и составляет основное содержание данной работы.

¹ Смирнов Б.Б., Лебедев О.В. *О значимости выбора координат в процессе определения хиральности*. III Международная конференция по физике кристаллов «Кристаллофизика XXI века», г. Черногоровка Московской обл., 20-26 ноября 2006, тезисы стр. 80.

² Б.Б.Смирнов, О.В.Лебедев. *Выбор геометрического индикатора в процессе определения хиральности произвольного объекта*. IV Международная конференция по физике кристаллов «Кристаллофизика XXI века». Москва, 2010 г. Тезисы т. 1., стр. 31.

ДВИЖЕНИЕ ДОМЕННЫХ СТЕНОК В КОНГРУЭНТНОМ НИОБАТЕ ЛИТИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ПРОТОНООБМЕННЫМИ ВОЛНОВОДАМИ

Смирнова А.Н.¹, Батурин И.С.², Азанова И.С.¹, Ахматханов А.Р.², Шур В.Я.²

1. Пермский Национальный Исследовательский Политехнический Университет, Пермь, Россия, anna.nikol.smirnova@gmail.com

2. Лаборатория сегнетоэлектриков Уральского федерального университета, Екатеринбург, Россия, labfer.ins.urfu.ru

Целью данного исследования было исследование кинетики доменов в протонообменных полосковых волноводах (ПО ПолВ) (ширина 70 – 100 мкм), изготовленных в конгруэнтном ниобате лития (НЛ). В работе исследовались три группы образцов: 1) образцы со слоем α -фазы 7 мкм; 2) образцы со слоем α -фазы 10 мкм; 3) образцы со слоем β 1-фазы 0,7 мкм. Во всех образцах ПО ПолВ формировались на стороне Z^+ , а на стороне Z^- формировались в тех же условиях протонообменные планарные волноводы (ПО ПВ). Известно, что α -фазу можно переполяризовать [1], в том числе каналные волноводы [2].

При исследовании движения доменной стенки (ДС) в первой и второй партии образцов было подтверждено, что ПО ПолВ и граница НЛ – ПО ПолВ оказывают значительное влияние на движение доменных стенок [2]. Наблюдается два качественно различных типа характера движения ДС: скачкообразное и непрерывное. Скачкообразное движение ДС наблюдается в НЛ и в НЛ вдоль границы НЛ – ПО ПолВ. Непрерывное движение ДС наблюдается в ПО областях аналогично движению в ПО ПВ: впереди основной ДС обнаружены нанодомены, компенсирующие деполяризующее поле [3]. Скорость движения ДС в ПО ПолВ меньше, чем в НЛ, а ширина ДС в ПО ПолВ больше, чем в НЛ. Для переключения выделенной области (2 мм в диаметре) было необходимо приложить несколько импульсов поля. При слиянии ДС с изолированным доменом в НЛ происходит резкое, скачкообразное увеличение переполяризованной области. В ПО ПолВ ДС после слияния с изолированным доменом движется плавно.

Считается, что β 1-фазы находятся в состоянии парафазы [4], следовательно, у них отсутствует спонтанная поляризация. Ожидалось, что в образцах третьей партии ДС, дойдя до ПО ПолВ, прервется и появится вновь на поверхности только после прохождения под ПО ПолВ. В эксперименте оказалось, что доменная стенка прошла через ПО ПолВ сверху, при этом ПО ПолВ не мешали движению ДС, на границе НЛ – ПО ПолВ ДС не задерживалась. Переключение всей поверхности произошло за одно переключение.

При исследовании использовалась установка для изучения кинетики доменной структуры.

Список литературы:

1. M.P. De Micheli. //Fabrication and characterization of proton exchanged waveguide in periodically poled congruent lithium niobate // Journal Ferroelectrics. 340:1. 2006. P. 49-62

2. A.N. Smirnova, S.S. Mushinskiy, I.S. Baturin, I.S. Azanova, D.I. Shevtsov, A.R. Akhmatkhanov, A.V. Ievlev, and V.YA. Shur. Electric Field Poling of Lithium Niobate Crystals after Proton-Exchanged Channel Waveguide Fabrication. Ferroelectrics, 441:1–8, 2012 P. 1-8.

3. M. A. Dolbilov, E. I. Shishkin, V. Y. Shur, S. Tascu, P. Baldi, and M. P. De Micheli, Abnormal domain growth in lithium niobate with surface layer modified by proton exchange. Ferroelectrics 398(1), 108–114 (2010).

4. C.E. Rice. The structure and properties of $H_xLi_{1-x}NbO_3$ // J. Solid State Chem. 1986. Vol. 64. P. 188-199.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДА СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА С ОБРАЗЦОМ В СИСТЕМЕ МЕДЬ- ЗОЛОТО

**Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Кутилин П.С., Новожилов Н.В.,
Михайлова О.В., Антонов А.С.**

Тверской государственный университет, Тверь, Россия, nsdobnyakov@mail.ru

В рамках настоящей работы нами произведено моделирование методом Монте-Карло (схема Метрополиса [1]) взаимодействия острия зонда (медь) с поверхностью образца (золото) в процессе нагревания зонда при прохождении туннельного тока для различных конфигураций острия: стержень и конус, а также для различных расстояний между образцом и острием зонда в начальной конфигурации. Для описания взаимодействия использовался многочастичный потенциал Гупта [2]. Медь выбрана в качестве металла, из которого изготовлен зонд, поскольку параметры потенциала Гупта для системы вольфрам-золото (вольфрамовая проволока традиционно используется для изготовления зонтов в СТМ) в литературе не встречаются, но это по-нашему не изменит качественно результатов моделирования. Очевидно, что термическое удлинение острия зонда может привести как механическому контакту между образцом и острием, так и к частичному переносу вещества зонда на образец. Начальная конфигурация соответствует комнатной температуре 293 K . В моделируемых нами случаях изменение температуры для конфигурации конус составляет 150 K , а для случая стержня – 177 K , что находится в хорошем согласии с работой [3]. Отметим, что при исследовании характеристик туннельного контакта металл-металл (в частности получения ВАХ) необходим тщательный учет параметров, влияющих на туннельный ток, для извлечения информации об электронной структуре образца. Форма и ширина туннельного барьера и их изменение от приложенного напряжения оказывает существенное влияние на получаемые данные. Для анализа экспериментальных данных необходим детальный учет прозрачности туннельного барьера. Причем эффект термического расширения острия оказывает существенное влияние на форму ВАХ системы даже при малых по сравнению с работой выхода напряжениях смещения. При этом было экспериментально установлено [3], что вклад энергии Джоуля-Ленца пренебрежимо мал в сравнении с вкладом энергии Ноттингама. При этом тепловое расширение острия может достигать величин, сравнимых с шириной туннельного промежутка и возможно возникновение лавинообразного процесса теплового расширения острия, приводящего к возникновению контакта между острием зонда и поверхностью образца. Отметим также, что величина термического удлинения острия и его деформация при нагреве иглы током, протекающим в системе острие – образец определяется материалом, из которого оно изготовлено. Несмотря на тот факт, что процесс образования наноструктур на поверхности образца носит вероятностный характер и зависит от амплитуды импульса напряжения (и соответственно величины термического расширения зонда) данная технология может быть использована в нанолитографии [4].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №№ 12-03-31593-мол-а, 13-03-00119-а).

1. Metropolis N. et al // Journal of Chemical Physics. 1953. V. 21. № 16. P. 1087–1092.
2. Gupta R.P. // Physical Review B. 1981. V. 23. № 12. P. 6265–6270.
3. Рабинович Р.М. // Тезисы ВНКСФ-7. СПб: СПбГУ, 2001. С. 242.
4. Shedd G.M., Russel P.E. // Nanotechnology. 1990. V. 1. P. 67–80.

**ИССЛЕДОВАНИЯ СВЧ АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР
AlN/МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ АЛМАЗ**

**Сорокин Б.П., Квашнин Г.М., Бормашов В.С., Волков А.П., Теличко А.В.,
Гордеев Г.И., Терентьев С.А., Бурков С.И., Золотова О.П.**

*ФГБНУ “Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных
материалов”, Москва, г.о. Троицк, bpsorokin2@rambler.ru*

Пьезоэлектрические слоистые структуры состоят из внешнего электрода, пьезоэлектрической пленки, внутреннего электрода и звукопровода. Монокристалл алмаза имеет самую высокую скорость объемных акустических волн среди известных кристаллов, обладает высокими прочностными свойствами, высокой теплопроводностью, радиоактивной стойкостью и т.д. При использовании в качестве звукопровода синтетического монокристалла алмаза возможно значительное повышение рабочих частот. Таким образом, исследование и создание эффективных пьезоэлектрических слоистых структур со звукопроводом из алмаза является актуальной задачей. Пьезоэлектрические слоистые структуры могут использоваться в качестве сенсоров. На амплитудно-частотной характеристике наблюдались эквидистантные резонансные пики, каждый из которых соответствовал n -му акустическому резонансу (n – целое число) в звукопроводе. Их частоты определялись по формуле

$$f_n = \frac{nv}{2d} \quad (1)$$

где v – скорость продольной волны в звукопроводе, d – толщина звукопровода.

В качестве звукопроводов использовались полированные подложки ($R_a \leq 15$ нм) из (100) ориентированных синтетических монокристаллов AlN типа с низким содержанием азота и других примесей. Для электродов использовали различные металлы Mo, Al, Au, W, Cu, Ag, Pt. В качестве пьезоэлектрика использовалась пленка нитрида алюминия AlN. Напыление пленок производилось методом магнетронного напыления. Гексагональные кристаллы AlN имели преимущественно (002) ориентацию, что подтверждалось спектром РФА. Была получена высокая однородность и ориентация кристаллитов. Акустические резонансные свойства исследовались в широком интервале частот от 500 МГц до 20 ГГц с помощью векторного анализатора цепей E5071C Agilent Technologies и рабочей станции M150 Cascade Microtech Inc. Для пьезоэлектрических слоистых структур были исследованы резонансные частоты и добротность в широком диапазоне частот. Было получено, что выполняется зависимость $Q \square f = \text{const}$ при $\text{const} \approx 5,6 \cdot 10^{13}$. Данная константа имеет одно из самых высоких значений среди известных материалов акустоэлектроники, что характеризует данную структуру как потенциально перспективную для СВЧ электроники. Акустические обертоны возбуждались и на рекордных для такого типа устройств частотах ~ 20 ГГц.

Была исследована зависимость частот обертонов от температуры (в пределах -150 - +100 °С) либо от одноосного давления (сжатие до 300 МПа). Температурный коэффициент частоты, определяемый по формуле $\text{ТКЧ} = \frac{1}{40} \frac{f(40^\circ\text{C}) - f(0^\circ\text{C})}{f(20^\circ\text{C})}$, для образцов Al/AlN/Mo/алмаз оказался равен $-4,5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Коэффициент чувствительности по давлению $\alpha_f = \frac{1}{\Delta P} \left(\frac{\Delta f}{f} \right)$ для данного образца оказался равен $-6,1 \cdot 10^{-14} \text{ Па}^{-1}$ и $-6,5 \cdot 10^{-14} \text{ Па}^{-1}$ для резонансов с частотами соответственно.

ИЗМЕНЕНИЕ ФТОР-ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ (ПРИ 500 К) ПРИ МОРФОТРОПНЫХ ПЕРЕХОДАХ В РЯДУ ТРИФТОРИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Сорокин Н. И., Каримов Д. Н., Соболев Б. П.

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

В стандартных условиях в ряду трифторидов РЗЭ RF_3 ($R = La - Lu, Y, Sc$) происходят два морфотропных перехода (**МП**). По мере уменьшения ионного радиуса R^{3+} структура RF_3 меняется от типа LaF_3 ($R = La - Nd$) к типу $\beta-YF_3$ ($R = Eu - Lu, Y$) и далее к типу ReO_3 ($R = Sc$). С ростом температуры из-за наличия полиморфных переходов у RF_3 с $R = Pm, Sm, Eu$ ($\beta-YF_3 \leftrightarrow LaF_3$) и $R = Er, Tm, Yb, Lu, Y$ ($\beta-YF_3 \leftrightarrow \alpha-YF_3$) картина усложняется. **МП** в ряду RF_3 сопровождаются сильным уменьшением координирующей способности РЗЭ: к. ч. R^{3+} равны 11 (тип LaF_3) 8 – 9 (тип $\beta-YF_3$) и 6 (тип ReO_3). Цель работы - изучение влияния морфотропных переходов в RF_3 на ионную проводимость σ кристаллов (на основании собственных данных для $R = La$ [1], Ce [1], Pr [1], Nd [1], Tb [2], Er [2], Ho [3], Y [4], Sc).

Монокристаллы RF_3 получены из расплава методом Бриджмена в атмосфере гелия и продуктов пиролиза тефлона. Проводимость измерена методом импедансной спектроскопии ($1 - 10^6$ Гц). Изменение σ по ряду RF_3 представлено на рисунке. При первом **МП** от типа LaF_3 (тисонита) к типу $\beta-YF_3$, несмотря на их структурную близость и одинаковый тип дефектов (Шоттки), значения σ RF_3 падают на 2 – 3 порядка. При втором **МП** от типа $\beta-YF_3$ к типу ReO_3 тип дефектов Шоттки меняется на тип Френкеля. Эта смена сопровождается дальнейшим падением σ на 4.5 порядка.

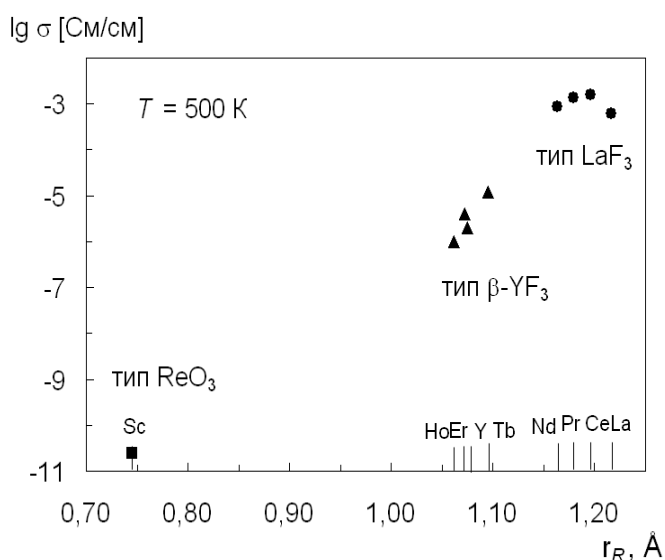


Рис. Изменение проводимости кристаллов RF_3 по ряду трифторидов РЗЭ при 500 К.

Таким образом, кристаллы RF_3 типа LaF_3 наиболее благоприятны для фтор-ионного транспорта. В них достигается $\sigma \sim 10^{-3}$ См/см при 500 К.

Оба (для стандартных условий) **МП** в ряду трифторидов РЗЭ приводят к резкому (на 7 – 8 порядков) падению σ кристаллов RF_3 при изменении R в направлении $La \rightarrow Lu$ (Y) $\rightarrow Sc$. При этом электрическое состояние кристаллов RF_3 сменяется от суперионного (тип LaF_3) к диэлектрическому (тип ReO_3).

- [1] Сорокин Н.И., Соболев Б.П. // Электрохимия. 2007. Т. 43. № 4. С. 420.
- [2] Trnovcova V., Fedorov P.P., Valkovskii M.D. et al. // Ionics. 1997. V. 3. P. 313.
- [3] Сорокин Н.И., Соболев Б.П., Брайтер М. // ФТТ. 2002. Т. 44. № 2. С. 272.
- [4] Trnovcova V., Федоров П.П., Соболев Б.П. и др. // Кристаллография. 1996. Т. 41. № 4. С. 731.

ИОННЫЙ ТРАНСПОРТ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МОНОКРИСТАЛЛАХ $MTiORO_4$ ($M = K, Rb; R = P, As$)

Сорокин Н.И., Новикова Н.Е., Сорокина Н.И., Шалдин Ю.В.

*Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия
e-mail: sorokin@ns.crys.ras.ru*

Кристаллы семейства $KTiOPO_4$ (КТР), пр. гр. $Pna2_1$, обладают высокой ионной проводимостью σ вдоль полярной оси c [1]. Ионная проводимость кристаллов $MTiORO_4$ ($M = K, Rb; R = P, As$) связана с образованием в процессе их роста вакансий в позициях одновалентных щелочных катионов (подвижные носители заряда) и кислорода: $MTiORO_4 \rightarrow M_{1-x}TiORO_{4-x/2} + (x/2)K_2O$ [2]. Структура кристаллов $MTiORO_4$ представляет собой жесткий трехмерный каркас, состоящий из связанных вершинами $[TiO_6]$ -октаэдров и $[RO_4]$ -тетраэдров, в котором имеются широкие винтообразные каналы, вытянутые вдоль оси c кристалла для размещения щелочных катионов. Наличие каналов в структуре и вакансий (неполная заселенность) в позициях щелочных катионов M^+ обеспечивает возможность их транспорта в кристалле.

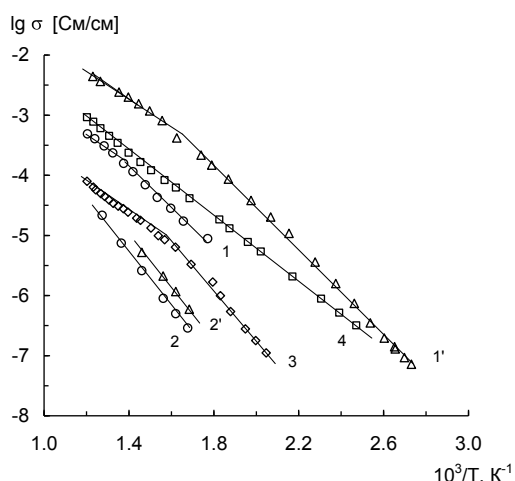


Рис. Зависимости $\sigma(T)$ кристаллов $KTiOPO_4$ “as grown” (1 – $\sigma_{||c}$, 2 – $\sigma_{\perp c}$), $RbTiOPO_4$ (3 – $\sigma_{||c}$), $RbTiOAsO_4$ (4 – $\sigma_{||c}$) и отожженного кристалла $KTiOPO_4$ (1' – $\sigma_{||c}$, 2' – $\sigma_{\perp c}$).

Электропроводность σ на постоянном токе определяли методом импедансной спектроскопии ($5-5 \times 10^5$ Гц) в вакууме (~ 1 Па) в интервале температур 293–833 К.

