

**Выездная сессия Научного совета РАН  
по физике конденсированных сред**

**IX Научно-практический семинар  
«Актуальные проблемы физики конденсированных сред»**



Тезисы докладов

Севастопольский государственный университет

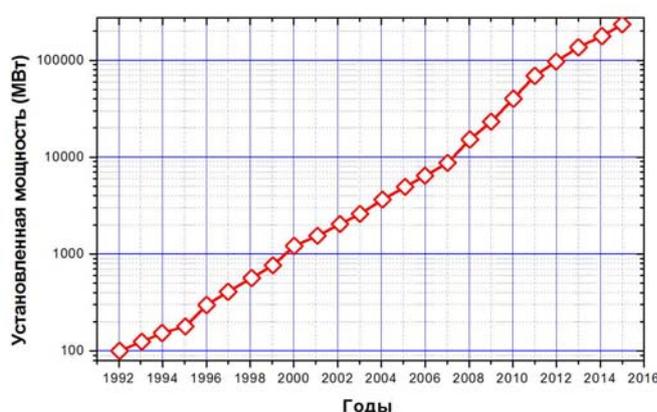
Севастополь, 12–14 октября 2016 г.

## ИНЖЕНЕРИЯ ДЕФЕКТОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ИЗ МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

В.В.Кведер

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка,  
142432, Черноголовка, ул.Академика Осипьяна, 2  
kveder@issp.ac.ru*

Производство солнечных батарей растет экспоненциально удваиваясь каждые 2 года. В 2015г. мощность установленных солнечных модулей превысила 200 ГВт (см. Рис.1). Сейчас более 90% солнечных элементов изготавливаются из кремния, что обусловлено его большой распространенностью в природе, достаточно большим кпд кремниевых элементов (до 25%) и их длительным сроком службы (40 лет и более). Немаловажно и то, что кремний совершенно нетоксичен.



Основная задача исследований в области солнечной энергетики связана с необходимостью дальнейшего снижения стоимости солнечных модулей в пересчете на 1 Ватт их установленной мощности. Если в 1975г. стоимость солнечных модулей превышала \$100 за 1 Вт, то в 2015г. она составила \$0.6 за 1 Вт. Именно это обстоятельство и привело к стремительному росту их производства.

Однако, для того чтобы через 40-50 лет солнечная энергетика стала основным источником электричества для людей, требуются серьезные научные исследования, направленные на дальнейшее снижение себестоимости солнечных модулей.

Для снижения себестоимости необходима разработка новых дешевых способов изготовления тонких кремниевых пластин и снижение требований к чистоте исходного сырья. Это возможно лишь при условии развития новых подходов к «инженерии дефектов», позволяющей изготавливать элементы с высоким кпд даже из дешевого и грязного поликристаллического кремния.

Как известно, для кпд солнечных элементов из кремния определяющим фактором является электрон-дырочная рекомбинация на глубоких дефектах с участием примесей переходных металлов. Задачей «инженерии дефектов» является снижение средней скорости электрон-дырочной рекомбинации путем изменения состояния этих примесей, их перераспределения в нужную сторону и «пассивации» в процессе изготовления солнечных элементов. Обсуждению различных методов «инженерии дефектов» в применении к мульткристаллическому кремнию, содержащему высокую плотность дислокаций и посвящен настоящий доклад.

Основные подходы «инженерии дефектов» используемые в настоящее время при производстве солнечных элементов – это фосфорное и алюминиевое гетерирование и водородная пассивация. При этом для оптимизации гетерирования и водородной пассивации и расчетах термических режимов как правило используются компьютерные симуляторы, созданные изначально для монокристаллического кремния и почти не учитывающие такие особенности мульткристаллического кремния, как наличие дислокаций и различного типа границ зерен.

Для дальнейшего развития инженерии дефектов требуются исследования свойств различных примесей на дислокациях, изучение взаимодействия примесей с дислокациями и границами зерен, влияния дислокаций и границ зерен на процессы диффузии и преципитации примесей. Важны также поиски способов собирания вредных примесей в небольшое число преципитатов и развитие способов пассивирования этих преципитатов для уменьшения электрон-дырочной рекомбинации на них.

## ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ

Сахненко В.П., Тер-Оганесян Н.В.

*Институт физики Южного федерального университета,  
Ростов-на-Дону*

Изложены современные представления о происхождении перекрестных эффектов (намагниченность – поляризация – деформация) и особенности соответствующих функций отклика при фазовых переходах в кристаллах. Обсуждается роль спин-орбитального взаимодействия в формировании микроскопических механизмов, ответственных за возникновение магнитоэлектрического эффекта. На основе симметричных соображений доказана взаимосвязь между проявлением магнитоэлектрических свойств и формированием длиннопериодических структур. В рамках феноменологической теории описаны особенности восприимчивостей к внешним макроскопическим полям при последовательных фазовых переходах, приводящих к формированию мультиферроидных состояний. Обсуждаются и интерпретируются результаты исследований мультиферроиков  $\text{CuO}$ ,  $\text{MnWO}_4$ ,  $\text{Co}_3\text{O}_4$ ,  $\text{MnGa}_2\text{O}_4$  и других, полученных в последние годы.

## О РОЛИ ЭНТРОПИЙНОГО ФАКТОРА УПОРЯДОЧЕНИЯ В СТАНДАРТНЫХ МОДЕЛЯХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ АГРЕГАЦИИ В РАСТВОРЕ

Евстигнеев М.П., Мосунов А.А., Головченко И.В., Лантушенко А.О.,  
Бучельников А.С.

