ИФТТ РАН
ISSP RAS

# Физика конденсированных состояний



# ТЕЗИСЫ

## IV Международной конференции «Физика конденсированных состояний» ФКС-2025

**г. Черноголовка, 2 – 6 июня 2025 года**

Российская академия наук
Министерство науки и высшего образования РФ
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна
Российской академии наук

# IV Международная конференция «Физика конденсированных состояний» ФКС-2025

Под редакцией д.ф-м.н. Б.Б. Страумала

*Черноголовка, 2 – 6 июня 2025 г.*

**С Б О Р Н И К  Т Е З И С О В**

**Черноголовка**
**2025**

**Физика конденсированных состояний**: сб. тезисов IV Международной конференции (2 июня – 6 июня 2025 г., Черноголовка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черноголовка, 322 с. – ISBN 978-5-6053681-0-6.




© Российская академия наук, 2025
© Страумал Б.Б. (редактор), 2025

## Программный комитет

Левченко А.А. – чл.-корр. РАН, директор ИФТТ РАН, председатель
Кведер В.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Кукушкин И.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Бородин В.А. – чл.-корр. РАН, ЭЗАН
Карпов М.И. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Красильник З.Ф. – чл.-корр. РАН, ИФМС РАН
Кулаковский В.Д. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Пудалов В.М. – чл.-корр. РАН, ФИАН
Смирнов А.И. – чл.-корр. РАН, ИФП РАН
Чугуева И.Н. – зам. директора департамента, Минобрнауки России
Волошин А.Э. – проф., ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН
Девятов Э.В. – проф. РАН, ИФТТ РАН
Истомина Н.Л. – д.ф.-м.н., ОФН РАН
Левин Ю.Б. – д.т.н., директор «Электронтех»
Рощупкин Д.В. – чл.-корр. РАН, директор ИПТМ РАН
Рязанов В.В. – проф., ИФТТ РАН
Сафонов О.Г. – проф. РАН, директор ИЭМ РАН
Страумал Б.Б. – проф., руководитель НЦЧ ИФТТ РАН

## Организационный комитет

Левченко А.А. – ИФТТ РАН, председатель
Девятов Э.В. – ИФТТ РАН, зам. председателя
Страумал Б.Б. – НЦЧ РАН, зам. председателя
Хорошева М.А. – ИФТТ РАН, учёный секретарь
Колесников Н.Н. – ИФТТ РАН
Терещенко А.Н. – ИФТТ РАН
Паленова А.Ю. – ИФТТ РАН
Камынина О.К. – ИФТТ РАН
Горнакова А.С. – ИФТТ РАН
Дружинин А.В. – ИФТТ РАН
Муравьев В.М. – ИФТТ РАН
Симонов С.В. – ИФТТ РАН
Шевчун А.Ф. – ИФТТ РАН
Поварова Л.И. – ИФТТ РАН
Авакянц Д.А. – ИФТТ РАН

## СПОНСОР КОНФЕРЕНЦИИ




**ООО «МИЛЛАБ»** предоставляет готовые решения для лабораторного, пилотного и промышленного синтеза и оказывает услуги по индивидуальному проектированию и оснащению лабораторий. Компания предлагает комплексные технические решения и обеспечивает клиентов высококачественным оборудованием с максимальным уровнем сервисной поддержки, приносит на рынок современные идеи по формированию научных лабораторий и производств.

**Компания «МИЛЛАБ»** специализируется на поставках аналитического, реакторного, испытательного, вакуумного и термического оборудования ведущих мировых брендов для эффективного решения различных задач в лабораториях и на производстве.

**Компания «МИЛЛАБ»** стремится обеспечить клиентов высококачественным оборудованием с максимальным уровнем сервисной поддержки для эффективного решения технологических и аналитических задач. При формировании программы продаж отдает предпочтение производителям оборудования премиум-класса с отличным соотношением «цена-качество».

Сегодня **компания «МИЛЛАБ»** это:

✓ Команда профессионалов, которая может предложить свои знания и опыт для решения задач самого высокого уровня сложности;

✓ Широкая сеть региональных офисов, позволяющая поддерживать высокий уровень обслуживания клиентов в регионах (г. Москва, г. Санкт-Петербург, г. Краснодар, г. Екатеринбург, г. Новосибирск, г. Самара);

✓ Лидер в поставках оборудования премиум-класса для научных, лабораторных и технологических задач;

✓ Квалифицированные консультации и тесные контакты с клиентами, пуско-наладочные работы, аттестация оборудования, гарантийный ремонт, сервисное обслуживание.