При 573 К отношение проводимостей $\sigma_{||c}/\sigma_{\perp c} \sim 10^2$ и $\sigma_{||c} = 1 \times 10^{-5}$ См/см для кристаллов $KTiOPO_4$ “as grown” (рисунок). После отжига (вакуум, 1273 К, 10 ч) кристалла $KTiOPO_4$ значения $\sigma_{||c}$ возрастают в ~ 20 раз, при этом отношение проводимостей $\sigma_{||c}/\sigma_{\perp c}$ увеличивается до 10^3 раз (573 К). Замещение подвижных ионов K^+ более крупными ионами Rb^+ приводит к уменьшению $\sigma_{||c}$ $RbTiOPO_4$ в 5 раз, а замещение ионов P^{5+} в жестком каркасе более крупными ионами As^{5+} – к увеличению $\sigma_{||c}$ кристаллов $RbTiOAsO_4$ в 15 раз (см. рис.). Полученные значения σ в сочетании с ранее выполненными структурными исследованиями [4] позволили охарактеризовать степень дефектности (количество вакансий и дополнительных позиций щелочных катионов) кристаллов $MTiORO_4$ и выявить структурные причины изменения σ .

[1] Калесинская В.А., Павлова Н.И., Рез И.С. и др. // Лит. физ. сб. 1982. Т. 22. № 5. С. 87; [2] Сорокина Н.И., Воронкова В.И. // Кристаллография. 2007. Т. 51. № 6. С. 1067; [3] Angert N., Kaplun L., Tseitlin M. et al. // J. Cryst. Growth. 1994. V. 137. P. 116; [4] Новикова Н.Е., Верин И.А., Сорокина Н.И. и др. // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 6. С. 999.

МАССОПЕРЕНОС В БИМЕТАЛЛАХ Ni-Fe, Ni-Al ПРИ НАЛИЧИИ КОМПЛЕКСОВ ВАКАНСИЙ В ПОЛЕ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

Сосков А.А.¹, Микрюков В.Р.¹, Старостенков М.Д.²,

Мясникова В.И.¹, Громов В.Е.¹

¹Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

E-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

²Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул, Россия

E-mail: genphys@mail.ru

Методом молекулярной динамики исследованы кооперативные атомные смещения вблизи границы биметалла, вызванные наличием вакансионных объединений. Изучен характер подобных смещений в следующих биметаллических сплавах: Ni-Fe, Ni-Al. Кристаллическая решетка моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе. Способ создания начальной конфигурации расчетной ячейки включал три стадии: построение, первичная релаксация и охлаждение.

Граница между компонентами биметаллического сплава проходила через середину ячейки содержащей 3200 частиц (40×80 частиц). Ячейка представляла собой плоскость {111} ГЦК кристалла. Граничные условия для расчетной ячейки задавались следующим образом: по оси x – периодические, по оси y – свободные. Начальная температура ячеек задавалась равной нулю Кельвин.

Искусственно созданная граница раздела металлов, подвергалась процедуре релаксации, в течение которой граничные атомы занимали равновесное положение. В результате релаксации наблюдалось повышение температуры ячейки до нескольких десятков Кельвин. Время релаксации ячейки составило 100 пс, на этап охлаждения было отведено 10 пс. Таких временных рамок эксперимента достаточно для того, чтобы ячейка успела избавиться от избыточного свободного объема, который возникал на границе металлов при создании начальной структуры. В итоге формировалась граница с характерными дислокациями несоответствия.

Следующий этап эксперимента состоял из внедрения от 3 до 10 вакансий на различном расстоянии от границы биметалла. При дальнейшей релаксации ячейки происходили направленные смещения атомов вдоль плотноупакованных направлений, обусловленные взаимодействием упругих полей комплекса вакансий и дислокаций. Серия компьютерных экспериментов показала, что внедрение комплекса вакансий приводит к смещению атомов вдоль направления плотной упаковки от границы биметалла к месту внедрения вакансий. При этом среди рассмотренных биметаллических соединений наблюдались существенные различия в данном процессе.

Внедрение различного количества вакансий на разном расстоянии от границы биметаллов показало, что с увеличением их числа увеличивается максимальное расстояние, на котором возможны кооперативные атомные смещения. Для Ni-Fe характерной является следующая зависимость: три вакансии вызывают кооперативные атомные смещения на расстоянии до десяти межатомных расстояний от границы биметалла, четыре – до 15, пять – до 19, шесть – до 22. Дальнейшее увеличение числа вакансий не приводит к увеличению данного расстояния, а только влияет на время, за которое происходит массоперенос.

Эксперименты, проведенные с биметаллическим сплавом Ni-Al, показали, что наличие комплекса вакансий в Ni вызывает кооперативные атомные смещения от границы биметалла, при этом происходило перемещение вакансий к границе биметалла. Однако движения дислокаций не наблюдается, как в случае Ni-Fe.

К ПРОБЛЕМЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ В НАНОМАТЕРИАЛАХ

Средин В.Г.^{*}., Никифоров В.Н.^{*}., Оксенгендлер Б. Л.^{**})

* - военная академия РВСН им. Петра Великого, Москва, Китайгородский проезд, 9

** - Институт химии и физики полимеров АН РУз, 100128 Ташкент, ул. Кадыри 7Б, Узбекистан

Эффективная масса носителей заряда является одной из основных динамических характеристик квантовых систем. В наноразмерных системах, которые могут быть получены путем уменьшения размеров монокристаллов, таких как квантовые точки или квантовые ямы, величина эффективной массы электронов должна принимать промежуточное значение между массой свободного электрона, как в атомах, и эффективной массой кристаллических твердых тел. Указанные системы, как известно, реально созданы на основе твердых растворов с изовалентным замещением полупроводников групп A^3B^5 и A^2B^6 . Для этих материалов установлено, что:

1. Эффективная масса носителей заряда в них уменьшается с уменьшением значения ширины запрещенной зоны [1].

2. Ширина запрещенной зоны в наноразмерных материалах этого типа увеличивается при уменьшении их размеров [2].

В модели $\vec{k} \times \vec{p}$ -метода можно показать, что эффективная масса электрона в нанокластерах таких материалов может быть представлена в виде:

$$\frac{m}{m^*} \approx 1 + 2 \frac{\frac{\hbar^2}{ma^2}}{\Delta E_g^o + \frac{\hbar^2 \chi^2}{2mR^2}}$$

где $A = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$, χ - нули сферической функции Бесселя, $\Delta E_g = \Delta E_g^o + \frac{A}{R^2}$, R - радиус нанокластера, ΔE_g^o и ΔE_g - ширина запрещенной зоны в объемном полупроводнике и соответствующий ей энергетический зазор в нанокластере, m - масса свободного электрона. Зависимость величины эффективной массы электрона от размеров наночастиц обнаружена экспериментально, например, в твердых растворах GaAs-InAs [3], причем качественно эта зависимость совпадает с приведенным выражением.

Отметим, что для описания оптических и гальваномагнитных свойств нанокластеров, полученных на основе рассмотренных выше твердых растворов полупроводников, достаточно введения понятия электрона проводимости и дырки, для металлов - только электронов проводимости. В наноматериалах иногда возникает принципиально новые ситуации. Так, распределение наночастиц оксида железа по размерам имеет выраженный двухвершинный характер [4], содержащее два характерных размера R_1 и R_2 . В этой системе поэтому можно ожидать существование электронов с двумя значениями эффективной массы. В работе анализируются следствия сосуществования в системе «легких» и «тяжелых» электронов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И.М. Цидильковский. Зонная структура полупроводников. М. «Наука», 1978г. 328с.
2. Ч. Пул, Ф. Оуэнс. Нанотехнологии. М. «Техносфера». 2010г., 329с.
3. Fetterman H., Waldman I., Wolfe C., Sol.St.Comm. 1972, v.11, p. 375.
4. Никифоров В.Н., Средин В.Г. Физические аспекты метрологии магнитных наночастиц. Материалы II международного форума по нанотехнологиям. М., 2009г., с. 321

ПЛАСТИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ СПЛАВОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНОГО ТОКА

Столяров В.В.

Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, Россия

vlstol@mail.ru

Резкое упрочнение и низкая трещиностойкость сплавов вынуждают снижать разовые деформации или повышать температуру процесса ОМД. Введение тока большой плотности во многих случаях решает задачу повышения деформируемости материала за счет теплового эффекта. Цель настоящей работы заключалась в сравнении деформационного поведения сплавов с различным типом микроструктуры при прокатке с импульсным током.

На примере титановых (BT1-0, BT6, TiNi) и алюминиевых (АД33, Д16) сплавов демонстрируется влияние химического и фазового состава, измельчения микроструктуры, а также наличия легкоплавкой эвтектики на деформационную способность и деформационное упрочнение в процессе прокатки с током полос и прутков тонкого сечения. Прокатку с импульсным током выполняли по режимам, отличающимся для каждого материала степенью деформации, плотностью тока и длительностью импульса.

Установлено, что разрушение образцов однофазного сплава TiNi интерметаллидной природы при прокатке без пропуска тока происходит хрупко с разделением на части, что не наблюдается при прокатке с пропуском тока. Для всех исследованных титановых сплавов отмечено повышение *деформируемости* с введением тока (рис.1а). Увеличение плотности и длительности импульса тока также способствует повышению деформируемости.

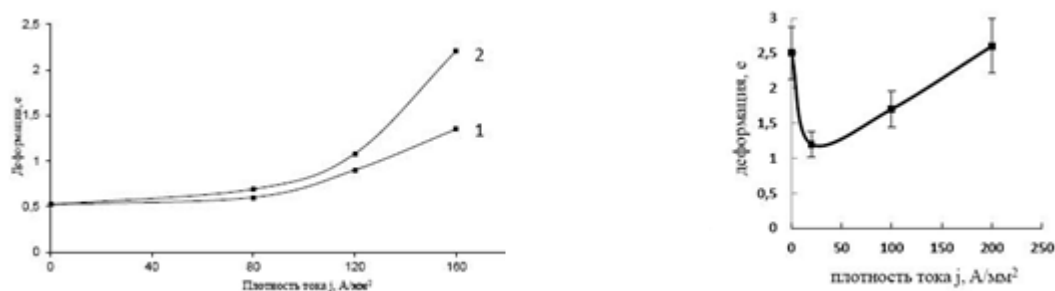


рис.1 Влияние плотности тока и длительности импульса (1 – $\tau = 80$ мкс; 2 – $\tau = 160$ мкс) на деформируемость: а - Ti49,3Ni50,7; б-Д16.

Деформационное поведение алюминиевых сплавов в крупнозернистом состоянии при прокатке с током существенно иное, чем титановых сплавов (рис.1б). Для обоих сплавов (АД33 и Д16) существуют интервалы значений плотности тока ($j = 10\text{--}100$ и $0\text{--}25$ А/мм²), в которых деформируемость резко снижается.

Деформационное *упрочнение* титановых сплавов при прокатке с током ниже, а максимальная микротвердость выше, чем для прокатки без тока. Повышение плотности тока приводит к уменьшению деформационного упрочнения. Интенсивность деформационного упрочнения зависит от природы и степени дисперсности сплава. В алюминиевых сплавах характерная тенденция снижения деформационного упрочнения с повышением плотности тока, в отличие от титановых сплавов, нарушается.

Обсуждаются возможные причины различного деформационного поведения при прокатке с током титановых и алюминиевых сплавов – роль теплового и электропластического эффектов, термическая стабильность, наличие фазовых превращений и степень дисперсности исходной структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №13-08-12222_офи_м и 12-02-00101_а) и Минобрнауки РФ (госконтракт № 14.513.11.0047).

Структура материалов на основе силицида марганца и их термоэлектрические свойства

Суворова Е.И., Ключковская В.В.

Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

Концепция создания эффективных термоэлектрических материалов включает такие свойства, как высокая электро- и низкая теплопроводность, высокие значения коэффициента Зеебека. Привлекательными свойствами являются химическая устойчивость, нетоксичность материалов и их относительная небольшая стоимость. Эффективность работы приборов зависит от структуры материалов и наличия различных дефектов.

Повышение эффективности используемых материалов связывалось с отсутствием дальнего порядка, наличием границ раздела, существованием примесных дефектов и т.д. Очевидно, что эти структурно-чувствительные особенности могут зависеть от кристаллографии выделений и включений в материалах, ориентационных соотношений, размеров, структуры границ раздела и т.д. Ряд проблем, которые могут появиться при создании термопреобразователей и микротермобатарей различных конструкций на основе высших силицидов марганца, может быть решен только при установлении атомной структуры используемых кристаллов и тонких слоев. В настоящей работе в качестве объекта исследования выбраны кристаллы высшего силицида марганца, $MnSi_{1.75}$, чистые и легированные алюминием, молибденом и германием.

Применение комбинации методов электронной дифракции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, и энерго-дисперсионной спектроскопии позволило установить структуру, размеры и распределение выделений в чистых и легированных кристаллах ВСМ, выращенных из расплава методом Бриджмена и полученных с помощью реактивной диффузии при осаждении Mn на подложки Si. Установлены ориентационные соотношения, оценена деформация кристаллов и исследованы границы раздела между матричным кристаллом и выделениями. Проведено сравнение структуры и свойств исследованных в данной работе кристаллов с нано- и микро-структурированными материалами, полученных холодным и горячим прессованием и описанных в различных литературных источниках. Данное исследование позволило сделать заключение, что монокристаллы ВСМ не исчерпали своих возможностей в плане улучшения термоэлектрических свойств и, в первую очередь, такое улучшение должно быть связано с контролем ростовой температуры и получением однородных образцов.

Напряженные сверхрешетки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$ в НЕМТ гетероструктурах.
Е.И. Суворова¹, С.С.Пушкарев^{2,3}, Г.Б. Галиев³, Р.М. Имамов¹

¹Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

²Национальный исследовательский ядерный университет “Московский инженерно-физический институт”

³Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН, Москва

Повышенное внимание к гетероструктурам, на основе которых создаются транзисторы с высокой подвижностью (или с высокой дрейфовой скоростью) электронов (high electron mobility transistor, НЕМТ) уделяется с конца 70х годов прошлого века. НЕМТ структуры обычно состоят из нескольких слоев полупроводниковых материалов. Основной проблемой для подобных материалов является образование таких дефектов, как дефекты упаковки и дислокации, которые могут являться как ловушкой для электронов, так и неожиданным стоком. Поэтому высокая концентрация дислокаций в активной зоне, состоящей из нескольких слоев (канал, спейсер, дельта-легированный кремнием слой и защитный слой) ведет к неконтролируемой работе различных приборов в микроэлектронике. Разработаны и применяются специальные методы выращивания буферных слоев, при которых постепенно уменьшается несоответствие между решетками подложки и активной зоны и образуются гладкие поверхности, средняя шероховатость которых не превышает 2 нм, при этом рост сопровождается релаксацией напряжений.

В настоящей работе на примере гетероструктуры $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ с повышенным содержанием индия до 76% с помощью электронно-микроскопического исследования показано влияние сверхрешеток, выращенных в метаморфном буфере, на структурное совершенство эпитаксиальных слоев, плотность дислокаций, внешнюю поверхность. Увеличение числа периодов в сверхрешетке способствуют значительному уменьшению плотности дислокаций и улучшению качества гетероструктур и их транспортных свойств. Показано, что увеличение содержания индия в гетероструктурах не приводит к сегрегации или образованию кластеров. Мы полагаем, что дальнейшая оптимизация ростовых параметров и геометрической структуры метаморфного буфера и сверхрешеток позволит получить НЕМТ с хорошими электрофизическими параметрами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН (Постановление №24), а также гранта РФФИ 11-07000050.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ «АМОРФНОЕ СОСТОЯНИЕ \leftrightarrow КРИСТАЛЛ» В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ ПРИ МЕГАПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В КАМЕРЕ БРИДЖМЕНА

Р.В. Сундеев, А.В. Шалимова, А.М Глезер

*Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им.
И.П. Бардина, г.Москва, Россия*
sundeev55@yandex.ru

Целью данной работы является рассмотрение особенностей деформационной кристаллизации аморфных сплавов $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$, $Ni_{50}Ti_{30}Hf_{20}$, $Zr_{50}Ni_{18}Ti_{17}Cu_{15}$, $Fe_{78}B_{8.5}Si_9P_{4.5}$, $Fe_{83}C_{13}B_4$, $Fe_{80}B_{13}Si_7$, $Fe_{76}Cr_{16}Zr_{4.5}B_3C_{0.5}$, $Fe_{58}Ni_{25}B_{17}$, $Fe_{57}Co_{24}Cr_{16}B_3$, $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$ и деформационной аморфизации закристаллизованных аморфных сплавов $Ni_{50}Ti_{30}Hf_{20}$, $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$, $Zr_{50}Ni_{18}Ti_{17}Cu_{15}$ и $Fe_{78}B_{8.5}Si_9P_{4.5}$ в ходе мегапластической деформации (МПД) в камере Бриджмена. Все образцы деформировали в камере Бриджмена при одинаковых условиях: квазигидростатическое давление 4 ГПа и комнатная температура. Полное число оборотов подвижной наковальни n в эксперименте изменяли от 1/4 до 9 при постоянной скорости вращения 1 об/мин. Обнаружено, что в одинаковых условиях деформации, исходно однофазные кристаллические сплавы на основе никелида титана - $Ni_{50}Ti_{30}Hf_{20}$ и $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ и исходно однофазный сплав $Fe_{78}B_{8.5}Si_9P_{4.5}$ достаточно легко аморфизуются, тогда как исходно двухфазные сплавы - $Zr_{50}Ni_{18}Ti_{17}Cu_{15}$ и $Fe_{78}B_{8.5}Si_9P_{4.5}$ аморфизуются слабо. Предполагается, что склонность к деформационной аморфизации кристаллических сплавов и соответствующих кристаллических фаз при МПД можно описать рассматривая три фактора влияния: механический, термодинамический и концентрационный. Механический фактор определяет склонность к накоплению в кристалле деформационных дефектов при механическом воздействии и зависит в первом приближении от значения модуля сдвига. Термодинамический фактор определяется значением свободной энергии (термодинамической устойчивостью) кристаллических фаз, участвующих в процессе деформации. Концентрационный фактор определяет склонность к протеканию диффузионных процессов, необходимых для изменения химического состава кристаллических и аморфных фаз в процессе деформации. Показано, что при деформации в камере Бриджмена аморфных сплавов на основе железа с различными температурами кристаллизации в материале, протекают процессы кристаллизации. Экспериментально обнаружено, что, чем ниже значение температуры кристаллизации аморфного сплава, тем большее значение объёмной доли кристаллической фазы наблюдается после МПД при одинаковых условиях деформации. На основании проведенных оценок сделано предположение о том, что эффект деформационной кристаллизации в аморфных сплавах на основе железа при МПД обусловлен как адиабатическим выделением тепла и соответствующим повышением температуры в деформационных, сильно локализованных полосах сдвига, так и заметным увеличением концентрации областей избыточного свободного объема в этих полосах. Установлено, что МПД при комнатной температуре в исходно аморфном или исходно кристаллическом сплаве $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ приводит к реализации нескольких циклов взаимосвязанных фазовых превращений типа «кристалл \leftrightarrow аморфное состояние».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 12-02-31397 мол_а, 11-02-00607 и 12-02-00748).