ФГАОУ ВО Севастопольский государственный университет, Севастополь, Россия  
*evstigneev@sevsu.ru*

Молекулярная агрегация в водной среде – давно известный, и одновременно широко изучаемый в настоящее время процесс, имеющий большое значение на стыке различных областей научного знания. Классические физико-химические модели агрегации оперируют понятием равновесной микроскопической константы агрегации,  $K$ , не зависящей от размеров уже сформированных агрегатов. Однако в настоящее время стали появляться сообщения о существовании дополнительного энтропийного фактора, обусловленного упорядочиванием молекул в агрегатах - т.н. энтропия смешения, - и не учитываемого в стандартных моделях агрегации [1]. Следствием этого фактора является зависимость  $K$  от числа молекул в агрегате, добавочная к хорошо известному фундаментальному антикооперативному эффекту потери степеней свободы при образовании комплексов. В настоящей работе [2,3] этот вопрос был подвергнут детальному анализу, получено выражение большой статистической суммы агрегирующей системы, и доказано, что энтропийный фактор упорядочения не может быть источником систематического вклада в значение константы агрегации, получаемой из стандартных моделей.

1. Evstigneev M.P., Lantushenko A.O., Golovchenko I.V. Hidden entropic contribution in the thermodynamics of molecular complexation. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. V.18. P.7617-7625.
2. Evstigneev M.P., Buchelnikov A.S. The role of mixing entropy in molecular self-assembly. *Chem. Phys. Lett.* 2013. V.567. P.48-49.
3. Mosunov A.A., Rybakova K.A., Rogova O.V., Evstigneev M.P. Binding polynomial in molecular self-assembly. *Phys. Rev. E* 2014. V.89. 062138-4.

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФРУСТРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ СЛЕДУЮЩИХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Муртазаев А.К.<sup>1,2</sup>, Рамазанов М.К.<sup>1</sup>, Бадиев М.К.<sup>1</sup>, Курбанова Д.Р.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики ДНЦ РАН, 367003, Махачкала, Россия, akai2005@mail.ru

<sup>2</sup>Дагестанский государственный университет, 367025, Махачкала, Россия

В последнее время особое внимание уделяется исследованию магнитных состояний, фазовых переходов (ФП) и критических явлений в фрустрированных спиновых системах. Это связано с тем, что эти системы зачастую проявляют поведение, отличное от поведения соответствующих нефрустрированных систем. Причина такого поведения заключается в сильном вырождении в спиновой подсистеме, эффективном ослаблении связи, и, как следствие, высокой чувствительности к различным возмущающим факторам – дополнительным взаимодействиям, слабым полям, тепловым и квантовым флуктуациям, анизотропии, дефектам и деформациям [1-4].

В данной работе, нами репличным методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы и критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке и простой кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей.

Антиферромагнитная модель Изинга описывается следующим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l), \quad (1)$$

где  $S_{i,j,l} = \pm 1$  – изинговский спин.

Для модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке первый член в формуле (1) учитывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ближайших соседей ( $J_1 < 0$ ), а второй – следующих за ближайшими соседями ( $J_2 < 0$ );  $k = J_2/J_1$  – величина взаимодействия следующих за ближайшими соседями.

Для модели Изинга на кубической решетке первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями ( $J_1 < 0$ ). Вторым членом характеризует антиферромагнитное взаимодействие следующих ближайших соседей, находящихся в том же слое ( $J_2 < 0$ ). Учет антиферромагнитного взаимодействия следующих ближайших соседей приводит к возникновению фрустрации в этой модели.

На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Построены фазовые диаграммы зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. В рамках теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны все основные статические критические индексы.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-02-00214-а и № 16-32-00105-мол-а.*

1. Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., and Magomedov M.A., Solid State Comm., 2016, 233, 35.
2. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., and Badiev M.K., Physica B: Condensed Matter, 2015, 476, 1.
3. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Письма в ЖЭТФ, 2016, 103, 522.
4. Kassin-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., and Proshkin A.I., J. Mag. Mag. Mater., 2015, 384, 247.

# **НОВОЕ ПОКОЛЕНИЕ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ С ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫМ УПРОЧНЕНИЕМ: МЕТОДЫ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ**

Карпов М.И.

*Институт физики твердого тела РАН, 142432 г. Черноголовка,  
Московская обл., ул. Академика Осипьяна, 2, karpov@issp.ac.ru*

Одной из важнейших задач современного материаловедения является создание новых высокотемпературных сплавов для изготовления турбинных лопаток и других температурно нагруженных деталей для применения в авиации и энергетике. Используемые в настоящее время для этих целей никелевые суперсплавы имеют низкую температуру плавления  $\sim 1400^{\circ}\text{C}$ , которая ограничивает их собственную максимальную рабочую температуру интервалом  $1100\text{-}1150^{\circ}\text{C}$  и температуру газа на выходе из турбины значениями  $1300\text{-}1400^{\circ}\text{C}$ . Этот температурный интервал является неблагоприятным как с технической точки зрения, поскольку чем выше температура газа в двигателе, тем выше термодинамическая эффективность его работы, так и с экологической, поскольку, чем выше температура газа в двигателе, тем меньше загрязнение атмосферы оксидами углерода и нитридами. Для дальнейшего повышения термодинамической и экологической эффективности двигателя необходимо повышать температуру газа турбины и создавать соответственно новые высокотемпературные жаропрочные материалы.

В настоящей работе представлены результаты, полученные при исследовании образцов новых композиционных материалов на основе сплавов систем Nb-Si и Nb-Al с интерметаллидным упрочнением: так называемых “in situ”, или естественных композитов типа эвтектики ниобиевая матрица – силицид ниобия и искусственных композитов типа многослойных ламинатов ниобий-алюминид ниобия. Высокие температуры плавления ( $1920^{\circ}\text{C}$ –эвтектика в системе Nb-Si и  $2060^{\circ}\text{C}$ –перитектика в системе Nb-Al) позволяют надеяться на новые технологические решения при создании материалов, способных работать при собственных температурах  $1350^{\circ}\text{C}$  и выше.

Обсуждаются процессы формирования структуры, данные о кратковременной и длительной прочности при температурах до  $1350^{\circ}\text{C}$  и перспективы применения.

# НЕЛИНЕЙНАЯ И СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ДИПОЛЕЙ, ЛЕЖАЩАЯ В ОСНОВЕ ТЕПЛОВЫХ И НЕТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

Капранов С.В.<sup>1</sup>, Кузаев Г.А.<sup>2</sup>, Евстигнеев М.П.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Севастопольский государственный университет, Севастополь

<sup>2</sup>Norwegian University of Science and Technology (NTNU), O.S. Bragstads Plass 2B, 7491  
Trondheim, Norway  
[arcanzas@rambler.ru](mailto:arcanzas@rambler.ru)

Высокочастотные электромагнитные поля широко используются для нагрева, передачи энергии и информации, однако механизмы трансформации энергии поля в материалах изучены недостаточно. Приведены результаты изучения нами этих механизмов.

1. При исследовании маятниковой динамики диполя в постоянном и возмущающем переменном электрическом поле установлено образование около сепаратрисы фрактального стохастического слоя (СС), энергетическая ширина которого зависит от амплитуды, частоты, начальной фазы, длительности и направления возмущения, а также линейно коррелирует с его фрактальной размерностью вдали от основных резонансов. Предложен метод оценки ширины СС при достаточно больших амплитудах во всем диапазоне частот возмущения [1]. Объясняется экспоненциальное насыщение СС со временем релаксации, функционально зависящим, в частности, от амплитуды и частоты возмущения [2]. Показано, что СС дает, по меньшей мере, частичный энергетический вклад в либрационные полосы поглощения в ИК-спектре жидкой воды.

2. Изучалась поступательно-вращательная динамика поляризуемых дипольных молекул в коаксиальной линии передач вблизи центрального проводника нанометрового радиуса. Отмечалось их принципиально различное поведение в неоднородности поля (втягивание и выталкивание), которое определяется соотношением энергий вращательного и поступательного движения в нулевом поле. Получено аналитическое выражение для силы, действующей на диполь, которая зависит от молекулярных параметров и вращательного дрейфа молекул. Найдено увеличение кинетической энергии молекул при втягивании и ее уменьшение при выталкивании из неоднородного поля.

3. Аналитически продемонстрирована тождественность времени медленной дебаевской релаксации в суб- и сверхкритических полярных флюидах и времени двойного столкновения молекул в них [3]. Предложены новые механизмы диэлектрической релаксации в кластерах молекул, связанных водородной связью.

4. Для нахождения нетепловых эффектов переменного поля исследовалась классическая Ланжевеновская динамика дипольных молекул в трехмерной орторомбической решетке. Найдено локальное повышение потенциальной энергии в слабом высокочастотном электрическом поле, в том числе в виде пиков на характерных частотах и амплитудных напряженностях. Анализ положения пиков на шкале напряженностей предполагает коллективное преодоление потенциального барьера диполями, объединенными во вращательный конденсат. Положение пиков на шкале частот объяснено с помощью теории скоростей Крамерса в комбинации с теорией резонансной активации [4].

5. Изучалась диффузия дипольной молекулы в потенциале поверхности. Было аналитически показано, что эффективный коэффициент диффузии можно аппроксимировать уравнением Аррениуса. В численном моделировании воздействия слабого переменного электрического поля найдено, что на определенных частотах и амплитудных напряженностях наблюдаются максимумы увеличения эффективной энергии активации, которые связываются с подавлением вращательного движения, влияющего на трансляционную диффузию.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Kapranov S.V., Kouzaev G.A. Stochastic dynamics of electric dipole in external electric fields: A perturbed nonlinear pendulum approach. / *Physica D* – 2013. – Vol. 252. – No. 1. – P. 1-21.
2. Kapranov S.V., Kouzaev G.A. On the time evolution of the separatrix stochastic layer of a harmonically-perturbed nonlinear pendulum. / *Recent Advances in Electrical Engineering* / Eds.: Ahmed B.T. et al.; WSEAS Press. – 2013. – P. 97-101.
3. Kapranov S. V., Kouzaev G. A., Debye relaxation mechanism of microwave heating of near-critical polar gases. / *Int. J. Thermal Sci.* – 2010. – Vol. 49. – No. 12. – P. 2319-2330
4. Kapranov S. V., Kouzaev G. A., A simulation study of microwave field effects on 3D orthorhombic lattice of rotating dipoles: short-range potential energy variation. / *Eur. Phys. J. B* – 2016. – Vol. 89. – No. 5. – 126

## ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ПРИМЕСИ ВОДОРОДА В d-МЕТАЛЛАХ

Антонов В. Е.

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, antonov@issp.ac.ru*

Экспериментально установлено отсутствие стягивания полосы оптических колебаний водорода в узкий пик локальной моды по мере уменьшения его концентрации в d-металлах VI–VIII групп. Это указывает на то, что H-H взаимодействие в разбавленных растворах водорода в переходных металлах неправильно описывается существующими теориями на качественном уровне.

Рассмотренные в докладе результаты получены на поли- и монокристаллических образцах, насыщенных водородом при давлениях до 9 ГПа, закаленных при этих давлениях до температуры жидкого азота для фиксации содержания водорода и исследованных в метастабильном состоянии при атмосферном давлении методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН).

Наши НРН исследования ранее показали, что фундаментальная полоса оптических колебаний водорода в спектрах всех моногидридов d-металлов с ГЦК, ГПУ и двойной ГПУ решеткой (PdH, RhH, NiH, CoH, FeH, MnH, MoH, CrH) выглядит одинаково и состоит из интенсивного пика с широким плечом в сторону высоких энергий. На основании имеющихся первопринципных расчетов главный пик можно было приписать почти бездисперсионным поперечным оптическим модам, а плечо – продольными оптическими модами со значительной дисперсией.