ВЛИЯНИЕ ЛОВУШЕК НА ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В КРИСТАЛЛАХ

Супрун И.Т.

ЭПИ (филиал) НИТУ МИСиС, Электросталь, Россия, suprunit@mail.ru

Дефекты структуры в реальных кристаллах (дислокации, вакансии, поры,...) могут служить ловушками для диффундирующих примесных атомов и изменять характер диффузионных процессов в кристалле. Исследуя временную зависимость потока выделяющихся примесей (скорость газовой выделености), можно определить основные параметры диффузионной кинетики, концентрацию ловушек, характер взаимодействия примесных атомов с ловушками и другие особенности диффузионных процессов.

В работе получена и решена система уравнений диффузионной кинетики примесных атомов, в кристалле, содержащем ловушки. Временная зависимость потока примесей на границе при определенных условиях, зависящих от начального распределения примесей и числовых значений параметров кинетики, может иметь форму пика.

В приближении принципа локального равновесия, когда в качестве первого приближения рассматривается обмен примесными атомами между объемом кристалла и ловушками, а во втором учитывается объемная диффузия (обмен примесными атомами между ловушками и объемом кристалла происходит значительно быстрее, чем изменение концентрации при объемной диффузии), получим выражение для временной зависимости потока примесей на границе

$$J(t) = w_{01} m_0 \sqrt{\frac{D}{\pi}} \int_0^t \frac{e^{-w_0 \tau} d\tau}{\sqrt{t-\tau}},$$

где $w_0 = w_{01} + \beta w_{10}$, w_{10} – частота скачков примесного атома в объеме кристалла, w_{01} – частота скачков примеси из ловушки в объем, D – коэффициент диффузии, m_0 – начальная концентрация примесей в ловушках, β – нормированная концентрация ловушек.

Получены формулы, связывающие временную координату пика с частотами скачков диффундирующего атома, а также асимптотические выражения для начального и конечного временных участков потока и количества выделяющихся дефектов.

Можно показать, что координата t_m точки максимума функции $J(t)$ определяется выражением

$$w_0 t_m = 0,854.$$

Асимптотики временной зависимости потока при малых и больших t имеют вид

$$J(t) = 2w_0 m_0 \sqrt{\frac{Dt}{\pi}},$$
$$J(t) = m_0 \sqrt{\frac{Dw_{01}}{\pi w_0 t}}.$$

Полученные формулы можно использовать для определения параметров диффузионной кинетики по временной зависимости скорости газовой выделености.

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПОВЕДЕНИЯ РАСТУЩИХ И ИСЧЕЗАЮЩИХ ЗЁРЕН В ДВУМЕРНЫХ ФОЛЬГАХ АЛЮМИНИЯ ПРИ НОРМАЛЬНОМ РОСТЕ ЗЁРЕН

Сурсаева В.Г.

*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка Московской обл., Россия,
sursaeva@issp.ac.ru*

В наших предыдущих работах приведены экспериментальные результаты нормального роста зёрен в фольгах алюминия. Показано, что в зависимости от температуры изотермического отжига процесс нормального роста зёрен может следовать зернограничной или стыковой кинетике. В процессе отжига с ростом размера зерна может снижаться влияние тройных стыков за счёт сбрасывания торможения тройными стыками, и кинетика может изменяться от стыковой к граничной. В этой работе мы приводим детали эволюции зернограничной структуры при нормальном росте зёрен, которые могут привести к смене кинетики, а именно, характерные особенности поведения растущих и исчезающих зёрен. Количество зёрен с топологическим классом два и три растёт (исчезающие зёрна) с увеличением длительности отжига, количество зёрен с топологическим классом четыре не изменяется, а с топологическим классом пять уменьшается. Это связано с характеристиками тройных стыков в этих зёрнах. Безразмерный параметр торможения тройных стыков, определяемый нами экспериментально для тройных стыков исчезающих и растущих зёрен, существенно отличается по величине. В исчезающих зёрнах торможение тройными стыками значительно ниже, чем в растущих зёрнах.

ДИФФУЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В БЕЗДИСЛОКАЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Таланин В.И., Таланин И.Е.

Запорожский институт экономики и информационных технологий, Украина
v.i.talanin@mail.ru

Рассматриваются основы созданной авторами диффузионной модели образования структурных несовершенств во время выращивания бездислокационных монокристаллов кремния. В основе модели лежит экспериментально и теоретически установленный факт отсутствия рекомбинации собственных точечных дефектов в области высоких температур. Модель высокотемпературной преципитации примеси описывает упругое взаимодействие между собственными точечными дефектами и фоновыми примесями кислорода и углерода во время охлаждения бездислокационных монокристаллов кремния после выращивания в температурном интервале 1683К...300К. Модель высокотемпературной преципитации включает в себя все три стадии классической теории образования частицы второй фазы: образования критического зародыша, рост и коалесценцию преципитата. Кинетические модели образования микропор и дислокационных петель показывают, что образование микропор имеет гомогенный характер, а образование петель происходит за счет действия деформационного механизма [1, 2].

Применение диффузионной модели к исследованию дефектообразования в термообработанных кристаллах показало, что эта модель позволяет с единой позиции описывать образование дефектной структуры, начиная от роста кристалла до создания прибора [3]. Рассматриваются теоретические и экспериментальные основы практического применения диффузионной модели для инженерии дефектов в кристаллах с использованием современных информационных технологий. Предполагается, что диффузионная модель может служить основой при рассмотрении дефектообразования в других совершенных полупроводниковых кристаллах и металлах.

1. Talanin V.I., Talanin I.E. In: *Advances in crystallization processes* (Ed. Y. Mastai) (Rijeka: InTechPubl., 2012) p. 619.
2. Talanin V.I., Talanin I.E. *J. Cryst. Growth* **346** 45 (2012)
3. Таланин В.И., Таланин И.Е. *ФТТ* **55** 2 247 (2013)

УПОРЯДОЧЕНИЕ КАТИОНОВ В СТРУКТУРЕ ПЕРОВСКИТА – ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

М.В. Таланов, В.М. Таланов, В.Б. Широков

Традиционно считается, что возможно три типа расположения катионов в В-подрешетке перовскитов: беспорядочное и два упорядоченных – со структурой поваренной соли и слоевой структурой для соединений с катионным порядком. Для перовскитов с упорядочением в А-подрешетке характерно образование слоевых структур и только в двух случаях известно упорядочение, приводящее к структурам типа поваренной соли.

В данной работе теоретико-групповыми методами теории фазовых переходов рассмотрено бинарное, тройное и четверное упорядочение катионов в А- и В-подрешетках структуры кубического перовскита. Приведены полные списки теоретически возможных «чистых» упорядоченных фаз, полученных для полного набора параметров порядка переходов типа «порядок-беспорядок» в отдельной подрешетке. Показано, что известные из эксперимента и обсуждаемые в литературе типы упорядочения катионов не исчерпывают всех возможных вариантов: прогнозируется возможность существования новых типов катионного порядка в А- и В-подрешетках перовскитов. Установлена возможность существования 13 упорядоченных фаз в позиции 1(a) (в том числе 4 бинарных, 2 тройных и 5 четверных катионных сверхструктур), 13 фаз с различным типом порядка в позиции 1(b) (в том числе 4 бинарных, 2 тройных и 5 четверных катионных сверхструктур). Совместное рассмотрение перестановочного и механического представлений кристаллов со структурой перовскита позволило также установить, что реальные структурные механизмы образования даже хорошо известных типов упорядоченных фаз гораздо сложнее, чем это принято было считать ранее. Приведены расчетные структуры некоторых типов упорядоченных низкосимметричных модификаций перовскитов.

В качестве примера на рисунке показана расчетная структура упорядоченного перовскита с пространственной группой $Im\bar{3}m$ и структурной формулой $A^{2(a)}_{1/4}A^{6(b)}_{3/4}B^{8(c)}X^{24(h)}_3$. Эта структура генерирована одним трехкомпонентным параметром порядка, преобразующимся по неприводимому представлению $k_{11}(\tau_1)$. Для нее характерно бинарное упорядочение катионов в А-подрешетке типа 1:3.

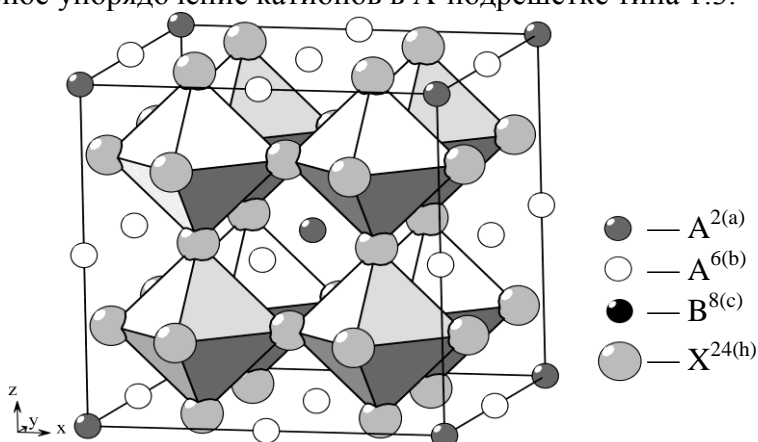


Рис. Расчетная элементарная ячейка упорядоченного перовскита с пространственной группой $Im\bar{3}m$.

АКТИВАЦИЯ ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННЫХ АТОМОВ БОРА И АЗОТА В ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЯХ $Cd_xHg_{1-x}Te$

Галипов Н. Х.¹, Войцеховский А. В.²

¹Военная академия РВСН им. Петра Великого, г. Москва, Россия, niyazt@yandex.ru

²Томский государственный университет, г. Томск, Россия, vav@elefot.tsu.ru

В настоящее время метод ионной имплантации является базовым для формирования в узкозонных полупроводниковых соединениях $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) *n-p* переходов, как в материале *p*-, так и *n*-типа. В последние годы гетероэпитаксиальные структуры КРТ, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии (ГЭС КРТ МЛЭ) и жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ КРТ) стали базовым материалом для создания многоэлементных полупроводниковых детекторов ИК-излучения с высокими параметрами. Несмотря на достигнутые успехи в данной области, в технологии создания *n-p* переходов в *p*-КРТ методом ионной имплантации все еще остается актуальной проблема формирования слоев *n*-типа проводимости не за счет радиационных дефектов донорного типа, а за счет электрической активации внедренных атомов бора, который в основном в настоящее время используется для формирования *n-p* переходов в ГЭС КРТ МЛЭ *p*-типа без применения активационных постимплантационных отжигов.

В работе исследованы процессы электрической активации ионно-имплантированных атомов бора и азота в ГЭС КРТ МЛЭ и ЖФЭ КРТ, при низкотемпературных отжигах под анодным окислом. Структуры ГЭС КРТ МЛЭ *p*- и *n*-типа имели состав в рабочем слое $x = 0,205-0,225$, на поверхности $x = 0,3-0,4$. В образцах *p*-типа концентрация дырок $p = (6-9) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и подвижность $\mu_p = 500-600 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, а образцы *n*-типа имели концентрацию электронов $n = (1,6-1,9) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и $\mu_n = (0,9-1,1) \cdot 10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Ионы B^+ и N^+ имплантировались с энергией 175–300 кэВ и дозой $1,5 \cdot 10^{13}-3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ сквозь анодный окисел (АО) толщиной 100 нм. Отжиг под АО проходил в две стадии – сначала при $T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 2 ч и затем при $T = 200 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 22 ч. Холловские измерения методом Ван-дер-Пау проводились при $T = 77 \text{ К}$ в процессе термоциклирования образцов в интервале температур 77–300 К. Для исследования активации имплантированного бора в ГЭС КРТ МЛЭ применен метод “спектр подвижности” (СП) с многозонной подгонкой.

Показана возможность использования анодного окисла как эффективного маскирующего покрытия для постимплантационных отжигов ГЭС КРТ МЛЭ *p*-типа в температурном интервале $T = 200-250 \text{ }^\circ\text{C}$ без нарушения состава верхнего варизонного слоя и изменения электрофизических свойств структуры. Установлено, что в ГЭС КРТ МЛЭ эффективность активации бора, как медленно диффундирующей донорной примеси, снижается с ростом дозы ионов B^+ и увеличивается при термоциклировании от $T = 77 \text{ К}$ до комнатной температуры. Имплантированный азот, в отличие от бора, является быстро диффундирующей, акцепторной примесью в КРТ, эффективно компенсирующий как радиационные донорные центры, так и активированный бор. Степень электрической активации азота существенно возрастает при термоциклировании. Снижение эффективности электрической активации атомов бора и азота с ростом дозы свидетельствует о том, что при большей концентрации атомы примеси связываются в более крупные устойчивые нейтральные примесно-дефектные комплексы, чем при меньших концентрациях. Впервые изготовленные меза-фотодиоды на основе активированного бора в ГЭС КРТ МЛЭ *p*-типа с длинноволновой границей фоточувствительности $\lambda_c = 11 \text{ мкм}$ имели высокие произведения $R_d A = (6-8) \cdot 10^2 \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$, произведение $R_0 A = 5-6 \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$ и диффузионную “полку” в обратной ветви ВАХ вплоть до напряжения смещения 1,3 В.

РОСТ ТРЕЩИН В ЭЛЕМЕНТАХ КОНСТРУКЦИЙ ИЗ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПОД ВЛИЯНИЕМ ВОДОРОДА И ЦИКЛИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ

Тараканов П.В., Романов А.Н., Шашурин Г.В.

ИМАШ РАН им. А.А. Благодирова, Москва, Россия, pashabeetle@yandex.ru

Вопросу роста трещин в металлах и сплавах элементов конструкций, находящихся под влиянием водорода и циклического нагружения, посвящено большое количество работ как отечественных, так и зарубежных ученых. В большинстве своем, эти работы носят экспериментальный характер и сводятся к построению кинетической диаграммы разрушения рассматриваемого металлического материала. Полученные данные нуждаются в обобщении и описании с помощью инженерных моделей.

Созданные к настоящему моменту инженерные модели получены в результате обработки экспериментальных кривых для определенных металлических материалов, что ограничивает их использование исключительно рассмотренными сталями и сплавами. Разработанная авторами модель оценки скорости роста трещин в металлических материалах под влиянием водорода и циклического нагружения не ограничивается применением только для определенного материала и позволяет получать необходимые данные для прогнозирования роста трещин в рассматриваемых элементах конструкций. Результаты, полученные с помощью разработанной модели, удовлетворительно сходятся с представленными в литературе экспериментальными данными.

CRACK PROPAGATION IN STRUCTURE COMPONENTS FROM METALLIC MATERIALS, SUBJECTED TO HYDROGEN MEDIA AND CYCLING

Tarakanov P.V., Romanov A.N., Shashurin G.V.

IMASH RAS, Moscow, Russia, pashabeetle@yandex.ru

Different crack propagation models in structure components, subjected to hydrogen media and cycling, have been developed. These models are based on the experimental data and valid only for examined steels and alloys. Experimental data represents a crack growth kinetic diagram of the examined metallic materials. Therefore developed models could not use for crack propagation estimation of the non-examined metallic materials.

A developed engineering model to estimate the crack propagation in structure components, which are subjected to hydrogen media and cycling, enables to obtain crack growth kinetic diagram for various structure components made from different steels and alloys. Calculated by authors crack growth kinetic diagram of structure component, which is made from high strength steel has a good correlation with existing experimental data.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛА ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ

Теличко А.В., Сорокин Б.П.

ФГБНУ “Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов”, Москва, г.о. Троицк, arseny.telichko@phystech.edu

Кристалл танталата лития (LiTaO_3) имеет обладает пьезоэффектом и широко используется в электронике и технике. Упругие постоянные 2-го порядка и линейные коэффициенты пьезоэффекта определялись в работе [1]. Однако, в отличие от изоморфного ему ниобата лития, чьи упругие постоянные 3-го порядка (УПЗП) и нелинейные коэффициенты пьезоэффекта достаточно давно изучены [2], аналогичные нелинейные электромеханические свойства танталата до сих пор не исследованы. Знание таких нелинейных коэффициентов позволяет создавать эффективные сенсоры давления, температуры и пр.

В данной работе импульсным методом [3] исследовалась зависимость изменения скоростей объемных акустических волн (ОАВ) в кристалле танталата лития от одноосного давления или постоянного электрического поля. Экспериментально определялись коэффициентам управления

$$\alpha_\tau = \frac{1}{v_0} \left(\frac{\Delta v}{\Delta \tau} \right)_{\Delta \tau \rightarrow 0},$$

где v_0 – скорость ОАВ в невозмущенном состоянии, $\Delta \tau$ - величина внешнего воздействия, Δv – изменение скорости. Из экспериментальных данных по изменению скоростей ОАВ под действием одноосного сжатия были определены независимые упругие постоянные 3-го порядка танталата лития. Из коэффициентов управления, полученных при воздействии постоянного электрического поля, определялись нелинейные коэффициенты пьезоэффекта.

Таблица 1. Упругие постоянные 3-го порядка танталата лития, 10^{11} Па.

C_{111}	C_{112}	C_{113}	C_{114}	C_{123}	C_{124}	C_{134}	C_{144}	C_{155}	C_{222}	C_{344}	C_{444}
-30±4	-9±1	-11±2	0±1	-3±2	2±22	19±125	-1±17	-8±17	-31±3	-11±1	-8±93

Таблица 2. Нелинейные коэффициенты пьезоэффекта танталата лития, Кл/м².

e_{211}	e_{222}	e_{255}	e_{311}	e_{312}	e_{344}
-14±9	-31±135	24±272	-5±6	-5±7	-3±13

Заметим, что ошибки определения некоторых сдвиговых УПЗП весьма значительна. Высокая погрешность обусловлена выбранным методом: прикладывая продольное давление мы пытались вычислить сдвиговые постоянные. Вклад в погрешность нелинейных коэффициентов пьезоэффекта вносили как погрешности УПЗП, так и погрешности определения коэффициентов управления, причем в большинстве случаев погрешность, связанная с неточностью определения α_τ оказывала преобладающее значение.

- [1] A. W. Warner, M. Onoe, and G. A. Coquin. Determination of elastic and piezoelectric constants for crystals in class (3m) // J. Acoust. Soc. Am., v. 42, p. 1223-1231, 1967.
 [2] Y. Cho, and K. Yamanouchi. Nonlinear, elastic, piezoelectric, electrostrictive, and dielectric constants of lithium niobate // J. Appl. Phys., v. 61, No 3, p. 875-886, 1987.
 [3] R. Truell, C. Elbaum, and B. B.Chick. Ultrasonic Methods in Solid State Physics. Academic, New York, 1969.