Первое же НРН исследование твердого ГПУ раствора Re-H с  $H/Re = 0.09$  привело к неожиданному результату. Оказалось, что оптическая зона этого раствора расщеплена на два узких пика с энергиями 100 и 130 мэВ с отношением интегральных интенсивностей 1:2. Нижний пик отвечает колебаниям вдоль оси  $c$ , верхний – в плоскости  $ab$ . Расщепление зоны согласуется с симметрией кристалла – вполне допустимо, чтобы 3-х кратно вырожденная мода колебаний атомов H в Re расщепилась на одну моду колебаний вдоль оси  $c$  и две моды в базисной плоскости. Однако отношение энергий пиков соответствует  $c/a \approx 1.26$ , тогда как  $ReH_{0.09}$  имеет  $c/a \approx 1.61$ , близкое к значению  $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1.633$  для идеальной ГПУ решетки.

Оптическая зона ГПУ раствора Ru-H с  $H/Ru = 0.03$  также оказалась расщепленной на два отдельных пика колебаний вдоль оси  $c$  и перпендикулярно к ней. Энергии этих пиков, 115 и 127 мэВ, не очень отличались от наблюдавшихся в Re-H, а вот отношение их интегральных интенсивностей было приблизительно 1:1, что нельзя объяснить никакой локальной симметрией потенциальной ямы для атомов H.

Исследовать колебательные спектры разбавленных растворов водорода в ГЦК палладии и никеле ранее не удавалось из-за малой предельной концентрации  $H/Me < 0.001$  водорода в этих металлах и выпадении моногидридов при низких температурах, необходимых для НРН измерений. Наши нейтронографические и мессбауэровские исследования показали, что неупорядоченные ГЦК сплавы  $Pd_{0.8}Au_{0.2}$  и  $Ni_{0.8}Fe_{0.2}$  позволяют создать аналоги твердых растворов водорода в Pd и Ni с концентрациями до  $H/Me \approx 0.8^6 \approx 0.26$ . В этих растворах водород занимает октаэдрические междуузлия, образованные только атомами Pd или Ni и хаотически разбросанные по объему сплава. Исследование растворов  $Pd_{0.8}Au_{0.2}H_x$  и  $Ni_{0.8}Fe_{0.2}H_x$  с  $x = 0.03$  и  $0.06$  методом НРН показало, что ширина зоны оптических колебаний остается в них примерно той же, что и у ГЦК гидридов PdH и NiH, и не стягивается в узкий пик трехкратно вырожденной локальной моды колебаний примеси H.

## **ВЫРАЩИВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ ПРОФИЛИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ САПФИРА С КАПИЛЛЯРНЫМИ КАНАЛАМИ**

Курлов В.Н., Шикунова И.А.

*Институт физики твердого тела РАН, 142432, Черноголовка, Россия*

*kurlov@issp.ac.ru*

Кристаллы сапфира обладают уникальным сочетанием физико-механических и оптических свойств: высокой твердостью, химической инертностью, высокой температурой плавления, хорошим пропусканием в большом диапазоне длин волн, высокой прочностью и теплопроводностью, биосовместимостью, малой упругостью паров, низким термическим расширением при высоких температурах и высокой стойкостью к термоудару [1]. Уникальное сочетание физико-химических свойств сапфира и возможность получения кристаллов заданной формы, в том числе достаточно сложной, позволяет широко использовать профилированные кристаллы сапфира в качестве конструкционного и оптического материала [2].

В ИФТТ РАН разработаны не имеющие аналогов в мире методики выращивания профилированных кристаллов сапфира с протяженными капиллярными каналами диаметром менее 500 мкм. На основе численного решения капиллярного уравнения Лапласа получены профильные кривые менисков расплава при выращивании кристаллов сапфира различного поперечного сечения с продольными капиллярными каналами в зависимости от количества каналов, геометрии формообразователя, величины внешнего давления и других факторов [3]. На основе полученных данных по геометрии профильных кривых менисков расплава построена математическая модель изменения веса кристаллов с каналами на всех стадиях выращивания для управляющей программы с обратной связью.

Возможность получения профилированных кристаллов с капиллярными каналами позволила сформировать принципиально новые области применения сапфира: игловые капилляры для внутритканевой лазерной терапии, скальпели с возможностью флуоресцентной диагностики резецируемой ткани, нейрохирургический зонд с одновременной диагностикой, коагуляцией и аспирацией опухоли, криодеструкторы с комбинированным лазерным нагревом и диагностикой, компактные источники плазмы для оптической эмиссионной спектроскопии, терагерцовые фотонно-кристаллические волноводы и эндоскопы для диэлектрической спектроскопии удаленных труднодоступных объектов [4-7] и др.

[1] Kurlov V.N. “Sapphire: Properties, Growth, and Applications” in Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. Oxford: Elsevier; 2016.

[2] Kurlov V.N., Rossolenko S.N., Abrosimov N.V. and Lebbou Kh. “Shaped Crystal Growth” in Crystal Growth Processes Based on Capillarity Czochralski, Floating Zone, Shaping and Crucible Techniques, John Wiley & Sons, 2010, pp. 277-354.

[3] Rossolenko S.N., Kurlov V.N., Asrian A.A., Cryst. Res. Tech., 2009, 44, 701–706.

[4] Shikunova I.A., Volkov V.V., Kurlov V.N., Loschenov V.B., Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys., 2009, 73, 1345–1348.

[5] Shikunova I.A., Kurlov V.N., Ryabova A.V., Loschenov V.B., Lasers Med. Sci., 2009, 24, S31.

[6] Shikunova I.A., Stryukov D.O., Rossolenko S.N., Kiselev A.M., Kurlov V.N., J. Cryst. Growth, 2016, 10.1016/j.jcrysgro.2016.08.062.

[7] Zaytsev K.I., Katyba G.M., Kurlov V.N., Shikunova I.A., Karasik V.E., Yurchenko S.O., IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 2016, 6(4), 576–582.

## Генерация вихрей волнами на поверхности воды

Алиев С.А.<sup>1,3</sup>, Левченко А.А.<sup>1,2,3</sup>, Храмов Д.А.<sup>3,2</sup>, Филатов С.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела РАН, <sup>2</sup>Институт теоретической физики РАН  
142432, Черногловка, Московская обл., Россия*

<sup>3</sup>*Астраханский государственный университет, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева,  
20а*

Волновое и вихревое движение играет определяющую роль в динамике систем, непосредственно влияющих на глобальные процессы на Земле, формируют внешние условия жизни человека. К таким системам следует отнести волны на поверхности морей и океанов, вихри в атмосфере и на поверхности воды. Поведение этих систем теория описывает в рамках статистического подхода, и в основном была построена во второй половине 20 века. Однако прогресс в экспериментальном исследовании нелинейных явлений в волновых и вихревых системах произошел в 90-х годах прошлого века – первых годах текущего столетия, когда появились доступные скоростные приборы для сбора информации и математические модели обработки случайных процессов.

В докладе представлены экспериментальные результаты исследований генерация вихревого движения на поверхности воды нелинейными волнами на частотах от 3 Гц с длиной волны 17 см до 40 Гц с длиной волны 0.5 см (гравитационные и капиллярные волны). Показано, что во всем интервале частот полученные результаты можно описать в рамках модели формирования завихренности нелинейными волнами, предложенной в работе [1]. Впервые показано, что завихренность на поверхности воды периодически изменяется при изменении разности фаз между волнами, распространяющимися под углом  $90^\circ$  друг к другу. Наблюдена квадратичная зависимость модуля завихренности на поверхности от угловой амплитуды волн. Наблюден обратный энергетический каскад в системе вихрей.

1. Filatov S.V., Parfenyev V.M., Vergeles S.S., Brazhnikov M.Yu., Levchenko A.A., Lebedev V.V., Phys.Rev. Lett. 2016. V. 116. P. 054501

## ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ МЕДИ ПРИ КРУЧЕНИИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Страумал Б.Б., Мазилкин А.А.

*Институт физики твёрдого тела РАН, 142432, Черноголовка, Россия  
straumal@issp.ac.ru*

Интенсивная пластическая деформация (ИПД) всегда приводит к сильному измельчению зёрен. Логично предположить, что в двух- и многофазных сплавах ИПД должна всегда вызывать фрагментацию частиц второй фазы и их растворение в матрице. Однако не так давно было установлено что – в отличие от этой общепринятой точки зрения – ИПД может приводить к распаду пересыщенного твёрдого раствора и формированию частиц второй фазы. В данной работе мы анализируем (как экспериментально, так и теоретически) конкуренцию между этими одновременными процессами: (1) растворением преципитатов и (2) распадом пересыщенного твёрдого раствора с образованием частиц второй фазы. В результате возникает динамическое равновесие между этими процессами, а концентрация второго компонента в твёрдом растворе достигает некоторого стационарного значения.

В данной работе мы изучили воздействие кручения под высоким давлением (КВД) на поведение двухфазного сплава Cu–3.9 масс. % Ag в двух состояниях (1) литом, где в твёрдом растворе (Cu) содержалось 1.9 ат.%, а остальные 2 ат.% Ag содержались в метких частицах второй фазы и (2) практически однородном твёрдом растворе с растворёнными 3.9 ат.% Ag, полученном отжигом при  $T=780$  °С, 900 часю с последующей закалкой. КВД при комнатной температуре в литых образцах приводит к частичному растворению частиц серебра в матрице, а в гомогенизированных образцах – к частичному распаду твёрдого раствора (Cu). В результате, после КВД концентрация серебра в твёрдом растворе оказывается одинаковой (около 2.9-3.0 ат.% Ag). Таким образом, эта концентрация не зависит от исходного состояния и сильно превышает предел растворимости серебра в меди при температуре КВД (комнатной).

В работе также предложена модель, описывающая динамическое равновесие между растворением частиц и распадом твёрдого раствора. Предположив, что КВД фиксирует концентрацию на границах раздела частиц и матрицы, мы показали, что вызванный КВД диффузионный массоперенос определяет наблюдаемую стационарную концентрацию в матрице и средний размер частиц.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 14-48-03598, 14-42-03621, 15-53-06008, 15-08-09325, 16-53-12007).*

## **РАЗРАБОТКА ВЫСОКОПРОЧНЫХ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ**

Глезер А.М.

*ГНЦ РФ «ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина», Москва;*

*НИТУ «МИСиС», Москва*

[a.glezer@mail.ru](mailto:a.glezer@mail.ru)

Среди большого числа современных материалов центральное место занимают конструкционные материалы, предназначенные для изготовления деталей машин, механизмов, приборов и других изделий. Они характеризуются заметным разнообразием форм, размеров и условий эксплуатации и подвергаются всевозможным механическим нагрузкам (статическим, динамическим, циклическим и т.п.) при различных температурах и в среде различных жидких и газообразных веществ. Вышеуказанные условия определяют, с одной стороны, разнообразие типов конструкционных материалов, используемых в современной технике (от специальных сплавов до пластмасс), и, с другой стороны, широкий спектр предъявляемых к ним требований.

В докладе рассмотрены основные характеристики конструкционных наноматериалов. Описаны особенности дефектной структуры и закономерности механического поведения. Особое внимание уделено объемным и композиционным наноматериалам. Приведены примеры практического использования уникальных свойств наноматериалов в качестве перспективных конструкционных материалов.

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА В НАНОЧАСТИЦАХ Pt-Fe МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

Подсухина С.С., Власенко В.Г., Козинкин А.В.  
Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону  
svetlanapodsukhina@gmail.com

Методом рентгеновской спектроскопии поглощения исследованы наночастицы Pt-Fe с размерами около 4 нм в полиэтиленовой матрице. Установлено, что наночастицы Pt-Fe имеют структуру «металлическое ядро - оксидная оболочка». Ядро наночастиц состоит из Pt, тогда как оболочка – в основном из Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. С целью определения параметров ангармоничности межатомного потенциала, необходимых для расчета таких характеристик как температуры плавления и Дебая для наночастиц Pt-Fe были получены температурно-зависимые EXAFS Pt L<sub>3</sub> -края поглощения.