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДЕФЕКТОВ НА ГРАНИЦЕ СОЕДИНЕННЫХ ПЛАСТИН КРЕМНИЯ

А.Н. Терещенко¹, Э.А. Штейнман¹, А.А. Мазилкин¹, М.А. Хорошева¹,
Е.А. Кудренко, О. Конончук²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, эл. почта: tan@issp.ac.ru

²SOITEC, Parc Technologique des Fontaines, Bernin, France

Дислокации в кремнии являются эффективными центрами излучательной рекомбинации. Как было показано ранее, эффективность дислокационного излучения в области 0.8 эВ в пластически деформированных образцах Si может достигать 0.1% при комнатной температуре[1]. Для успешного применения дислокационной люминесценции (ДЛ) в целях оптоэлектроники требуется решение двух основных задач: выяснение природы излучательных центров, ответственных за длинноволновую часть ДЛ и нахождение технологичного пути введения дислокаций.

Одним из таких способов генерации дислокаций является метод прямого сращивания кремниевых пластин разориентированных друг относительно друга. Образующаяся при этом на границе соединения сетка дислокаций демонстрирует интенсивную люминесценцию, спектр которой сильно отличается от типичного спектра ДЛ даже при минимальных углах разориентации пластин [2]. Более того, такие структуры показывают сильную зависимость спектрального распределения интенсивности люминесценции от угла разориентации пластин (рисунок 1).

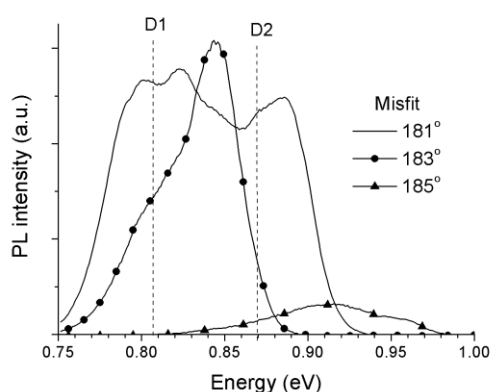


Рисунок 1. Спектры фотолюминесценции (при температуре 6К) образцов n-типа с различными углами разориентации кремниевых пластин (указаны на вставке к рисунку). Пунктирными линиями обозначены стандартные позиции линий D1 и D2 дислокационной люминесценции.

Данная работа посвящена комплексному исследованию дефектов, возникающих в процессе гидрофильного соединения пластин кремния с различными углами их разориентации. На основании данных, полученных методами фотолюминесценции (ФЛ), нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS), тока, индуцированного световым пучком (LBIC) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) обсуждается взаимосвязь плотности, типов, структурных особенностей дефектов с их излучательными свойствами.

Литература

- [1] V. Kveder, M. Badylevich, E. Steinman, A. Izotov, M. Seibt, W. SchrÖter, *Appl. Phys. Lett.*, **84** (12) 2106 (2004)
- [2] E. Steinman, A. Tereshchenko, O. Kononchuk, V. Vdovin, *Phys. Stat. sol. (c)* **10** (1) 16 (2013)

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-02-31771 мол_а)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСЕЙ В ИСХОДНОМ СЫРЬЕ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ ДЛИННОМЕРНЫХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ CsI

Тимошенко Н.Н.

*Институт сцинтилляционных материалов НАНУ, г. Харьков, Украина
tymoshenko@isma.kharkov.ua*

Целью работы является разработка высокоэффективной технологии выращивания совершенных и однородных по длине неактивированных монокристаллов CsI, используемых в калориметрах для физики высоких энергий, в частности BELLE-2 [1]. Проблемой кристаллов CsI является наличие дефектов и неконтролируемых примесей, благодаря чему в кинетике высвечивания появляется нежелательная длинная компонента [2]. Поскольку по мере роста монокристалла в нем всегда накапливаются посторонние примеси, то требование к чистоте исходного сырья является исключительно высоким.

Проведена классификация примесей и их влияния на качество длинномерных сцинтилляторов. Определен критерий качества исходного сырья для выращивания кристаллов (табл. 1).

Таблица 1

Предельное содержание контролируемых ионов

	Na ⁺	Tl ⁺	CO ₃ ²⁻
Концентрация, масс. %	<1×10 ⁻⁵	<1×10 ⁻⁵	<1×10 ⁻⁵

[1] A. Roodman. Heavy Scintillators for Scientific and Industrial Applications. Proc. Crystal 2000, Intern. Workshop, Chamonix, France, 1992, p. 479-486.

[2] N.V. Shiran, T.A Charkina, S.I. Vasetsky et al. Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1993, v.21, p.107-108.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ТОПОГРАФИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ

¹**В.А. Ткаль,** ²**А.О. Окунев,** ¹**И.А. Жуковская**

¹*Новгородский филиал Санкт-Петербургского государственного университета сервиса и экономики, 173025, Великий Новгород, ул. Кочетова, д.29, корп. 3, Россия*

²*Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, Россия, 173003, Великий Новгород, ул. Б. Санкт-Петербургская, 41*

e-mail: Valery.Tkal@yandex.ru

Эффективность цифровой обработки экспериментального контраста, содержащего дефекты структуры монокристаллов, оценивается специалистами в основном визуально. Объективность оценки зависит от выбранного метода и квалификации специалиста. Уменьшение субъективности при визуальной оценке качества анализируемого контраста достигается введением объективных количественных критериев.

В данной работе приводится сравнительный анализ различных методик оценки качества изображений: среднеквадратическое отклонение (MSE), пиковое отношение сигнала к шуму (PSNR), показатель структурного сходства (SSIM) и простая экспресс-оценка, основанная на построении разностного контраста (РК), яркостных характеристик (ЯХ) и профилей интенсивности (ПИ). Эффективность и объективность методик сравнивается на примере цифровой обработки различными вейвлетами зашумленных теоретических изображений основных типов структурных дефектов и экспериментальных топограмм.

Первые три метрики менее экспрессны и требуют проведения различных по сложности вычислений, причем наибольшая объективность достигается при применении метрики SSIM, у которой сравнение проводится по трем компонентам: сходности по яркости, по контрасту и структурному сходству. Наиболее простой оказалась четвертая методика, легко реализуемая в любом математическом программном пакете, например, «Image-Pro Plus 6.0» [1].

Если два изображения абсолютно одинаковые, то мы имеем нулевой РК и соответствующие ему нулевые ЯХ и ПИ, представляющие собой узкие вертикальные и горизонтальные линии. Если изображения имеют малейшие различия, не видимые визуально, то получаем ненулевой РК и соответствующие ему ЯХ и ПИ, сильно отличающиеся от аналогичных характеристик нулевого РК. За количественный критерий берутся максимальные значения ЯХ, которые представляют собой гистограмму анализируемого изображения.

Данная методика была успешно апробирована на топографических и поляризационно-оптических изображениях дефектов структуры различных монокристаллов, имеющих сильную фоновую неоднородность и подвергнутых с целью повышения их качества цифровой обработке различными вейвлетами, а также при сравнении эффективности различных цифровых методов обработки, при оценке искажений, вносимых цифровой обработкой, при сравнении изображений, представленных в 8-, 16- и 32-битном формате и т.д. Данная методика также была успешно применена при исследовании широкого круга биологических объектов [2].

[1]. Ткаль В.А., Окунев А.О., Жуковская И.А. Яркостный и частотный анализ изображений дефектов структуры. LAP LAMBERT Academic Publishing. Germany. 2012, 385 с.

[2]. Ткаль В.А., Шараева А.В., Жуковская И.А. Компьютерная диагностика качества. LAP LAMBERT Academic Publishing. Germany. 2012, 346 с.

ПОВЫШЕНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ВЕЙВЛЕТ-ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО КОНТРАСТА МОНОКРИСТАЛЛОВ

¹В.А. Ткаль, ²А.О. Окунев, ¹И.А. Жуковская

¹Новгородский филиал Санкт-Петербургского государственного университета сервиса и экономики, 173025, Великий Новгород, ул. Кочетова, д.29, корп. 3, Россия

²Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, Россия, 173003, Великий Новгород, ул. Б. Санкт-Петербургская, 41

e-mail: Valery.Tkal@yandex.ru

Рентгеновские методы и поляризационно-оптический анализ находят широкое применение при диагностике структурного совершенства монокристаллов и идентификации дефектов структуры. Цифровая обработка применяется для повышения качества экспериментального контраста, устранения основных зашумляющих его факторов и повышения надежности идентификации дефектов и их расположения в объеме монокристалла. Помимо этого важнейшим требованием является повышение экспрессности диагностики, которая определяется выбранным методом и алгоритмом цифровой обработки [1].

В данной работе на примере поляризационно-оптического контраста монокристалла 6H-SiC показана возможность устранения сильной фоновой неоднородности с помощью дискретного вейвлет-анализа и повышения быстродействия цифровой обработки в 10–12 раз.

В основе дискретного вейвлет-анализа лежит декомпозиция исследуемого контраста на уровни, число которых зависит от его размера. В результате этого получаются два вида коэффициентов, характеризующих частотный спектр изображения: масштабные коэффициенты содержат низкочастотные особенности, а детальные (диагональные, вертикальные и горизонтальные) – высокочастотные особенности. При старом подходе, подбирая оптимальную полосу пропускания фильтрации, обнуляя на всех уровнях декомпозиции масштабные коэффициенты, и далее работая только с детализирующими коэффициентами, можно при реконструкции (восстановлении) получить контраст, содержащий очищенные от шума изображения дефектов структуры. Недостатком этого подхода является наличие явления элайзинга, влияющего на контраст, формируемый дефектами структуры, и значительное время цифровой обработки (90–100 с.).

Повышение быстродействия вейвлет-обработки в 10–12 раз и устранение явления элайзинга достигается обнулением на всех уровнях декомпозиции не масштабных, а детализирующих коэффициентов. Обработка включает в себя 4 этапа [1, 2]:

1 этап – обнуление детализирующих коэффициентов и выделение после обработки только фоновой неоднородности;

2 этап – построение разностного контраста (РК) между исходным контрастом и полученным на первом этапе;

3 этап – гаусс-размытие РК (подбирается экспериментально);

4 этап – строится результирующий РК между размытым на 3 этапе и РК, полученным на 2 этапе. Для лучшей детализации контраста, формируемого дефектами структуры, экспериментально подбирается оптимальный динамический диапазон.

[1]. Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Ткаль В.А. Рентгеновская топография на основе эффекта Бормана. LAP LAMBERT Academic Publishing Germany. 2012, 341 с.

[2]. Ткаль В.А., Окунев А.О., Жуковская И.А. Яркостный и частотный анализ изображений дефектов структуры. LAP LAMBERT Academic Publishing. Germany. 2012, 385 с.

АНИЗОТРОПИЯ МИКРОТВЕРДОСТИ И МИКРОХРУПКОСТИ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

Торшина Е.С., Кугаенко О.М.

*Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»,
Москва
zzzz158@ya.ru*

Кристаллы семейства лантан – галлиевого силиката (ЛГС) представляют собой группу кристаллов, изоструктурных кальций – галлиевому германату ($\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{GeO}_{14}$) и принадлежат к классу симметрии 32 пространственной группы R_{321} . В последние 20 лет получение и применение кристаллов семейства лангасита (в настоящее время известно около ста его изоморфов) — наиболее динамично развивающееся направление в акустоэлектронике и пьезотехнике, что связано с уникальными пьезоэлектрическими свойствами монокристаллов. Актуальность работы определяется требованиями работоспособности кристаллов в экстремальных условиях эксплуатации при высоких механических нагрузках и термоударе.

В данной работе оценку механических свойств проводили методом измерения микротвердости по методу Кнупа (НК) и Виккерса (HV) и микрохрупкости при вдавливании алмазного индентора на полуавтоматическом микротвердомере Tukon® 2100B.

Метод микротвёрдости позволяет проводить диагностику кристаллов, изучать их анизотропию и получать данные о твёрдости отдельных фаз или структурных составляющих кристалла. Локальность воздействия определяет актуальность метода микротвердости в случае объектов небольших размеров, когда другим способом получить прочностные характеристики затруднительно.

Разработана методика измерения НК и HV для хрупких монокристаллов семейства лангасита ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$). Проведена статистическая обработка результатов измерений при доверительной вероятности $P=0,95$.

Результаты измерения микротвёрдости существенно зависят от кристаллографической ориентации и качества обработки исследуемой поверхности, выбора нагрузки на индентор, выбора длительности нагружения и выдержки под нагрузкой, правильного размещения отпечатков на исследуемом образце.

Обнаружена полярная анизотропия микротвердости I рода на базисной и призматических плоскостях монокристаллов ЛГС, достигающая от 10% до 20%, связанная с сопротивлением решетки внедрению индентора соответственно элементам симметрии решетки.

Обнаружено влияние атмосферы отжига (на воздухе и в вакууме) на анизотропию микротвердости II рода на основных кристаллографических плоскостях $(11\bar{2}0)$, $(10\bar{1}0)$, (0001) монокристаллов семейства лангасита.

Результаты расчетов показали, что наряду с анизотропией микротвердости для кристаллов ЛГС характерна анизотропия вязкости разрушения, что позволило определить направления и плоскости трещинообразования в монокристаллах семейства лангасита.

На монокристаллах КТГС анизотропия микротвердости не обнаружена, что позволяет учитывать этот факт в технологии изготовления и обработки кристаллических элементов и считать КТГС перспективным материалом акустоэлектроники.

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ
ВЫСОКОМАРГАНЦЕВЫХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЕЙ В ПРОЦЕССЕ
ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

Тукеева М.С., Мельников Е.В., Майер Г.Г., *Кошовкина В.С., Астафурова Е.Г.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук,
Томск, Россия*

**Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск,
Россия*

tms@ispms.tsc.ru

В работе методами оптической металлографии, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгеноструктурного анализа, микроиндентирования исследовано влияние тепловой интенсивной пластической деформации (ИПД) на эволюцию структурно-фазового состояния и микротвердость монокристаллов высокомарганцевых аустенитных сталей Fe-13Mn-1,3C, Fe-13Mn-2,7Al-1,3C и Fe-28Mn-2,7Al-1,3C (мас. %) с разной энергией дефекта упаковки $\gamma_{ДУ}$. В качестве метода ИПД использовали кручение под квазигидростатическим давлением (КГД). КГД проводили при давлении $P = 5-6$ ГПа при температуре 400°C ($0,4 T_{пл}$) на $N = 1, 3, 5$ оборотов.

Теплая деформация методом КГД приводит к формированию ультрамелкозернистой структуры в исследуемых Fe-Mn-(Al)-C сталях. В стали Fe-13Mn-1,3C (Гадфильда) с низкой $\gamma_{ДУ} = 0,03$ Дж/м² основными механизмами деформации при КГД выступают деформационное двойникование и образование полос локализованной деформации. Следует отметить, развитие двойникования происходит в структуре, искаженной предшествующим скольжением, так как критические напряжения двойникования растут при повышении температуры деформации. Помимо этого теплое КГД способствует процессам диффузии в стали Fe-13Mn-1,3C и приводит к выделению феррита (~15%) и ультрамелкодисперсных карбидов Me_3C размером ~ 5 нм при деформации на 5 оборотов.

Методом ПЭМ обнаружено, что фрагментация структуры стали Fe-13Mn-2,7Al-1,3C ($\gamma_{ДУ} = 0,045$ Дж/м²) происходит за счет образования кристаллитов, ограниченных мало- и большеугловыми границами общего типа, по аналогии с фрагментацией структуры ГЦК- и ОЦК-металлов, не склонных к механическому двойникованию, и двойниками деформации. По сравнению со сталью Fe-13Mn-2,7Al-1,3C, в монокристаллах Fe-28Mn-2,7Al-1,3C ($\gamma_{ДУ} = 0,06$ Дж/м²) двойниковая сетка менее искажена, двойники отчетливо наблюдаются методом ПЭМ. Отметим, что в сталях с повышенной $\gamma_{ДУ}$ наблюдаемые двойниковые границы образуются уже в деформированной и частично релаксированной структуре (непосредственно при кручении). Карбиды в данных сталях не обнаружены. Доля феррита после кручения уменьшается при легировании стали Гадфильда алюминием и марганцем. В стали Fe-13Mn-2,7Al-1,3C после $N=5$ она не превышает 10%, а в стали Fe-28Mn-2,7Al-1,3C структура после кручения аустенитная.

Теплое КГД приводит к росту микротвердости исследуемых сталей, при этом H_u слабо зависит от состава стали и линейно возрастает с деформацией: от 2,5 ГПа в исходном состоянии до 8,2 ГПа в стали Fe-13Mn-1,3C и до 7,5 ГПа в сталях Fe-13Mn-2,7Al-1,3C, Fe-28Mn-2,7Al-1,3C после КГД на 5 полных оборотов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (ГК № №14.132.21.1705 от 01.10.2012 г.; соглашение № 8749 от 01.10.2012).

ВЛИЯНИЯ β -ОБЛУЧЕНИЯ НА ПРОЦЕССЫ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ ЦГК ПРИ МИКРОИНДЕНТИРОВАНИИ.

Федоров В.А., Новиков Г.В.

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, г. Тамбов, РФ,
feodorov@tsu.tmb.ru

До настоящего времени не ослабевает интерес к исследованиям в области воздействия на ЦГК излучений различных флюенсов и энергий [1].

В качестве объекта исследования использовали кристаллы LiF с размерами $5 \times 5 \times 5$ мм, которые облучались в течение 1 часа со стороны плоскости (100) β -частицами. Энергия и флюенс β -частиц составляли соответственно 75 кэВ и $4,3 \cdot 10^{18}$ эл/м². Для оценки изменения механических свойств кристаллов использовали методы измерений микро- и нанотвердости.

Установлено, что в ЦГК при воздействии на поверхность (100) интенсивного β -излучения с энергией 50÷75 кэВ в последнем формируются тонкие поверхностные слои с иными механическими свойствами. Толщина слоя зависит от энергии излучения и времени его воздействия и колеблется в интервале 60-120 нм. При этом отмечено снижение модуля упругости тонких слоев на 30%, что связано с их аморфизацией за счет образования смещенных атомов (более 10% от поверхностных) и одновременно значительным повышением нанотвердости до 15-16 ГПа, что сопоставимо с нанотвердостью закаленной стали.

В облученных кристаллах при индентировании морфологические характеристики деформации и разрушения носят иной характер. При ориентации индентора $d \parallel \langle 110 \rangle$ (d - диагональ отпечатка) микротрещины не зарождаются, но формируется аномальный деформационный “крест”. Не выявляется явно плоскость, в которой развивается деформация. Следы выхода сдвигов на поверхность имеют дугообразный вид. Пластические сдвиги происходят за счет образования микросбросов. При смене ориентации индентора $d \parallel \langle 100 \rangle$ зарождение трещин происходит по плоскостям близким к $\{100\}$. Описанные картины деформации и разрушения наблюдаются в кристаллах, на поверхностях которых сформированы тонкие охрупченные слои (< 60 нм). В случае деформирования толстых охрупченных слоев (~120 нм) разрушается только тонкий поверхностный, охрупченный слой.