Анализ EXAFS - спектров с учетом кумулянтного разложения позволил определить параметры ангармоничного межатомного потенциала, которые имеют значение:  $a = 3.77 \text{ eV/\AA}^2$ ,  $b = -1.53 \text{ eV/\AA}^3$  для наночастиц и  $a = 4.56 \text{ eV/\AA}^2$ ,  $b = -1.78 \text{ eV/\AA}^3$  для платиновой фольги. Исходя из полученных значений кумулянтов и параметров ангармоничности межатомного потенциала  $a$ ,  $b$  рассчитаны такие термодинамические характеристики как температура Дебая  $\Theta_D$  и температура плавления  $T_{\text{melt}}$ . Температура плавления  $T_{\text{melt}}$  ядра наночастиц Pt-Fe среднего размера  $d \approx 4$  нм оказалась равной  $T_{\text{melt}} = 1630 \text{ K}$ , что меньше чем в металлической платине  $T_{\text{melt}} = 2041.4 \text{ K}$ . Температура Дебая для наночастиц уменьшается до  $\Theta_D = 208 \text{ K}$  по сравнению с  $\Theta_D = 233 \text{ K}$  для Pt фольги.

Существует несколько методов оценки температуры плавления  $T_{\text{melt}}$  для наночастиц. Один из методов основывается на полученном универсальном соотношении между размерами наночастиц и  $T_{\text{melt}}$  (1), основанном на капельно-жидкостной модели [1].

$$T_{\text{melt}}^{\text{nano}} = \left(1 - \frac{4\pi(h/2)^2 \gamma_1 h}{E_{c,\infty} d}\right) T_{\text{melt}}^{\infty} \approx \left(1 - 5.72 \frac{h}{d}\right) T_{\text{melt}}^{\infty}, \quad (1)$$

где  $d$ - диаметр наночастиц,  $h$ - атомный диаметр,  $E_{c,\infty}$ - энергия когезии,  $\gamma_1$ - коэффициент поверхностного натяжения.

При радиусе атома Pt  $h = 0.133 \text{ нм}$  [2] и  $d = 4 \text{ нм}$  получаем температуру плавления наночастиц  $T_{\text{melt}}^{\text{nano}} = 1653 \text{ K}$ , что очень близко к значению, найденному из наших EXAFS данных.

Также можно оценить температуру плавления наночастиц исходя из соотношения координационных чисел для наночастиц и металла (2) [3]:

$$T_{\text{melt}}^{\text{nano}} = \left(\frac{N^{\text{nano}}}{N^{\infty}}\right) T_{\text{melt}}^{\infty} \quad (2)$$

Среднее координационное число наночастиц Pt, найденное для ближайшей КС, составило 10, тогда из (2) получаем  $T_{\text{melt}}^{\text{nano}} = 1700 \text{ K}$ , что несколько больше по сравнению с значением 1630 K из EXAFS данных с учетом ангармонизма колебаний атомов.

Список публикаций:

- [1] S.C. Vanithakumari, K.K. Nanda. // Phys. Lett. A 2008, № 372, p.6930.
- [2] R. D. Shannon. // Acta Crystallogr. A 1976, № 32, p.751.
- [3] M. Attarian Shandiz, A. Safaei, S. Sanjabi, Z.H. Barber.//Solid State Comm. 2008, № 145, p.432.

## ФАЗОВЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ Cu–Co

Когтенкова О.А., Страумал Б.Б.

ИФТТ РАН, г. Черноголовка  
koololga@issp.ac.ru

Целью данной работы было изучение зернограничного фазового перехода смачивания в перитектической системе Cu–Co до и после кручения под высоким давлением (КВД). В литом сплаве Cu–2,2 масс.% Co (до КВД) исследовался переход от неполного смачивания ГЗ Cu/Cu расплавом, содержащим Co, к полному. Было показано, что с ростом температуры в интервале от  $T_{wmin} = 1088$  °C до  $T_{wmax} = 1096$  °C доля смоченных ГЗ растет и меняется морфология частиц второй фазы, выделяемых как по ГЗ, так и в объеме.

В сплавах Cu–2,2 масс.% Co и Cu–4,9 масс.% Co, деформированных методом КВД, процесс плавления изучался с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Сплавы Cu–Co обладают положительной энтальпией смешения, и в результате КВД их твердый раствор распадается, в отличие, например, от сплавов Cu–In, обладающих отрицательной энтальпией смешения, у которых твердый раствор не распадается. Положение ДСК-пиков показало, что плавление ультрамелкозернистых образцов сплавов Cu–Co начинается на 10–20 °C ниже линии объемного солидуса, по сравнению с образцами до КВД. Тепловые эффекты плавления ниже линии объемного солидуса можно объяснить предплавлением ГЗ. На объемной фазовой диаграмме Cu–Co была проведена линия зернограничного солидуса (Рис. 1).

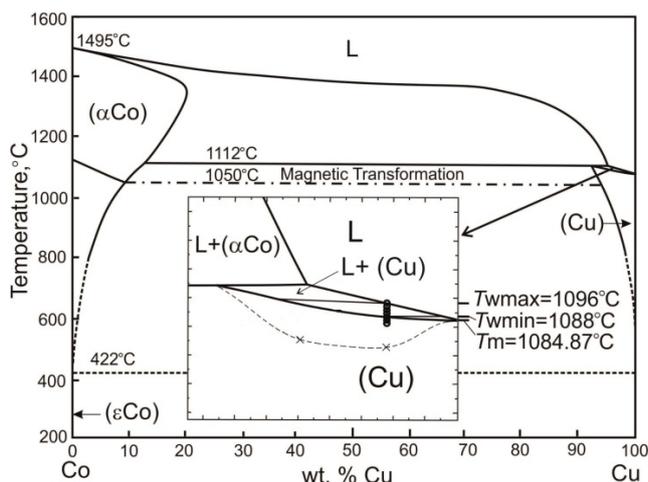


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы Cu–Co с линиями объемных фазовых переходов (толстые линии), конодами фазового перехода (тонкие линии) при  $T_{wmin} = 1088$  °C и  $T_{wmax} = 1096$  °C и линией зернограничного солидуса (пунктирная линия).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-08-00972).*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ГРАФИТОПОДОБНЫХ НАНО-ЧАСТИЦ НИТРИДА УГЛЕРОДА

Булатов М.Ф., Зинин П.В., Кутуза И.Б.