Таким образом, в ЦГК при индентировании поверхности облученного кристалла дислокационная пластичность затруднена за счет радиационных дефектов и упрочненных поверхностных слоев. В связи с этим происходит смена механизма деформации, от дислокационной пластичности к сбросообразованию, а зарождение микротрещин происходит по силовому механизму, обусловленному концентрацией напряжений под ребром индентора.

Список литературы

1. Астахов М. В. Влияние внешних воздействий на залечивание микротрещин. НАН Белоруссии. Монография. Перспективные материалы / Витебск: изд-во УО «ВГТУ», – 2009. – 548 с.

Благодарности:

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (проект № 12-01-00638) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 г.г.» (проект №14.В37.21.1161)

ВЛИЯНИЕ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА ХОД ДИАГРАММЫ РАЗГРУЗКИ АМОРФНЫХ И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВОВ

Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Сидоров С.А., Яковлев А.В.

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, г. Тамбов, РФ,
feodorov@tsu.tmb.ru

Известно, что в аморфных металлических сплавах имеет место структурная релаксация [1], которая, по-видимому, протекает и при нагреве аморфных сплавов, связанным с прохождением импульсного электрического тока. В связи с этим исследования влияния импульсных токов на ход кривых деформации и на структурное состояние является актуальной задачей.

Материалом для исследования служили ленточные аморфные металлические сплавы на основе кобальта и нанокристаллический сплав на основе железа. Размеры образцов 40x3,5x0,02 мм. Деформацию образцов проводили на машине Instron-5565. Во время разгрузки образца подавали импульсы тока плотностью $1 \cdot 10^8 - 5 \cdot 10^9$ А/м².

Обнаружено, что пропускание импульса электрического тока вызывает кратковременный сброс механического напряжения $\Delta\sigma$ с последующим полным восстановлением механического напряжения. При этом на диаграммах разгрузки аморфного сплава на основе кобальта после пропускания импульса восстановление механического напряжения сопровождается увеличением нагрузки.

Увеличения механического напряжения на диаграммах разгрузки, по-видимому, можно объяснить в рамках модели направленной структурной релаксации [3]. При пропускании импульса тока происходит нагрев образца ($\Delta T \sim 10-15$ К), вызывающий направленную структурную релаксацию, которая, по-видимому, на начальных стадиях носит обратимый характер. Ее вклад в общее удлинение образца постоянен для всех нагрузок, а относительная величина вклада уменьшается с ростом нагрузки. При механических нагрузках >700 МПа ее вклад практически не заметен.

Таким образом, скачкообразное увеличение нагрузки в образце после прохождения импульса тока, фиксируемого на кривых разгрузки, объясняется направленной структурной релаксацией, влияние которой существенно при $\sigma < 700$ МПа.

Список литературы

1. Глезер А.М., Пермякова И.Е., Громов В.Е., Коваленко В.В. Механическое поведение аморфных сплавов; – Новокузнецк: Издательство СибГИУ, 2006. – 416 с.
2. Сидоров С.А., Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Кириллов А.М., Яковлев А.В., Черникова А.А. Исследование процессов деформации аморфных сплавов в условиях импульсного электрического тока // Вестник Тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки. 2012 г. Том 17, Вып. 1, С 135 - 138.
3. Белявский В.И., Бобров О.П., Косилов А.Т., Хоник В.А. Направленная структурная релаксация и низкочастотное внутреннее трение свежезакаленных металлических стекол // ФТТ. 1996 г. Том 38, № 1., С. 30–40

Благодарности:

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (проект № 12-01-00638) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 г.г.» (проект №14.В37.21.1161)

ВЛИЯНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОТЯЖЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ

Феклисова О.В., Якимов Е.Б.

*Институт проблем технологии микроэлектроник и особочистых материалов РАН,
г. Черноголовка, Россия, feklisov@iptm.ru*

Дислокации и границы зерен являются основными структурными дефектами в мульткристаллическом кремнии, который используется для производства солнечных элементов. Эти дефекты оказывают существенное влияние на свойства mc-Si. Помимо структурных дефектов мульткристаллический кремний, как правило, содержит примеси переходных металлов в довольно высоких концентрациях. Известно, что электрическая активность протяженных дефектов существенно повышается при загрязнении их атомами переходных металлов, что может негативно сказаться на свойствах солнечных элементов. Более того, влияние примесей существенным образом зависит от типа границы зерен. Поэтому исследование поведения примесей переходных металлов и их взаимодействия с протяженными дефектами имеет не только научное, но и практическое значение. В настоящей работе методом наведенного тока (НТ) исследовалась рекомбинационная активность дислокаций и границ зерен в мульткристаллическом кремнии, и ее изменение при введении железа, меди или никеля.

В образцах мульткристаллического кремния, выращенного методом литья, дислокации и границы зерен выявлялись с помощью избирательного химического травления, а тип границ зерен определялся методом дифракции обратно рассеянных электронов в РЭМ. Образцы, на которых затем создавались барьеры Шоттки, исследовались методом НТ до и после диффузии примесей железа, меди или никеля.

В исходных образцах рекомбинационную активность проявляли только границы с неупорядоченной ориентацией. Активность дислокаций была ниже чувствительности метода НТ (~ 0.5%). В отличие от литературных данных, в исследуемых образцах контраст малоугловых границ также был ниже предела обнаружения. После введения металлов заметно возрастал контраст границ с неупорядоченной ориентацией и границ $\Sigma 27$, тогда как активность границ $\Sigma 3$, $\Sigma 9$ и дислокаций оставалась низкой. Показано, что влияние всех трёх примесей на границы зёрен качественно одинаково и ведёт к повышению контраста лишь тех границ, которые уже обладали рекомбинационной активностью до диффузии металлов. Поскольку слабое влияние металлов на рекомбинационную активность малоугловых границ противоречило результатам других работ, были проведены исследования образцов монокристаллического кремния с дислокациями, введенными при пластической деформации, железо в которые вводилось в одном цикле с образцами мульткристаллического кремния. В этих образцах дислокации не проявляли контраст в режиме НТ до диффузии, однако, после диффузии железа их контраст возрастал до 15-25%. Эти эксперименты показали, что при использованных условиях диффузии железо вводится в кристалл в достаточной концентрации и эффективно взаимодействует с введенными при пластической деформации дислокациями, в отличие от дислокаций в mc-Si. Слабое влияние металлов на рекомбинационную активность дислокаций в мульткристаллическом кремнии можно объяснить тем, что дислокации в таком материале уже насыщены примесями (например, кислородом и/или углеродом) либо присутствием весьма эффективных геттеров, захватывающих атомы металлов.

КИНЕТИКА ОТЖИГА ЦЕНТРОВ B_iO_i В КРЕМНИИ, ОБЛУЧЁННОМ ЭЛЕКТРОНАМИ С ВЫСОКОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Феклисова О.В., Ярыкин Н.А.

*Институт проблем технологии микроэлектроник и особочистых материалов РАН,
г. Черноголовка, Россия, feklisov@iptm.ru*

На протяжении уже довольно длительного времени радиационные дефекты в кремнии являются предметом многочисленных исследований, в результате которых были установлены основные типы дефектов, их структура и свойства, изучены механизмы их возникновения и взаимодействия друг с другом, а также с другими дефектами кристаллической структуры. Не смотря на это, до сих пор некоторые особенности реакций радиационных дефектов в кремнии являются предметом теоретических и экспериментальных исследований. Помимо традиционного практического интереса к радиационной стойкости элементной базы полупроводниковых приборов особое внимание к дефектам, образующимся при воздействии радиации, объясняется применением солнечных элементов на основе кремния в космосе. Частицы с высокой энергией приводят к формированию нежелательных центров рекомбинации и компенсации, которые ухудшают характеристики солнечных элементов и приводят, в конечном счете, к их деградации. Так, при облучении электронами с высокой энергией кремния p -типа, выращенного методом Чохральского, образуются доминирующие центры в верхней половине запрещенной зоны, которые были идентифицированы как комплекс междоузельного бора с кислородом (B_iO_i). Именно этот дефект приводит к нежелательной конверсии типа проводимости в облученных слоях p -Si, где основной легирующей примесью являются атомы бора. Этим обусловлен интерес к свойствам этого дефекта и поискам путей повышения радиационной стойкости кремниевых солнечных элементов.

Комплекс B_iO_i отжигается при температурах $130 \div 240^0$ C [1,2], однако процесс отжига и протекающие при этом реакции исследованы недостаточно. Анализ литературных данных показал, что, несмотря на близкие значения энергии активации (1.2 эВ), скорость отжига центров B_iO_i различается в вышеуказанных работах более чем на порядок. Это вызывает необходимость более тщательного изучения механизма отжига этого комплекса.

В данной работе кинетика отжига комплекса B_iO_i исследовалась в пластинах кремния, выращенных методом Чохральского с различным уровнем легирования бором.

Было обнаружено, что скорость отжига центров B_iO_i монотонно увеличивается с ростом концентрации бора в кристалле. Установлено, что энергия активации отжига также, по-видимому, не является универсальной величиной, т.к. измеренные в работе значения энергии (1.35 \div 1.41 эВ) оказались выше известных из литературы значений. Предложена модель, которая предполагает распад комплекса B_iO_i и дальнейшее взаимодействие междоузельного бора с атомами кислорода и узельного бора. На основе модели определена температурная зависимость скорости диссоциации комплекса B_iO_i . Полученное значение частотного фактора $\sim 10^{13}$ с⁻¹ однозначно свидетельствует о том, что отжиг B_iO_i комплекса происходит путём диссоциации.

Работа финансировалась программой Erasmus Mundus Action 2 MULTIC (грант 10-1309).

1. P.M. Mooney et al. Phys. Rev. B, **15**, 3836 (1977).
2. A. Khan et al. J. Appl. Phys., **90**, 1170 (2001).

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАСТВОРЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕЖДУ СТРУКТУРНЫМИ КОМПОНЕНТАМИ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЬФА-ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ СТЕСНЕННОЙ МЕГАПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В.П. Филиппова, А.А. Томчук,
Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии
им. И.П. Бардина, Москва, Россия
barbarapf@mtu-net.ru

Ю.А. Перлович, О.А. Крымская
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Москва, Россия
yuperl@mail.ru, olgakrym@mbox.ru

Были изучены механизмы перераспределения растворенных элементов между структурными компонентами сплавов на основе альфа-железа в условиях стесненной мегапластической деформации при деформировании в наковальне «Бриджмена» путем поступательно-вращательного движения, при комнатной температуре.

Установлено, что вследствие поглощения и перераспределения энергии в условиях стесненной деформации, в образцах твердого раствора на основе α -Fe возможны структурные изменения двух взаимно-исключающих видов: 1) увеличение количества дефектов структуры (скоплений дислокаций, границ зерен, и т.п.) и 2) уменьшение количества дефектов за счет динамической рекристаллизации (увеличение размеров зерен). На фоне структурных изменений наблюдается перераспределение растворенных элементов между матрицей и скоплениями дефектов.

Описываемые процессы исследовали методом рентгеновской дифрактометрии, основанном на анализе формы дифракционной линии и изменения положения ее максимума. Определение периода решетки твердого раствора на основе α -Fe и оценку дефектности структуры сплавов проводили по стандартной методике [1], с использованием линии (310) K_{β} , располагающейся в прецизионной области дифракционного спектра. При интерпретации полученных экспериментальных данных считали, что увеличение количества дефектов кристаллической структуры α -Fe, проявляющееся как увеличение полуширины рентгеновской линии, также вызывает перераспределение растворенных атомов между решеткой твердого раствора и областями концентрации дислокаций, что приводит к угловому сдвигу этой линии. Такое перераспределение типично для ОЦК металлов как следствие повышенной растворимости примесных атомов в областях с высокой искаженностью кристаллической решетки.

Концентрационные зависимости были получены с использованием полученных ранее данных по влиянию растворенных элементов (S, P, Mo, Ni, Cr, Al, Sn, V) на период решетки твердого раствора на основе α -Fe недеформированных сплавов [2]. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-02-00382.

Литературные ссылки:

1. Русаков А.А. Рентгенография металлов. - М.: Атомиздат, 1977. - 480 с.
2. V.P. Filippova. Considering the Body-Centered Cubic Lattice Parameter of α -Fe Alloys versus Concentrations of Solved Elements. - Journal of ASTM International. V.6, No 5, (2009), 9 p.

КОМБИНАТОРНО-ЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СТРУКТУР

Хаимзон Б.Б.

Кузбасская государственная педагогическая академия, г. Новокузнецк, Россия

khaimzon@yandex.ru

Построена новая теория структур, основанная на том, что любое дискретное преобразование симметрии структуры сводится к соответствующей перестановке элементов этой структуры. Эта теория применима к любым структурам, не только кристаллическим. Согласно этой теории, структура представляет собой совокупность узлов. Узел – это позиция, которую может занять какой-либо элемент объекта. Основные результаты теории.

1. Введено понятие типа узлов. Узлы, которые можно переставлять друг с другом, так что объект при этом не меняется, относятся к одному типу узлов.

2. Дано определение понятия “структура”.

3. Структуре однозначно сопоставлена структурная группа – группа допустимых перестановок узлов.

4. Показано, что структуры разных объектов являются одинаковыми, если они состоят из узлов одинаковых типов.

5. Введена структура общего вида, в которой все узлы структур данной совокупности, которые могут иметь разный тип, в действительности являются узлами разного типа.

6. Построена классификация узлов структуры общего вида.

7. Введена первичная симметрия – симметрия структуры общего вида относительно перестановок ее узлов.

8. Введено понятие структурной единицы.

9. Дано определение уровня иерархии структурной единицы и структуры в целом.

10. Определено, что означает “одна структура является частным случаем другой”.

11. Показано, как классифицировать структуры, в какие совокупности объединяются структуры.

12. Предложена универсальная система обозначений, позволяющая единым образом описать все структуры данной совокупности.

13. Разработана методика теоретического вывода всех возможных структур заданной совокупности.

14. Введены особые логические функции, позволяющие описать эквивалентность узлов друг другу, их первичную симметрию и симметрию узлов конкретной структуры.

15. Каждой структуре данной совокупности сопоставлена специальным образом сконструированная логическая формула, составленная из этих функций.

16. Показано, что существует два способа реализации структур – структура компонентов и структура состояний. Эти структуры могут быть как соответствующими друг другу, так и независимыми.

17. Разработана методика определения структуры данной конкретной реализации.

18. Предложена методика перебора различных структур компонентов, соответствующих структурам данной совокупности.

19. Показано, что конкретной реализации структуры компонентов однозначно соответствует многозначная по числу компонентов логическая функция от типов узлов структуры общего вида.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ВЫВОД ВОЗМОЖНЫХ СВЕРХСТРУКТУР

Хаимзон Б.Б.

Кузбасская государственная педагогическая академия, г. Новокузнецк, Россия

khaimzon@yandex.ru

Задача теоретического вывода всех возможных сверхструктур на основе заданной решетки была поставлена А. Г. Хачатуряном. В методе А. Г. Хачатуряна на возможные комбинации сверхструктурных векторов накладывались очень жесткие условия, и сверхструктур оказалось немного. В работах Э. В. Козлова с соавторами показано, что большая часть этих условий является излишней. Однако и в этих работах на сверхструктурные векторы и их комбинации накладывались определенные условия. Доказательство необходимости этих условий основывалось на рассмотрении полностью упорядоченных сверхструктур, в которых функция распределения принимает только два значения: 0 и 1. Затем эти условия распространялись на не полностью упорядоченные сверхструктуры. В [1] отмечено, что это условие так же является излишним. Поэтому все оставшиеся условия на сверхструктурные волновые векторы также исчезают. В [1] предложена идея другого пути теоретического вывода сверхструктур. Фиксируются тип решетки, периоды и симметрия возможных сверхструктур. Это позволяет определить все типы узлов структурного типа общего вида. Затем производится вывод всех возможных структурных типов. Метод этого вывода является чисто комбинаторным и не связан непосредственно с концентрационными волнами.

В настоящей работе этим методом произведен полный теоретический вывод всех одномерных структур. Пусть на одномерной цепочке узлов образована структура с периодом L . Возможны следующие случаи.

1. L – четный, структура центросимметричная, центр симметрии совпадает с одним из узлов. Тогда число подрешеток $L/2 + 1$, число параметров порядка $L/2$. Им соответствует $L/2$ сверхструктурных векторов $((1/L), (2/L), \dots, (1/2))$.

2. L – четный, структура центросимметричная, центр симметрии находится в середине между узлами. Число подрешеток $L/2$, число параметров порядка $L/2 - 1$. Им соответствует $L/2 - 1$ сверхструктурных векторов $(1/L), (2/L), \dots, ((L/2 - 1)/L)$. Сверхструктурный вектор $1/2$ все равно реализуется, но только в волне смещений.

3. L – нечетный, структура центросимметричная, центры симметрии чередуются – в узле и в середине между узлами. Тогда число подрешеток $(L + 1)/2$, число параметров порядка $(L - 1)/2$. Им соответствует $(L - 1)/2$ сверхструктурных векторов $(1/L), (2/L), \dots, ((L - 1)/2L)$.

4. L – любой, структура не центросимметричная. Число подрешеток равно L , число параметров порядка $L - 1$. Звезды сверхструктурных векторов при четном L $(1/L), (2/L), \dots, (1/2)$ и при нечетном L $(1/L), (2/L), \dots, ((L - 1)/2L)$. В первом случае двум противоположным векторам звезд $(1/L), (2/L), \dots, ((L - 2)/2L)$ соответствуют разные параметры порядка, а вектору $(1/2)$ – еще один. Во втором случае двум противоположным векторам всех звезд соответствуют два разных параметра порядка. При этом реализуются и волны концентрации, и волны смещений, но разность фаз этих волн произвольная [1].

Таким образом, всем возможным одномерным структурам с одинаковым периодом соответствует одинаковый набор сверхструктурных волновых векторов.

1. Хаимзон Б. Б., Потекаев А. И., Паскаль Ю. И. Волны концентрации и смещений. Общий анализ // Изв. вузов, Физика. – 1993. - № 6. – С. 3-19.

СКРЕТЧ-ТЕСТ: МОДЕЛЬ И РЕАЛЬНОСТЬ

Мартин Хесс*, Могильников Ю.В.

* *CSM Instruments, Freiburg, Germany, deinfo@csm-instruments.com*

ООО «Ниеншанц-Сантифик», Санкт-Петербург, Россия, mogilnikov@nnz.ru

Скретч-тест или измерительное царапание – новый метод определения адгезии покрытий, стойкости к царапанию и «времени жизни» покрытия, в настоящее время приходит на смену таким классическим методам, как метод удара, царапания минералами известной твердости, тест шлифовальной бумагой, тестирование липкой лентой или определение адгезии по трещинам после теста на твердость по Роквеллу.

Современные методы нанесения покрытий требуют не менее современных методов определения и предсказания адгезии и качества покрытий. Процесс автоматизированного царапания реализован во множестве современной аппаратуры, однако, для корректного определения адгезии требуется тщательный подбор геометрии царапающего индентора (радиуса закругления) и прилагаемой нагрузки, для достижения максимального напряжения именно на границе покрытие/субстрат.

Для решения данной задачи использовалось программное обеспечение Scratch-Stress Analyzer, разработанное в Saxonian Institute of Surface Mechanics и позволяющее моделировать и анализировать распределение напряжений при растяжении (σ T S) и сдвиге (τ) в системе покрытие/субстрат с учетом фактических параметров твердость, модуль упругости, коэффициент Пуассона, толщина. Физические измерения критических нагрузок разрушения покрытий проводились на Макро- и Микро-скретч-тестерах компании CSM Instruments. Также проводилось сравнение моделей и результатов скретч-теста на покрытиях и субстратах с различной твердостью и модулем упругости.

Исследование нескольких покрытий с использованием инденторов различного радиуса и моделирование распределения напряжений показало не только отличную возможность подбора формы индентора и параметров проведения скретч теста, но и доказало применимость модели Герца для анализа распределения напряжений, и как следствие оценки адгезии покрытия.

Использование модели распределения напряжений (модель Герца) в ходе индентирования или скретч-теста позволяет проводить подбор индентора и параметров скретч теста в зависимости от толщины покрытия, твердости и модуля упругости субстрата и покрытия, а корреляция модели и результатов тестирования на реальных покрытиях позволяет предсказать поведение покрытия при нагрузке.

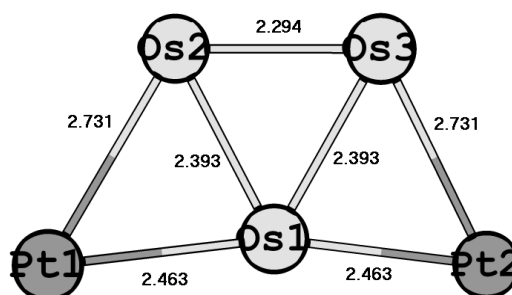
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРА Pt₂Os₃

Храпковский Г.М., Гарифзянова Г.Г.

ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия, garifz@kstu.ru

Кластеры, в которых атомы платины соединены с атомами палладия, иридия или осмия представляют интерес как экспериментальных, так и теоретических исследований, в качестве наноматериалов в катализе. Взаимодействием Pt(PBu^t₃)₂ с Os₃(CO)₁₂ было получено соединение Pt₂Os₃(CO)₁₂(PBu^t₃)₂, анализ которого был проведен методом рентгеновской дифракции [1].

Нами был оптимизирован биметаллический нанокластер Pt₂Os₃ с использованием DFT методов с различными базисными наборами. Теоретическое исследование проводилось с использованием пакета программ Gaussian 09. На рисунке представлена структура кластера Pt₂Os₃ (метод B3LYP/LanL2DZ), имеющая форму искаженной трапеции:



Полученные различными методами расчетные геометрические параметры данного кластера в состоянии с мультиплетностью 1 приведены в таблице 1.

Таблица 1

Геометрические параметры кластера Pt₂Os₃ с мультиплетностью 1 (длины связей в Å)

Метод	r(Pt1-Os1)	r(Pt2-Os1)	r(Pt1-Os2)	r(Pt2-Os3)	r(Os2-Os1)	r(Os2-Os3)	r(Os2-Os1)
B3LYP/LanL2DZ	2.463	2.463	2.731	2.731	2.393	2.393	2.294
B3LYP/CEP-121G	2.497	2.497	2.653	2.653	2.378	2.378	2.302
B3PW91/LanL2DZ	2.459	2.459	2.680	2.680	2.375	2.375	2.288
B3PW91/CEP-121G	2.483	2.483	2.619	2.619	2.360	2.360	2.289
B3PW86/LanL2DZ	2.505	2.462	2.531	2.520	2.489	2.544	2.231
B3PW86/CEP-121G	2.480	2.480	2.614	2.614	2.358	2.358	2.287
Эксперимент [1] в соед. Pt ₂ Os ₃ (CO) ₁₂ (PBu ^t ₃) ₂	2.848	2.853	2.804	2.795	2.938	2.863	2.911

Как видно из таблицы 1, все методы (кроме B3PW86/LanL2DZ) дают три пары с одинаковыми значениями длин связей. В комплексе Pt₂Os₃(CO)₁₂(PBu^t₃)₂ это не наблюдается вследствие наличия различных заместителей у атомов платины и осмия. Расчетные значения длины связи Os-Os меньше, чем значения длин связей Pt-Os, в экспериментальных данных наблюдается обратная картина.

[1] R. D. Adams, B. Captain, Lei Zhu *Inorganic Chemistry*, Vol. 45, № 1, 430-436 (2006).

АЛМАЗОПОДОБНЫЕ НАНОКОМПОЗИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ а-C:H:Cr – СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ, МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Хрущов М.М.¹, Атаманов М.В.², Марченко Е.А.¹, Петржик М.И.,³ Левин И.С.^{1,4}

¹ИМАШ РАН, Москва, Россия, ²ЗАО «ИНАКОТЕК», Москва, Россия,

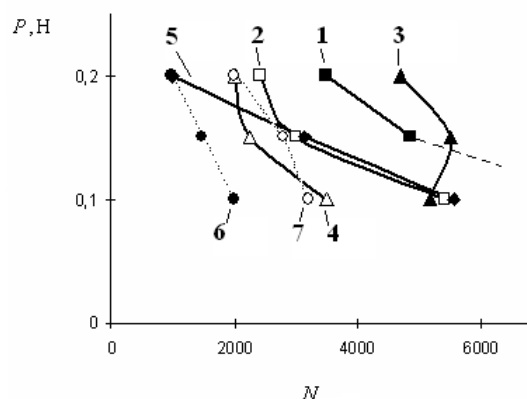
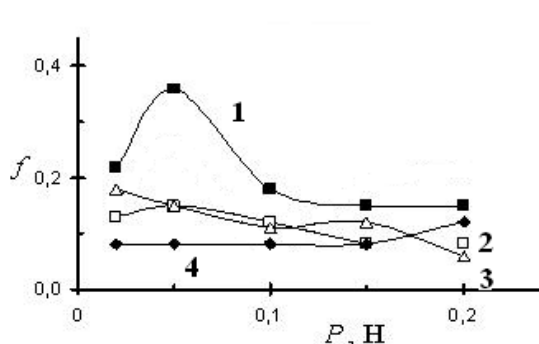
³НИТУ «МИСиС», Москва, Россия, ⁴МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

michel_x@mail.ru

Приводятся результаты комплексного исследования структуры, фазового и химического состава, микротвердости, наномеханических и трибологических свойств легированных хромом покрытий гидрогенизированного аморфного углерода а-C:H:Cr, полученных магнетронным распылением хрома в смеси Ar+C₂H₂+N₂ при различных содержаниях азота и ацетилена.

Установлено, что аморфный углерод в покрытиях а-C:H:Cr имеет алмазоподобную неупорядоченную структуру во всем изученном диапазоне составов активной атмосферы и представляет собой неупорядоченную смесь областей с тетраэдрической (sp³) и гексагональной (sp²) координацией углеродных атомов. Структура покрытий является наноккомпозитом и содержит помимо аморфного углерода наноразмерные включения металлического хрома и его карбидных и нитридных фаз. При этом формирование в покрытиях а-C:H:Cr дополнительно к наноструктурированной карбидной фазе включений нитрида хрома приводит к повышению механических и трибологических свойств.

Результаты трибологических испытаний представлены на рисунках.



Коэффициент трения а-C:H:Cr на подложке из ХН35ВТ, как функция содержания ацетилена (1 – 100; 2 – 80; 3 – 40; 4 – 20 об.% C₂H₂) в активной смеси при магнетронном напылении покрытий.

Зависимость от нагрузки числа циклов N, при котором возникает нестабильность коэффициента трения (1 – 100; 2 – 80; 3 – 60; 4 – 40; 5 – 20 об.% C₂H₂; 6 – ХН35ВТ; 7 – ШХ15).

Их анализ позволяет предположить возможное наличие области оптимальных с точки зрения трибологических свойств составов активной атмосферы ацетилена с азотом.

Таким образом, использование для легирования алмазоподобных покрытий хрома являются одним из перспективных направлений для создания триботехнических покрытий-наноккомпозитов с высокими противоизносными и антифрикционными свойствами. Магнетронная технология для создания легированных хромом наноккомпозитных покрытий, использующая в качестве активной атмосферы углеводороды в газообразном состоянии и смеси на их основе, в частности, смесь ацетилен-азот, представляет значительный интерес с точки зрения её практического использования в узлах трения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-08-00802).

БИСЛОЙНЫЕ ГЕКСАГОНАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ, СОЕДИНЕННЫЕ С НАНОТРУБКАМИ: ГЕОМЕТРИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Чернозатонский Л.А., Демин В.А.

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, г.Москва,
Россия, demin v a@mail.ru*

В докладе представлены исследования соединений фрагментов бислойных структур с нанотрубками из гексагональных 2D материалов (графен G, гексагональный нитрид бора *h*-BN).

Предполагаемый метод получения: в бислойном материале делаются периодически расположенные отверстия с зигзагообразными краями (например, электронным лучом), которые ковалентно соединяются между собой. В результате получаемая структура является соединением нанотруб и двухслойных фрагментов с закрытыми краями. Такие квазидвумерные кристаллические структуры, состоящие полностью из sp^2 -гибридизированных атомов, отличаются от простого бислоя электронными и механическими свойствами.

Рассмотрены следующие соединения (n,n) нанотруб с бислойной структурой:

1. Углеродные нанотрубы, соединенные с биграфеновыми участками (появление запрещенной зоны в электронном спектре в отличие от биграфена).
2. G-*h*-BN бислой, соединенный с G-*h*-BN нанотрубками (в электронном спектре проявляются особенности графеновой наноленты, из которой состоит половина нанотрубы).
3. Соединения нанотруб с бислоем из *h*-BN материала (каркасная структура делает систему более жесткой по сравнению с бислоем).

Расчеты геометрии и электронных свойств проведены методом теории функционала плотности в рамках программного пакета Siesta.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕЖИМОВ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

Чувильдеев В.Н., Благовещенский Ю.В.⁽¹⁾, Болдин М.С., Сахаров Н.В.,
Нохрин А.В., Исаева Н.В.⁽¹⁾, Лопатин Ю.Г., Шотин С.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
г. Нижний Новгород, Россия, nokhrin@nifti.unn.ru

¹⁾ Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва, Россия

В качестве исходных материалов были использованы нанопорошки карбида вольфрама с различным начальным размером частиц (R_0) и объемной долей (f) частиц монокарбида WC, полученные методом плазмохимического синтеза (сер.№1: $R_0=46$ нм, $f=83.5\%$; сер.№2: 55 нм, 91.7%; сер.№3: 63 нм, 93.6%; сер.№4: 113 нм, 83.5%; сер.№5: 72 нм, 100%; сер.№6: 80 нм, 100%). В качестве образца сравнения использовался промышленной порошок монокарбида вольфрама фирмы «H.C. Starck» ($R_0=112$ нм).

Электроимпульсное плазменное спекание (ЭИПС) осуществлялось на установке «Dr.Sinter model SPS-625» в интервале температур от 1400 до 1950 °С со скоростью нагрева (V) от 25 до 2400 °С/мин при давлении (P) 60 и 75 МПа в вакууме 4 Па.

При помощи dilatометра, входящего в комплект установки, определялась зависимость скорости усадки порошков от температуры нагрева, и, в том числе, температура T_1 , соответствующая началу процесса «припекания» частиц друг к другу, и температура T_2 , соответствующая окончанию процесса усадки порошка и полному диффузионному «рассасыванию» пор.

Показано, что зависимость $T_2(R_0)$ определяется характером роста частиц карбида вольфрама в условиях нагрева. Увеличение R_0 в композициях состоящих полностью из монокарбида вольфрама ($f=100\%$) от 72 нм до 112 нм приводит к увеличению T_2 от 1490 °С до 1515 °С и к уменьшению плотности материала от 98.0 % до 99.7 %. ($V=25$ °С/мин, $P=75$ МПа). В случае композиций с $f=83.5-99.7\%$ зависимость $T_2(R_0)$ имеет немонотонный характер – увеличение R_0 от 46 до 63 нм приводит к повышению T_2 от 1420 до 1520 °С, а при дальнейшем увеличении R_0 до 113 нм T_2 уменьшается до 1380 °С. При этом плотность образцов с меньшим R_0 (46-63 нм) оказывается меньше плотности образцов, спеченных из более крупнозернистых (72-112 нм) композиций с $f=100\%$.

Следует отметить, что в образцах полученных из композиций с $f=83.5-99.7\%$ наблюдается аномальный рост зерен. При этом увеличение f от 83.5% до 99.7% приводит к увеличению среднего размера аномально крупных зерен от 3 до 17 мкм. При ЭИПС композиций с $f=100\%$ наблюдается нормальный рост зерен и формируется однородная ультрамелкозернистая (0.15-0.3 мкм) структура.

Выявлено, что ЭИП-спекание нанопорошков карбида вольфрама в условиях высокоскоростного нагрева происходит при более низких температурах $T_2 = 1380-1520$ °С, что соответствуют $\sim 0.53-0.57T_m$ ($T_m=3143$ К – температура плавления карбида вольфрама), чем в условиях квазистационарного нагрева.

Показано, что полученные образцы карбида вольфрама обладают исключительно высокой твердостью (H), демонстрируя при этом оптимальное сочетание твердости и трещиностойкости « H/K_{Ic} ». При $V<100$ °С/мин наблюдается повышенная K_{Ic} при меньших значениях твердости ($H=24.2$ ГПа, $K_{Ic}=6.7$ МПа·м^{1/2}, 25°С/мин, 60 МПа), и повышенная твердость при снижении трещиностойкости ($H=31.1$ ГПа, $K_{Ic}=5.2$ МПа·м^{1/2}, 2400°С/мин, 60 МПа). Спекание при $T=1550$ °С (25 °С/мин, 75 МПа) позволяет получать образцы с $H=34$ ГПа и $K_{Ic}=4.3$ МПа·м^{1/2}.

В работе предложена качественная модель низкотемпературного спекания нанопорошковых композиций в условиях высокоскоростного нагрева в условиях нормального и аномального роста частиц карбида вольфрама.

Работа выполнена при поддержке РФФИ и Министерства образования и науки РФ.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И.⁽¹⁾

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний
Новгород, Россия, chuvildeev@nifti.unn.ru*

¹⁾ *Физико-технический институт НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь*

В работе предложена модель, позволяющая анализировать влияние температуры РКУП на величину предела измельчения зерен металлов и сплавов. В основе этой модели лежит идея о том, что процесс фрагментации структуры осуществляется под действием мощных полей внутренних напряжений, создаваемых стыковыми дисклинациями. В модели сделано предположением, что при ИПД протекает альтернативный (по отношению к фрагментации) механизм аккомодации стыковых дисклинаций – диффузионный массоперенос, приводящий к уменьшению мощности стыковых дисклинаций. Показано, прекращение фрагментации при РКУП обусловлено тем, что при малых размерах фрагментов, интенсивность диффузионной аккомодации стыковых дисклинация становится очень высокой. Вследствие быстрой диффузионной аккомодации мощность стыковых дисклинаций не может достичь критической величины, необходимой для начала фрагментации и фрагментация прекращается, т.е. диффузионная аккомодация при малых d оказывается более эффективным механизмом снижения свободной энергии системы, чем фрагментация.

Получены выражения, описывающие зависимость величины предела измельчения зерен от скорости и температуры РКУП. Показано, что в зависимости от температуры РКУП, определяющей интенсивность одновременного протекания процессов диспергирования зерен и процессов возврата, диффузионные свойства границ зерен могут быть близки как к диффузионным свойствам расплава, так и к диффузионным свойствам равновесных границ зерен. Установлено, что характер зависимости энергии активации зернограничной диффузии от температуры РКУП определяется кинетикой протекания конкурирующих процессов накопления дефектов на границах зерен при РКУП и их диффузионной аккомодацией.

В работе проведен анализ влияния температуры РКУП на закономерности протекания процессов возврата и рекристаллизации, а также условия выполнения соотношения Холла-Петча в СМК металлах.

Показано, что в случае накопления на границах зерен СМК металлов избыточной плотности дефектов и высокой диффузионной проницаемости границ зерен, в СМК материалах в состоянии после РКУП наблюдаются низкие значения коэффициента зернограничного упрочнения K в соотношении Холла-Петча. Зависимость предела текучести от размера зерна при этом имеет аномальный характер. Если же плотность дефектов в границах зерен СМК металлов мала, то зависимость предела текучести от размера зерна может быть описана с помощью соотношения Холла-Петча.

Показано, что характер процесса рекристаллизации существенно зависит от начального структурного состояния границ зерен СМК металлов. В случае высокого уровня неравновесности границ зерен наблюдается аномальный рост зерен и низкие значения энергии активации. В случае же малой плотности дефектов в границах зерен СМК материалов, наблюдается нормальный рост зерен, а диффузионные свойства мигрирующих границ зерен близки к равновесным.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, а также ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» и ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы».

ВЛИЯНИЕ РКУ-ПРЕССОВАНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ СПЛАВОВ И СТАЛЕЙ

Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И.⁽¹⁾, Бахметьев А.М.⁽²⁾, Сандлер Н.Г.⁽²⁾, Тряев П.В.⁽²⁾, Козлова Н.А., Лопатин Ю.Г., Мелехин Н.В., Грязнов М.Ю.⁽³⁾, Кузин В.Е., Бутусова Е.Н.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия, nokhrin@nifti.unn.ru

¹⁾ Физико-технический институт НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь

²⁾ ОАО «ОКБМ Африкантов», г. Нижний Новгород, Россия

³⁾ Институт проблем машиностроения РАН, г. Нижний Новгород, Россия

Целью работы является поиск путей решения задачи одновременного повышения прочности и стойкости к особым видам коррозии конструкционных сплавов и сталей, широко используемых в атомном машиностроении и ядерной энергетике, за счет формирования в них субмикроструктурной (СМК) структуры методом равноканального углового прессования (РКУП).

В качестве объектов исследования выступали СМК сплавы ПТЗВ (Ti-4.7Al-1.8V) и ПТ7М (Ti-2.5Al-2Zr), а также аустенитная сталь 08X18H10T (Fe-0.04C-17.3Cr-9.4Ni-0.3Ti), структура в которых получена методом РКУП при температуре 150-475 °С.

В работе описаны результаты исследований влияния числа циклов РКУП на стойкость СМК сплавов и сталей к общей и межкристаллитной коррозии, а также коррозионной усталости. Показано, что зависимость скорости общей коррозии от числа циклов РКУП имеет немонотонный (с минимумом) характер, в то время как стойкость сплавов и сталей против межкристаллитной коррозии и коррозионной усталости монотонно увеличивается с числом циклов РКУП.