*Научно-технологический центр Уникального приборостроения РАН, Москва*  
[bulatov\\_agu@mail.ru](mailto:bulatov_agu@mail.ru)

Исследования, проводимые в Научно-технологическом центре уникального приборостроения РАН (НТЦ УП РАН) показали, что интенсивность люминесценции у полых  $C_3N_4$  нано-частиц сферической формы ( $s-C_3N_4$ ) на два порядка выше по сравнению с графитоподобными частицами нитрида углерода ( $g-C_3N_4$ ). Рекордные значения квантового выхода люминесценции, достигающие значений до 32% при возбуждении на 532нм и 38% – на 633нм, приписываются сферической форме нано-частиц нитрида углерод. В докладе обсуждаются необычные нелинейные свойства  $s-C_3N_4$  и поведение комбинационного рассеяния  $s-C_3N_4$  под действием высоких давлений.

### THE STUDY OF FLUORESCENT PROPERTIES OF GRAPHITE-LIKE NANO-PARTICLES OF CARBON NITRIDE

Scientific and technological center of Unique instrumentation RAS, Moscow, Russia

[bulatov\\_agu@mail.ru](mailto:bulatov_agu@mail.ru)

Research conducted in the Scientific and technological center of unique instrumentation RAS (STC UI RAS) showed that the luminescence intensity of hollow- $C_3N_4$  nano-spherical particles ( $s-C_3N_4$ ) was two order of magnitude higher than that of disordered ( $g-C_3N_4$ ) phase. Record values of the quantum yield of fluorescence were measured to be up to 32% upon excitation at 532nm and 38% at 633nm. High fluorescence was attributed to the spherical shape of nano-particles of carbon nitride. The report discusses unusual non-linear properties of the  $s-C_3N_4$  and behavior of Raman scattering  $s-C_3N_4$  under high pressure.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗЕРНОГРАНИЧНОГО РЕБРА НА ДВИЖЕНИЕ ИНДИВИДУАЛЬНОЙ ГРАНИЦЫ НАКЛОНА $[11\bar{2}0]$ В ЦИНКЕ

Сурсаева В.Г., Горнакова А.С., Страумал Б.Б.

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Экспериментально исследуется движение зернограничной петли в цинке. Зернограничная петля представляет собой границу наклона  $[11\bar{2}0]$  с углом разориентации  $35^\circ$ . Движущийся участок границы состоит из плоских и скруглённых зернограничных сегментов. Вдоль всей петли меняется ориентация границы в пространстве, поэтому мы имеем возможность наблюдать за движением участков границы с различной плоскостью залегания границы. Температурный интервал исследования 300-410С. Показано, что при низких температурах (300-375°C) граница движется с фасеткой, ограниченной с одной стороны ребром первого рода, а с другой стороны ребром второго рода. Мы наблюдаем сокращение длины фасетки за счёт движения ребра второго рода в температурном интервале 300-375°C. При исчезновении фасетки остаётся только ребро 1 рода. В температурном интервале 395-410° мы наблюдаем движение полупетли с ребром 1 рода. Такое изменение формы отражается на кинетических зависимостях: с ростом температуры от 300°C до 374°C зернограничная подвижность возрастает более интенсивно, чем с ростом температуры от 395°C до 410°C, что обуславливает изменение энтальпии активации движения от 1.2 эВ до 0.7 эВ. Изменение энтальпии активации свидетельствует о смене механизма движения, что и наблюдается экспериментально. Мы приписываем значение энтальпии активации 0.7 эВ энтальпии активации зернограничного ребра на индивидуальной границе наклона  $[11\bar{2}0]$ . Полученное нами [1] ранее 1.2 эВ значение энтальпии активации зернограничного ребра на индивидуальной границе наклона  $[10\bar{1}0]$  подтверждает наши представления.

[1] 1. Сурсаева В.Г. Кинетические свойства зернограничного ребра первого рода. Известия РАН. Серия физическая, 2012, том 76, № 11, с. 1412–1416

*Авторы благодарят РФФИ за финансовую поддержку направления исследований в рамках программы ИННО (грант № 16 03 00248).*

# КОНЦЕНТРАЦИЯ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ В МАЛОЙ ОБЛАСТИ СУБВОЛНОВОГО РАЗМЕРА С ПОМОЩЬЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВОЛНОВОДА С КАСКАДНЫМ НАКОНЕЧНИКОМ

С.С. Вергелес<sup>1,2\*</sup>, А.К. Сарычев<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черногловка, Московская область*

<sup>2</sup> *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область*

<sup>3</sup> *Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН*

\* *E-mail: ssver@itp.ac.ru*

В настоящее время для практических применений важной задачей является концентрация светового излучения на масштабах, значительно меньших дифракционного предела. Одним из решений является использование металлических частиц малого размера, на которых происходит возбуждение поверхностных плазмонов. Длина волны поверхностного плазмона может быть значительно меньше длины волны света на этой частоте, что и позволяет производить требуемую концентрацию излучения [1,2]. Возможными недостатками такого решения могут быть большие омические потери в металлических частицах, и, как следствие, сильный их нагрев, который приводит к деградации частиц. Эта проблема могла бы быть решена заменой металла на прозрачный диэлектрик.