Показано, что управление структурой с использованием метода РКУП позволяет в сплаве ПТЗВ сформировать термически-стабильную СМК структуру с высокими механическими свойствами (предел текучести $\sigma_T=1100-1150$ МПа, предел прочности $\sigma_B=1200-1250$ МПа, пластичность $\delta=47.5-50\%$), обладающая высоким уровнем коррозионной стойкости. Установлено, что стойкость к горячесолевым межкристаллитной коррозии СМК сплава ПТЗВ в 4-6 раз выше, а число циклов до зарождения коррозионно-усталостной трещины в 8-9 раз выше, чем аналогичные параметры для обычного сплава ПТЗВ. При этом СМК сплавы обладают эффектом сверхпластичности - с повышением температуры деформации от 600 до 800 °С (скорость деформирования 10^{-2} с^{-1}) в СМК сплаве ПТЗВ наблюдается уменьшение σ_B от 165 МПа до 70 МПа с одновременным повышением δ от 225% до 475%. При температуре деформации 700 °С коэффициент скоростной чувствительности составляет $m=0.55$.

В работе представлены результаты исследований структуры, механических свойств и коррозионной стойкости СМК аустенитной стали 08X18H10T. Показано, что использование РКУП позволяет повысить в 1.5-2.5 раза прочность, обеспечить реализацию эффекта сверхпластичности и в 1.5-2 раза повысить стойкость стали к межкристаллитной коррозии. Установлено, что масштаб повышения прочности и стойкость к межкристаллитной коррозии при РКУП определяется одновременным протеканием процессов измельчения зеренной структуры, а также деформационно-стимулированного распада аустенита и выделением частиц карбидов.

В работе предложена модель эволюции структуры сплавов и сталей при РКУП, позволяющая, в частности, объяснить причины одновременного повышения прочности и коррозионной стойкости в СМК материалах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, а также ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» и ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы».

ВЛИЯНИЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫХ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОТЖИГОВ НА ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Копылов В.И.⁽¹⁾, Лопатин Ю.Г., Мелехин Н.В., Сахаров Н.В., Пирожникова О.Э., Грязнов М.Ю.⁽²⁾, Козлова Н.А., Пискунов А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
г. Нижний Новгород, Россия, nokhrin@nifti.unn.ru

¹⁾ Физико-технический институт НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь

²⁾ Институт проблем машиностроения РАН, г. Нижний Новгород, Россия

В работе проведен анализ влияния предварительных дорекристаллизационных отжигов на термическую стабильность структуры субмикроструктурных (СМК) металлов, полученных методом равноканального углового прессования (РКУП).

Показано, что зависимость температуры начала рекристаллизации (ТНР) и интенсивности разупрочнения СМК металлов от времени вылежки (t) при комнатной температуре имеет немонотонный характер – при $t < t_1$ вылежки наблюдается повышение ТНР и уменьшение интенсивности разупрочнения СМК металла при его отжиге. Дальнейшее повышение времени вылежки приводит к уменьшению ТНР СМК металла.

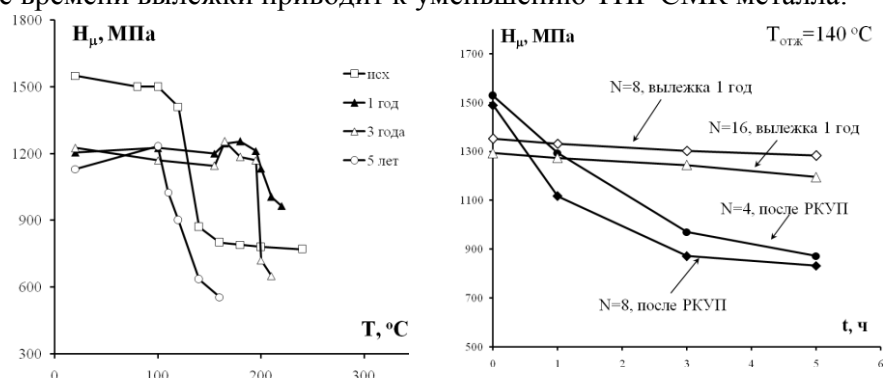


Рисунок 1. Влияние вылежки при комнатной температуре на термической стабильности СМК меди М1: а – зависимость микротвердости от температуры отжига после РКУП и после вылежки при комнатной температуре различной длительности; б - зависимость микротвердости от времени отжига при $T=140$ °C в состоянии после РКУП и в состоянии после РКУП и вылежке при комнатной температуре в течение 1 года.

Установлено, что зависимость ТНР СМК металлов от температуры и времени дорекристаллизационного отжига имеет двухстадийный характер. Выдержка СМК металлов при температуре $T_{отж} < T_1$ приводит к незначительному повышению ТНР. Дальнейшее повышение температуры выдержки ($T_1 < T_{отж} < T_r$) приводит к уменьшению ТНР СМК металла. (Здесь T_r – температура рекристаллизации неотожженного СМК металла). Установлено, что T_1 зависит от температуры РКУП и размера зерна СМК металла. Показано, что во всем низкотемпературная дорекристаллизационная обработка приводит к монотонному уменьшению механических свойств СМК металла.

В работе определены оптимальные режимы термической обработки СМК сплавов, позволяющие уменьшить скорость роста дисперсных частиц на границах зерен и расширить температурный интервал стабильности механических свойств.

Для объяснения наблюдаемых закономерностей в работе предложена модель влияния низкотемпературных отжигов на температуру старта миграции границ зерен СМК сплавов. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, а также ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» и ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы».

Кристаллофизические модели некоторых ацентрических кристаллов

Ю.В.Шалдин

ФГБУН Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН

Россия, 199333 Москва Ленинский пр.59

Международная лаборатория СМП и НТ Poland, Wroclaw 53-421u.Gajowicka 95

e-mail: yuri1999@rambler.ru

Теоретические подходы описания физических свойств кристаллических сред основываются на представлении об идеальности структуры кристаллов, подчиняющейся определенным симметричным соображениям. Несмотря на все облегчения, которые вносит симметрия, построение полной теории основного объекта физики твердого тела – идеального кристалла – далека от завершения. На данный момент теория идеального кристалла базируется на рассмотрении кристаллохимической модели структуры. Основной принцип построения сводится к выделению в идеальном кристалле ряда подсистем с конечным числом коллективных степеней свободы. Так, в качестве основных элементов структуры ацентрических кристаллов могут быть выбраны тетраэдры и их комбинации. Такой взгляд на структуру согласуется с кристаллофизическим подходом, поскольку тетраэдр дает наиболее наглядное представление о неэквивалентности взаимно противоположных направлений как условия утраты средой симметрии относительно инверсии (рис.1).

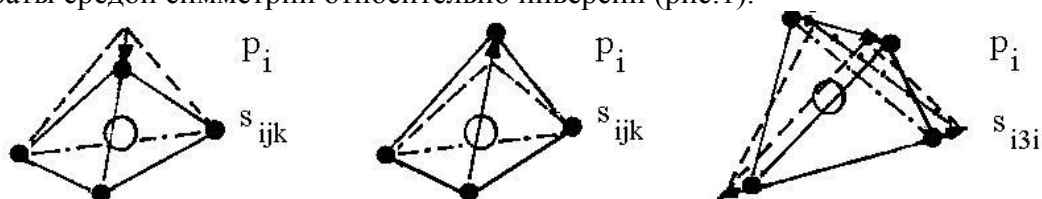


Рис.1

Структурные особенности пьезоэлектрических сред, материализующиеся в виде комбинаций тетраэдров, можно описать вводя в рассмотрение математические величины, следующие из разложения полярного тензора 3-го ранга на подпространство векторов P , псевдоскаляров Q и септоров S , которым должны соответствовать мультипольные моменты [1] (рис.2).

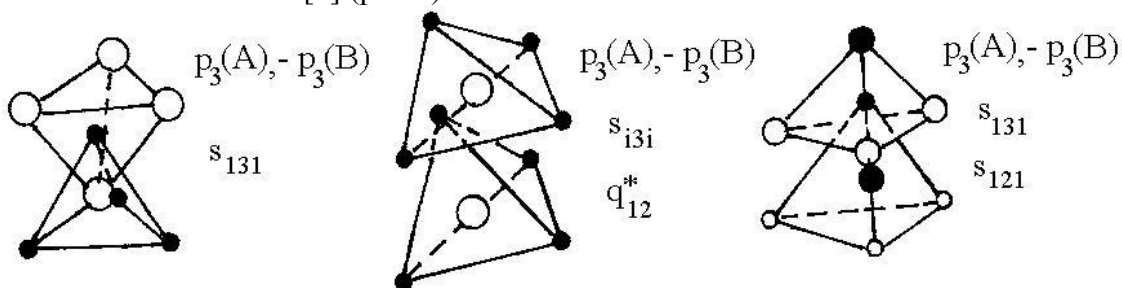


Рис.2

Результаты разложения полярного тензора 3-го ранга дают возможность подвести математическую базу под классификацию пьезоэлектриков как частного случая ацентрических сред по Абрахамсу и Киви [2].

1. J.A. Schouten Tensor Analysis for Physicists. Clarendon Press, Oxford (1951).
2. S.E. Abrahams, T.Keve Ferrotelectrics 2,129 (1971).

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ДЕФЕКТОСКОПИЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ ТИПА ВЮРЦИТА: ZnO, CdS, CdSe и AlN

Ю.В. Шалдин¹, С. Матгьясик², А.А. Давыдов³, Н.В. Жаворонков³

*ФГБУН Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, 119333 Москва, Ленинский просп. 59
Yuri1999@rambler. ru*

*Международная лаборатория СМП и НТ, Польша, 53-421, Wroclaw, Ul.Gajowiska, 95
НИИ материаловедения, 124460 Москва, Южн. Промзона*

Отклонение двухатомных пироэлектриков от стехиометрического состава, прежде всего, определяется условиями выращивания и технологических воздействий. Исходя из термодинамических соображений, существует большая вероятность того, что нестехиометрия пироэлектриков может возникать по обеим подрешеткам. Существующие на данный момент экспериментальные данные интерпретируются как результат возникновения вакансий V_A и V_B и межузельных атомов A_I и B_I . Исходя из требований условия электронейтральности, большая часть дефектов может образовывать центры окраски, донорно-акцепторные пары, обладающие дипольным моментом, и более сложные образования – кластеры, границы которых могут быть и не связаны с элементами симметрии кристаллов. При этом локальная симметрия этих образований может отличаться от симметрии идеального пироэлектрика и зависеть от внешних воздействий. В ряде случаев применение внешних воздействий, например, электрического поля, может привести к образованию из ряда дефектов термоэлектриета при температуре жидкого гелия, условия диссоциации которого зависят от дефектности образцов, температуры и величины поля. Повышение температуры образца при снятом внешнем электрическом поле при 4.2 К приводит, на фоне обычной температурной зависимости спонтанной поляризации, к температурной деполяризации, как это имеет место в обычных неполярных соединениях. Поэтому любое отклонение спонтанной поляризации от монотонной (канонической) зависимости в нестехиометрических кристаллах мы рассматриваем как результат вклада разнообразных дефектов. Такой подход имеет право на существование и был продемонстрирован в ряде наших работ.

В соединениях двухатомных пироэлектриков всегда существует вероятность объединения акцепторных примесей и анионных вакансий. Примеси, например Li, Na, в подрешетке А и атомы элементов V группы в подрешетке В выступают как акцепторы. До сих пор не делалось никаких попыток исследовать роль этих комплексов в пироэлектриках. Однако в двухатомном пироэлектрике ZnSe вакансия V_{Se} может принимать положительно заряженное состояние, и поэтому не исключена возможность объединения с акцепторной примесью. Такие дефекты можно рассматривать на модели комплексного объединения $(A^{-1} V_b^{++})^+$. Другой пример – модели с противоположным зарядовым состоянием (Li^+Cd^-) , которые могут образовать устойчивые нейтральные центры. Существует достаточно мало информации об электрическом поведении кислорода из-за его нейтрального зарядового состояния. Однако за счет внешнего воздействия её можно обнаружить в ряде пироэлектриков.

Особо следует обратить внимание на вхождение в состав пироэлектриков примеси кислорода, образующего локализованный уровень и действующей как электронная ловушка. Поэтому решение проблемы нестехиометричности пироэлектриков, востребованных практикой, является весьма актуальной задачей и может найти свое решение на пути привлечения тех или иных физических эффектов, зависящих от реальной структуры объектов исследований. С учетом нашего опыта мы остановились на пироэлектрическом эффекте в нестехиометричных кристаллах типа вюрцита, позволяющем выявить электрически активные дефекты структуры.

САМООРГАНИЗАЦИЯ АЛМАЗНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ В ОБЪЕМНЫЕ МОНОКРИСТАЛЛЫ

**Шахов Ф.М., Кидалов С.В., Баранов П.Г., Бабунц Р.А., Саксеев Д.А.,
Кириленко Д.А., Алексенский А.Е., Байдакова М.В., Вуль А.Я.**

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,
fedor.shakhov@mail.ioffe.ru*

Экспериментально показано, что при спекании наноалмазов детонационного синтеза со средним размером кристаллита 4 нм при давлениях и температурах, соответствующих области термодинамической стабильности алмаза, возможно формирование объемных алмазных монокристаллов размером от 50 нм до 1 мкм.

Исследования кристаллической структуры полученных монокристаллов методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, а также методом комбинационного рассеяния света, позволяют заключить, что монокристаллы формируются в результате ориентированного присоединения наноалмазов. При этом граница зерен может быть как полностью когерентной, так и дефектной с локализацией дефектов в 1-3 углеродных слоях с sp^3 -гибридизацией.

Механизм ориентированного присоединения и роста (oriented attachment growth), известный ранее только для оксидных систем (таких как TiO_2) [1], для алмаза наблюдается впервые.

Сопоставление с ранее полученными нами данными [2, 3, 4] показывает, что введение углеводородов в процесс синтеза является определяющим фактором для роста монокристаллов.

Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № 12-02-00108-а) и Министерством Образования и Науки Российской Федерации (соглашения № 8017 и 8568). Частично, работа выполнена в Центре Коллективного пользования «Материаловедение и диагностика в передовых технологиях» при финансовой поддержке Министерства Образования и Науки Российской Федерации.

1. Q. Zhang, S.-J. Liu, S.-H. Yu. Recent advances in oriented attachment growth and synthesis of functional materials: concept, evidence, mechanism, and future. **J. Mater. Chem.** **19** (2009) 191–207.
2. 3. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov, A.Ya. Vul', A.N. Ozerin. Grain-boundary heat conductance in nanodiamond composites. **Diamond Relat. Mater.** **19** (2010) 976-980.
3. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov. Thermal conductivity of diamond composites. **Materials.** **2** (2009) 2467-2495.
4. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov, V.T. Lebedev, D.N. Orlova, Yu.S. Grushko. Small-angle neutron scattering study of high-pressure sintered detonation nanodiamonds. **Crystallography Reports.** **56(7)** (2011) 1181-1185.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЫСТРО ДИФФУНДИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ С ДИСЛОКАЦИЯМИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГЕРМАНИЯ

Шевченко С.А., Терещенко А.Н., Мазилкин А.А.

*Учреждение Российской Академии наук Институт физики твердого тела РАН,
Черноголовка, Россия,
shevchen@issp.ac.ru*

Многочисленные эксперименты свидетельствуют о сильном влиянии примесей на различные физические свойства полупроводников с введенными дислокациями. В монокристаллах германия, который в последнее время рассматривается как перспективный материал для изготовления светоизлучающих диодов, тип и концентрация легирующих примесей выше 10^{14} см⁻³ влияют на спектральное распределение интенсивности рекомбинационного излучения (РИ), обусловленного 60-градусными дислокациями [1]. Существенное изменение спектрального распределения РИ после нагрева пластически деформированных образцов выше 500 С коррелирует с уменьшением концентрации деформационных точечных дефектов, природа которых зависит от присутствующих примесей [2,3]. Эти факты могут быть обусловлены взаимодействием примесей с дислокациями.

В данной работе мы исследовали безизлучательную и излучательную рекомбинации носителей тока в пластически деформированном германии (с плотностью 60-градусных дислокаций в интервале 10^6 - 10^7 см⁻²) после легирования быстро диффундирующими примесями меди или золота и последующей термообработки. Методом DLTS были определены концентрация и рекомбинационные параметры атомов Cu_s и Au_s, которые замещают атомы германия в узлах кристаллической решетки и являются эффективными центрами рекомбинации носителей тока. Полученные значения соответствуют рекомбинационным параметрам изолированных атомов исследуемых примесей, которые расположены вне областей пространственного заряда вокруг дислокаций (цилиндров Рида). Интегральная интенсивность дислокационной фотолуминесценции (ДФЛ) существенно уменьшается при концентрации этих примесей порядка 10^{14} см⁻³. Изохронный нагрев образцов, легированных примесью меди, в широком (200 - 700 С) интервале температур способствует изменению интенсивности узких линий в спектре ДФЛ, а интегральная интенсивность ДФЛ не изменяется после термообработки при температурах $T_0 < 450$ С и возрастает при повышении температуры T_0 . Дефектная структура образцов германия после легирования медью исследовалась методом просвечивающей электронной микроскопии. С учетом полученных данных обсуждаются разные механизмы взаимодействия меди с дислокациями при температурах термообработки ниже и выше 450 С.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные системы».

Литература

- [1] A.N. Izotov, A.I. Kolyubakin, S.A. Shevchenko, E.A. Steinman. Defect Control in Semiconductors. K. Sumino (ed.), Elsevier Science Publ. B. V. (North-Holland), 1990.
- [2] S. Shevchenko, A. Tereshchenko. Physica B: Condensed Matter **404**, 4540 (2009).
- [3] S. Shevchenko, A. Tereshchenko. Sol. St. Phenom. **156 - 158**, 289 (2010).

О НЕКОТОРЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МАГНИТОИМПУЛЬСНОГО УПРОЧНЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ

Шипко М.Н.^{1,2}, Коровушкин В.В.³, Староверов Б.А.⁴, Степович М.А.^{1,5,6}

¹ *Ивановский филиал Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова,
г. Иваново, Россия, ivrgteu_nir@mail.ru*

² *Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина,
г. Иваново, Россия, ivrgteu_nir@mail.ru*

³ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва, Россия, krvsch@mail.ru*

⁴ *Костромской государственный технологический университет, г. Кострома,
Россия, sba44@mail.ru*

⁵ *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, г. Калуга,
Россия, m.stepovich@rambler.ru*

⁶ *Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, г. Москва,
Россия, m.stepovich@rambler.ru*

Проведён анализ возможностей технологического использования слабых импульсных воздействий магнитными и/или электрическими полями на материалы различной природы. Проявление эффектов упрочнения материалов указывает на то, что при описании микропроцессов, происходящих под влиянием электрического и магнитного полей, невозможно использовать макроскопические (например, механические) модели. Имея дело с объектами атомного масштаба, к которым можно отнести точечные и линейные дефекты, следует учитывать квантовые эффекты с соответствующими квантовыми законами (принцип Паули), с правилами отбора. Переход от макро- к микро- и наномеханизмам воздействия на дефектную структуру материала позволяет рассматривать импульсные воздействия слабых электрических и магнитных полей как процессы квантового характера, связанные с релаксацией спиновых моментов. Такая релаксация может быть причиной открепления дислокаций от локальных препятствий, создания метастабильных состояний, организации дефектов или их качественным изменениям, что позволяет использовать новые состояния дефектов в металлах, сплавах, полупроводниковых гетерокомпозициях, квазикристаллических материалах для управления их оптическими, электрическими, магнитными, механическими свойствами. Слабое низкочастотное импульсное магнитное поле, изменяя спиновое состояние частиц, может ускорить процессы реконструкции решетки, изменить энергетическое состояние дефектов и, как следствие, вызвать управляемое изменение физико-механических параметров материала (см., например, [1-4]).

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 1.6107.2011), Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 12-08-97595).

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А.

// Кристаллография. 2003. Т. 48, № 5. С.826-854.

2. Бучаченко А.Л. // ЖЭТФ. 2006. Т. 129, вып. 5. С.909-913.

3. Шипко М.Н., Степович М.А., Староверов Б.А. Костюк В.Х. // Промышленные АСУ и контроллеры. 2012. № 1. С.2-6.

4. Вирюс А.А., Каминская Т.П., Шипко М.Н., Степович М.А. // ФХОМ. 2013. № 2. С.71-75.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ УСЛОВИЙ ВЫРАЩИВАНИЯ КРУПНОГАБАРИТНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ

Шубин А.В

Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Россия
ShubinAlexander@yahoo.com

Современные темпы развития микроэлектроники и солнечной энергетики, с одной стороны, связаны с успехами в области полупроводниковой технологии, с другой обуславливают все более жесткие требования к полупроводниковой промышленности. Существует ряд экономических причин, заключающиеся в том, что пластины большего диаметра дают возможность получить больше кристаллов, это обусловило постоянный рост диаметра и длины выращиваемых монокристаллов.

Увеличение размера подразумевает прежде всего сохранение качества кристаллов. Большой выход годных изделий возможен лишь в случае высокой однородности вдоль аксиальной и радиальной составляющей по примесному и микродефектному составу выращиваемых монокристаллов германия.

С точки зрения технологии задача выращивания бездислокационных монокристаллов германия с заданным осевым и радиальным распределением примеси, и определенным типом доминирующих собственных точечных дефектов, а также определенным концентрационным профилем собственных точечных дефектов является достаточно сложной даже для диаметра кристалла 100 мм. Сложности получения крупногабаритных малодислокационных монокристаллов связаны, как с физическими свойствами германия, так и с обеспечением необходимых технологических условий и режимов выращивания.

В данной работе создан тепловой узел для выращивания монокристаллов германия диаметрами 100 и 150 мм. На основании выполненных расчетов, разработки конструкции теплового узла удалось получать малодислокационные монокристаллы германия диаметром 100 мм.

Положительные результаты были достигнуты путем расчетов, а также методами математического моделирования и программных средств на их основе для исследования процессов тепломассопереноса при выращивании кристаллов из расплава. Были проведены исследования направленные на оптимизацию тепловых узлов, установление закономерностей изменения теплового поля в процессе выращивания монокристалла и определение факторов, в наибольшей степени влияющих на формирование теплового поля в ростовом узле.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОДОМЕННЫХ СТРУКТУР В ОДНООСНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ И ДОСТИЖЕНИЯ ДОМЕННОЙ ИНЖЕНЕРИИ **Шур В.Я.**

*Уральский центр коллективного пользования «Современные нанотехнологии»,
Институт естественных наук, Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия, E-mail: vladimir.shur@usu.ru*

В работе представлены результаты систематических исследований эволюции самоорганизованных нанодоменных структур и создания регулярных прецизионных доменных структур в одноосных сегнетоэлектриках. Показано, что нанодомены образуются в сильнонеравновесных условиях переключения, вызванных неэффективным экранированием деполяризующих полей. Полученные результаты качественно изменили представления о кинетике доменов и важны для доменной инженерии - создания регулярных доменных структур для нелинейно-оптических устройств.

Исследовались кристаллы одноосных сегнетоэлектриков семейства ниобата лития (LN) и танталата лития (LT), которые являются самыми популярными объектами применения методов доменной инженерии, а также ниобат бария-стронция (SBN). Оптическая микроскопия позволяла визуализировать эволюцию доменной структуры. Микроскопия пьезоэлектрического отклика и сканирующая электронная микроскопия обеспечивали пространственное разрешение до 2 нм. Конфокальная микроскопия комбинационного рассеяния позволяла наблюдать форму доменов в объеме и выявлять стадии формирования нанодоменных структур.

Кинетика доменов рассматривалась как аналог фазового перехода первого рода, при котором вероятность зародышеобразования определялась локальной величиной суммарного воздействия внешнего, деполяризующего и экранирующего полей. Показано, что при неполном экранировании суммарное поле замедляет рост доменов и стимулирует образование изолированных нанодоменов перед доменной стенкой. Для создания сильнонеравновесных условий переключения использовались: (1) воздействие пироэлектрического поля, вызванное импульсным нагревом излучением инфракрасного лазера, (2) нанесение диэлектрических слоев, (3) модификация поверхностных слоев методом протонного обмена и ионной имплантации.

Экспериментально и методами компьютерного моделирования изучено изменение формы доменов и переход от роста доменов - многоугольников к формированию самоорганизованных ансамблей изолированных нанодоменов. Впервые выявлено образование нанодоменных лучей, вызванное замедлением встречного движения доменных стенок при обратном переключении. Выявлена потеря устойчивости формы доменной стенки и формирование пальцеобразной структуры в LN с модифицированным поверхностным слоем. Формирование дендритных самоподобных микро- и нанодоменных структур обнаружено при переключении в LN при повышенных температурах. Впервые визуализировано формирование структуры доменных лучей, и показано, что рост доменов происходит под действием пироэлектрического поля при охлаждении после завершения облучения. Выявлено формирование регулярных нанодоменных ансамблей при многократном импульсном облучении LT. Показано, что ориентированные цепи нанодоменов образуются при переключении в облученном ионами при высокой температуре радиационного нагрева LN. Впервые в SBN выявлено формирование ансамблей изолированных клиновидных нанодоменов при переключении из монодоменного состояния в однородном поле.

Работа выполнена с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» ИЕН УрФУ, при поддержке РФФИ (гранты 11-02-91066-НЦНИ-а, 13-02-01391-а).

**ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЕВ КРЕМНИЯ
НА ИЗОЛЯТОРЕ, ПОЛУЧЕННЫХ ПО ТЕХНОЛОГИИ SIMOX**
**Щербачев К.Д.¹⁾, Бублик В.Т.¹⁾, Воронова М.И.¹⁾, Табачкова Н.Ю.¹⁾, Подгорный
Д.А.¹⁾, Мордкович В.Н.²⁾, Пажин Д.М.²⁾**

*¹⁾ Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС",
Москва, Россия.*

*²⁾ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем
технологии микроэлектроники и особых чистых материалов РАН, Московская
область, г. Черноголовка, Россия*

Технология SIMOX (separation by implanted oxygen) является вариантом технологии «кремний на изоляторе», которая направлена на повышение надежности работы микросхем и улучшение их частотные характеристик.

Образец коммерческой структуры фирмы Ibis corp., полученной по SIMOX технологии, был исследована методом высокоразрешающей рентгеновской дифракции, высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии и Оже спектроскопии с целью определения его реальных параметров (толщины верхнего кремниевого и оксидного слоя, наличие деформации в верхнем слое, его дефектность). Согласно паспорту, имплантацию ионов кислорода с дозой $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$ и энергией 160 кэВ проводили в кремниевую подложку с ориентацией (001) при температуре подложки 600 °С. Высокая температура мишени необходима для сохранения совершенства кристаллической структуры верхнего слоя кремния. Затем проводится высокотемпературный отжиг в течение 6ч при температуре, близкой к температуре плавления Si, с медленным последующим охлаждением для формирования сплошного скрытого оксидного слоя и отжига радиационных дефектов в верхнем слое кремния. При данных условиях имплантации толщина получаемого кремниевого слоя составляет 200 нм, а толщина оксидного слоя - 400 нм.

Методом рентгеновской дифракции было исследовано распределение интенсивности рассеяния окрестности узла обратной решетки Si(004). По периоду осцилляций на кривой дифракционного отражения определена толщина верхнего кремниевого слоя, которая составила (216 ± 2) нм. Метод высокоразрешающей просвечивающей микроскопии позволил определить толщину оксидного слоя (360 нм) и выявил присутствие островков Si в слое оксида со стороны границы "SiO₂-Si подложка". Эти островки имеют толщину 30-40 нм и длину от 30 до 200 нм. Они располагаются на расстоянии 20-25 нм от границы с подложкой. Островки ограничены плоскостями (111) и (001). Не было выявлено присутствие каких-либо дефектов в этих островках. На профилях по глубине, полученных методом Оже-спектроскопии, наблюдали пик интенсивности сигнала от Si, который соответствует выявленным электронной микроскопией частицам Si в аморфной матрице. Доля кремния в виде монокристаллической фазы на глубине, где залегают частицы, составляет 10-20%.

**ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ:
ПОЛИТИТАНАТОВ КАЛИЯ, НАНОТРУБОК ОКСИДА АЛЮМИНИЯ И
СЕРПЕНТИНИТА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВТОРИЧНОГО
ПОЛИВИНИЛБУТИРАЛЯ**

Юсупов Х.У., Ильиных И.А., Бурмистров И.Н., Кузнецов Д.В.

НИТУ «МИСис» <http://www.misis.ru/>

Ключевые слова: поливинилбутираль, полтитанат калия, оксид алюминия, серпентинит калия.

Среди группы поливинилацеталей поливинилбутираль (ПВБ) нашел наиболее широкий спектр практического применения. Для улучшения эксплуатационных характеристик вторичного ПВБ применяют различные методы его модификации.

В ходе данной работы было исследовано влияние наноразмерных наполнителей различной природы (полтитанаты калия (ПТК), нановолокна оксида алюминия «Нафен» (Al_2O_3) и синтетический серпентинит калия) на свойства ПВБ. Выбранные наполнители вводили в раствор ПВБ, гомогенизировали с применением ультразвука и из полученной суспензии методом полива изготавливали пленочные материалы для исследования механических свойств.

Результаты исследования механических свойств композитов полученных на основе ПВБ и представленных наполнителей на рис. 1.

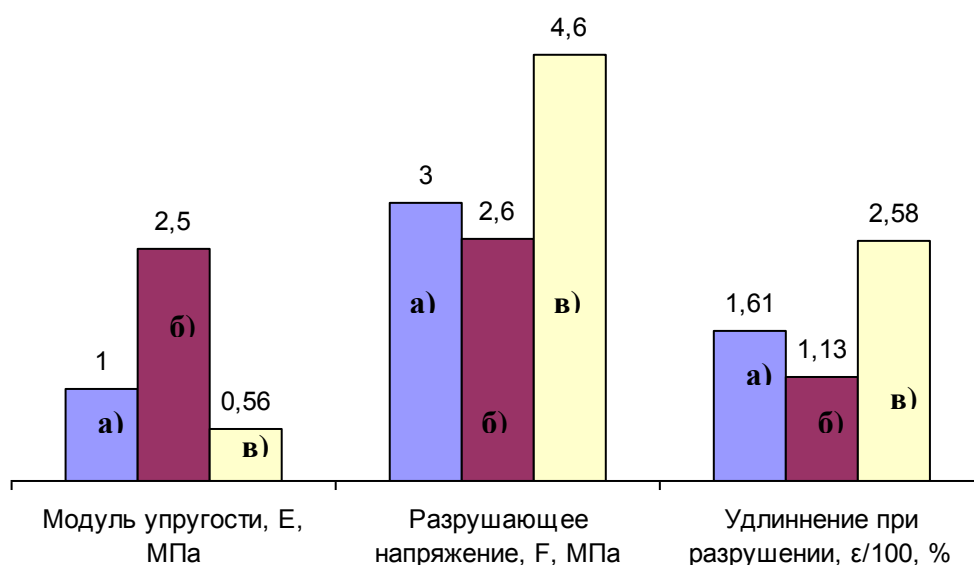


Рис. 1. Механические свойства композитов на основе ПВБ и различных наноразмерных наполнителей; а) ПТК, б) нановолокна оксида алюминия «Нафен», в) синтетический серпентинит калия.

Наибольшей жесткостью характеризуются композиты наполненные «Нафеном», что может быть связано с его волокнистой структурой. Наибольшей механической прочностью обладает композит, наполненный синтетическим серпентинитом, что вероятнее всего можно объяснить наиболее плотной структурой агломератов и, соответственно, меньшей дефектностью полученных на его основе композитов. Этот же материал обладает наилучшей растяжимостью (более 250%), что также подтверждает данное предположение.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВВЕДЕННЫХ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ В 4H-SiC

Якимов Е.Б.

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
г. Черноголовка, Россия, yakimov@iptm.ru*

Дефекты упаковки являются распространенным дефектом в кристаллах 4H-SiC, поскольку их энергия имеет сравнительно низкие значения. Именно они определяют деградацию мощных силовых приборов, поскольку легко образуются даже в условиях интенсивной инжекции носителей заряда. Это и определяет практическую значимость исследования свойств этих дефектов. Кроме того, исследование таких дефектов представляет научный интерес, поскольку они являются гетерополитипными квантовыми ямами (тонкими слоями 3C-SiC в 4H-SiC). В настоящей работе проведены исследования дефектов упаковки в 4H-SiC, введенных при пластической деформации при 550°C. Можно было ожидать, что свойства таких дефектов будут отличаться от свойств ростовых дефектов, формирующихся при значительно более высоких температурах. Источником дислокаций служила царапина, нанесенная на поверхность образца. В таких условиях деформация происходит за счет введения и движения частичных дислокаций, причем подвижным является только один тип дислокаций (с одной стороны от царапины). Длина дефектов упаковки в таких образцах достигала нескольких мм.

Были проведены исследования пластически деформированных образцов 4H-SiC методами катодолюминесценции (КЛ) и наведенного тока (НТ). В режиме КЛ обнаружено несколько типов дефектов упаковки, которым соответствует излучение с длиной волны 422, 460 и 504 нм. Близкие полосы излучения наблюдались и ранее, и они приписываются одинарным (1SSF), четверным (4SSF) и двойным дефектам упаковки типа Шокли (2SSF) соответственно. 1SSF распространяются на расстояние, не превышающее 100 мкм от царапины, 4SSF было обнаружено всего несколько штук, а длина 2SSF достигала нескольких мм. Эти результаты хорошо коррелируют с результатами, полученными на таких же образцах просвечивающей электронной микроскопией высокого разрешения, и подтверждают, что длина 2SSF существенно превышает длину 1SSF. Это можно объяснить в предположении, что скорость пары частичных дислокаций превышает скорость одиночной частичной дислокации.

Исследования методом наведенного тока показали, что дефекты упаковки дают светлый контраст, что согласуется с предположением о транспорте неравновесных носителей заряда вдоль квантовых ям, связанных с дефектами упаковки. Можно утверждать, что 2SSF дают светлый контраст в режиме НТ. Что касается изображений 1SSF, этот вопрос остается открытым, поскольку плотность 2SSF в исследованных образцах слишком велика. В то же время, в отличие от предыдущих исследований, частичные дислокации не давали заметного контраста в режиме НТ. Возможно, это связано с тем, что температура деформации была сравнительно низкой, а скорость дислокаций высокой, в результате чего степень декорирования дислокаций атомами примесей была невелика.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ В УГЛЕРОДНОЙ МАТРИЦЕ НА ОСНОВЕ ПАН В УСЛОВИЯХ ИК-ПИРОЛИЗА

Якушко Е.В.¹, Муратов, Д.Г.^{1,2}, Кожитов Л.В.¹, Афанасьев И.С.¹

¹ Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»,
119049, Ленинский пр., д. 4

² Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский пр., д. 29
E-mail: m5519969@yandex.ru

В настоящее время композиционные наноматериалы занимают все большую нишу как в науке так и в производстве. Структурные особенности и комплекс физико-химических свойств таких материалов позволяют расширять диапазон их использования. Композиционные материалы, включающие наночастицы ферромагнитных металлов группы железа (Fe, Co, Ni), а также их оксидов представляют интерес с точки зрения использования в качестве гетерогенных катализаторов нефтехимических процессов, роста углеродных нанотрубок, компонентов дисперсных радиопоглощающих сред.

В работе изучены процессы формирования наноразмерной фазы никеля в составе нанокompозита на основе полиакрилонитрила в условиях ИК-пиролиза прекурсоров, включающих гексагидрат хлорида никеля. С использованием разработанных методик были получены металлоуглеродные нанокompозиты на основе полиакрилонитрила (ПАН) и гексагидрата хлорида никеля.

Методом УФ-спектроскопии и ТГА изучены процессы, протекающие при низких температурах пиролиза (до 300 °С). Установлено, что гексагидрат хлорида никеля образует комплексы с нитрильными группами ПАН, а при температурах выше 200 °С – и с системой сопряжения. Комплекс является устойчивым до температур 500-600 °С, где начинается активная карбонизация полимера с формированием углеродной структуры, что вызывает сильное смещение полосы поглощения в сторону длинных волн. ТГА показал, что наиболее существенное изменение массы образцов соответствует этапам химических превращений, так при температурах 150, 200 °С наблюдаются пики изменения, отвечающие дегидрированию ПАН, сопровождающемуся формированием циклической структуры, а также процессу частичной дегидратации гексагидрата хлорида никеля.

По результатам РФА установлено, что цепочка превращений соединения никеля представляет ряд из следующих переходов между фазами:



При этом матрица нанокompозита претерпевает ряд изменений: линейная структура – циклическая структура – полиафтенная (сильно деструктурированная) – графитоподобная структура.

Процесс ИК-пиролиза сопровождается существенным выделением H₂, что приводит к восстановлению никеля. Дальнейшее формирование наночастиц осуществляется за счет диффузионных процессов и процессов агломерации и самосборки. Распределение наночастиц по размерам носит характер несимметричной кривой с максимумом в области среднего размера. Форма наночастиц близка к сферической. Средний размер наночастиц никеля изменяется в диапазоне 15-25 нм и определяется температурой финальной стадии процесса ИК-пиролиза и концентрацией соединения металла в прекуроре.