Тем не менее, решение, основанное на волноводе, полностью выполненном из диэлектрика, обычно оказывается менее продуктивным, поскольку не удаётся достигнуть той же степени локализации (см., например, работы [3-5]). Причина состоит в том, что для диэлектрических частиц малого размера выполненных из материала с коэффициентом преломления порядка единицы отсутствует аналог поверхностных плазмонных колебаний. Поверхностные плазмонные моды позволяют

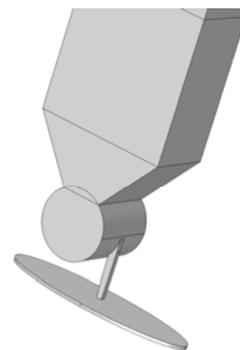


Рисунок 1. Общий эскиз волновода с каскадным наконечником

трансформировать поперечное электрическое поле моды в волноводе в компоненту поля, нормальную к поверхности подложки, см. например недавнюю работу [6]. Именно нормальную компоненту поля возможно локализовать в плоскости подложки, тогда как поперечная мода волновода, будучи параллельной к поверхности подложки, локализована быть не может.

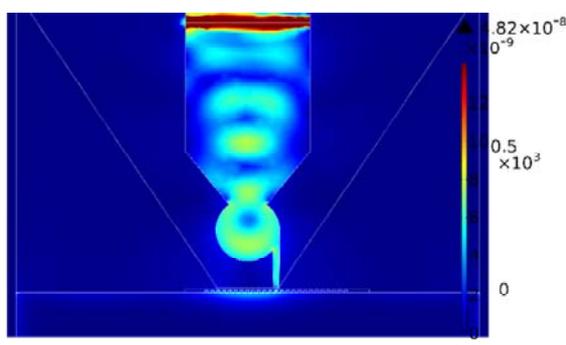
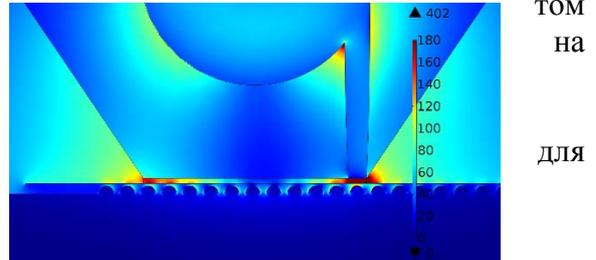


Рисунок 2. Распределение электрического поля в концентраторе. Расстояния даны в нанометрах.

Мы предлагаем конструкцию диэлектрического волновода со специальным каскадным наконечником, который позволяет концентрировать световую волну на масштабе, существенно меньшем длины волны. Рассматривается задача, когда концентрацию поля волны следует осуществить на поверхности некоторой подложки в заранее определённом месте (т.е. создать так называемый hotspot). Конструкция волновода состоит из самого диэлектрического волновода, выполненного из оптически плотного

диэлектрического материала, резонатора Ми и иглы. Резонатор Ми должен быть расположен на конце волновода. В резонаторе возбуждается первый магнитный Ми-резонанс приходящей из волновода волной. Проще всего изготавливать резонатор из того же материала, что и волновод. Именно резонатор производит трансформацию продольного по отношению к подложке электрического поля волновода в нормальную к подложке компоненту электрического поля.

Для локализации нормальной компоненты следует использовать тонкую иглу, направленную нормально поверхности подложки. Тонкая игла может быть выполнена из любого оптически плотного материала, в числе и из того же, что и резонатор. Однако игле не должны быть выполнены никакие резонансные условия, поэтому выбор материала для неё оказывается шире, чем подводящего волновода и резонатора. В результате на конце иглы возникает пик



напряжённости электрического поля, природа которого аналогична механизму возникновения огней святого Эльма.

Мы строим полуколичественную картину работы такого рода концентраторов света и представляем результаты численного моделирования. Результаты моделирования представлены на Рис. 2, 3. В качестве подложки взята примерная структура поверхности жесткого диска, где используется магнитная запись [7-8]. Последнее десятилетие активно обсуждается метод магнитной записи сопровождаемый локальным нагревом записываемого домена (heat-assisted magnetic recording) [9-10]. Мы выбрали эту область в качестве демонстрации практического применения нашего подхода.

Рисунок 3 Распределение электрического поля в области примыкания наконечника к подложке. Материал подложки – NiTa, на котором расположены периодически FePt частицы, покрытые алмазоподобным углеродом (DLC). Размер гранул 14 нм, они расположены квадратной решёткой с периодом 20 нм. Материал волновода, резонатора и иглы – кремний, материал обкладки – стекло. Вне обкладки воздух. Длина волны света в пустоте 900 нм.

## Литература

- [1] Gramotnev, D. K., & Bozhevolnyi, S. I. (2010). Plasmonics beyond the diffraction limit. *Nature Photonics*, 4(2), 83–91.
- [2] Li, K., Stockman, M. I., & Bergman, D. J. (2003). Self-Similar Chain of Metal Nanospheres as an Efficient Nanolens. *Physical Review Letters*, 91(22), 227402.
- [3] Kato, S., Chonan, S., & Aoki, T. (2014). High-numerical-aperture micro-lensed tip on an air-clad optical fiber. *Optics Letters*, 39(4), 773.
- [4] Rogers, E. T. F., & Zheludev, N. I. (2013). Optical super-oscillations: sub-wavelength light focusing and super-resolution imaging. *Journal of Optics*, 15(9), 094008.
- [5] Wiederhecker, G. S., Cordeiro, C. M. B., Couny, F., Benabid, F., Maier, S. a., Knight, J. C., ... Fragnito, H. L. (2007). Field enhancement within an optical fibre with a subwavelength air core. *Nature Photonics*, 1(2), 115–118.
- [6] Wang, Y., Du, Z., Park, Y., Chen, C., Zhang, X., & Pan, L. (2015). Quasi-3D plasmonic coupling scheme for near-field optical lithography and imaging. *Optics letters*, 40(16), 3918-3921.

- [7] Weller, D., Mosendz, O., Parker, G., Pisana, S., & Santos, T. S. (2013). L10 FePtX–Y media for heat-assisted magnetic recording. *physica status solidi (a)*, 210(7), 1245-1260.
- [8] Chen, L., Wang, J., & Nair, S. S. (2016). An Analytical Method for Predicting 3-D Eddy Current Loss in Permanent Magnet Machines Based on Generalized Image Theory. *IEEE Transactions on Magnetics*, 52(6), 1-11.