MILLAB GROUP




Екатерина Егорова | Т: +7 (495) 933-7147, (48) доб. 157 | ekeg@millab.ru
Светлана Носкова | Т: +7 (495) 933-7147, (48) доб. 173 | sn@millab.ru

127247, г. Москва Дмитровское шоссе, д. 100, стр.2; Тел.: +7 (495) 933-7147
e-mail: info@millab.ru; www.millab.ru

# Содержание

ИНДУЦИРУЕМЫЕ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ ..... 18

ПНИКТИДЫ И ХАЛЬКОГЕНИДЫ ЖЕЛЕЗА – НЕОБЫЧНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И НЕМАТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ..... 19

О СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ ..... 20

СИНТЕЗ, ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА, АТОМНАЯ СТРУКТУРА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МОЛИБДАТОВ НА ОСНОВЕ ФЛЮОРИТОПОДОБНЫХ ФАЗ ..... 21

ЛАЗЕРНЫЙ ЭФФЕКТ НА ЗВУКЕ ..... 22

ФИЗИКА ГРАНИЦ ЗЕРЕН И СВОЙСТВА УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ..... 23

ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ ..... 24

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ ..... 25

ДЕФЕКТЫ СТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТЬ КРИСТАЛЛОВ CD0.9ZN0.1TE, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЛАВКИ ..... 26

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАСПЛАВОВ СИСТЕМЫ CU-AL С MAX-ФАЗАМИ (CR1-XMNX)2ALC: СМАЧИВАНИЕ, ПРОПИТКА И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ..... 27

КАПИЛЛЯРНЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ КАПЛИ МЕДИ И МЕДНО-ГАЛЛИЕВЫХ РАСПЛАВОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА ..... 28

КАПИЛЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАСПЛАВА МЕДИ С MAX-ФАЗОЙ V2ALC ..... 29

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЛИСТОВ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СПЛАВОВ МОЛИБДЕНА ЛМ1 И ЛМ2 ..... 30

ПРОНИКНОВЕНИЕ РАСПЛАВА НИКЕЛЯ ПО ГРАНИЦАМ ТРИКРИСТАЛЛА ТВЕРДОГО ВОЛЬФРАМА ..... 31

СМАЧИВАНИЕ РАСПЛАВОМ НИКЕЛЯ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛЬФРАМА ..... 32

СЛОИСТЫЙ МОЛИБДЕНОВЫЙ КОМПОЗИТ: ПОЛУЧЕНИЕ И СТРУКТУРА ..... 33

ПРОЧНОСТЬ И ДЕФОРМИРОВАНИЕ СЛОИСТОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ МОЛИБДЕНА В ИНТЕРВАЛЕ 20–1400 ºС ..... 34

ЖАРОСТОЙКОСТЬ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НИОБИЯ И МОЛИБДЕНА С ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫМ УПРОЧНЕНИЕМ И ХРОМ-АЛМАЗНЫМ ПОКРЫТИЕМ ..... 35

СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУР CEF3/CEO2 , АКТИВИРОВАННЫХ ИОННОЙ ПАРОЙ $ND^{3+}$/ $YB^{3+}$ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ СЕНСОРИКИ ..... 36

ИНДУЦИРОВАННОЕ БЕСПОРЯДКОМ СОСУЩЕСТВОВАНИЕ ЗОННОГО НИЗКОСПИНОВОГО И ЛОКАЛИЗОВАННОГО ВЫСОКОСПИНОВОГО СОСТОЯНИЙ MN В ЛЕГИРОВАННОМ РОДИЕМ MNSI ..... 37

УГЛОВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ ФМР КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК (COFEZR+ZR2O3) ..... 38

СПЕКТР АНСАМБЛЯ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ, СОДЕРЖАЩИХ МАЙОРАНОВСКИЕ ФЕРМИОНЫ И ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ОДНОМОДОВЫМ РЕЗОНАТОРОМ ..... 39

ГИГАГЕРЦОВЫЙ РЕЗОНАНСНЫЙ ОТКЛИК И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРИ ФОТОВОЗБУЖДЕНИИ КИРАЛЬНЫХ МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ И МЕТАСТРУКТУР С CDS, CDSE, GAAS, SI ..... 40

ФОНОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МАТЕРИАЛОВ С ИНВЕРСИЕЙ ЗНАКА АНГАРМОНИЗМА ..... 41

ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА ПО СВЧ СПЕКТРАМ ОТРАЖЕНИЯ В ДИАПАЗОНЕ 8-56 ГГЦ ..... 42

ТЕРМОЦИКЛИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЛАВАХ С

ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ TINI ..... 43
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ СЛОЕВ В ПОЛЯРНОМ НАПРАВЛЕНИИ КРИСТАЛЛА ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА ..... 44
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ И ЧАСТОТНО- ИМПЕДАНСНЫХ СПЕКТРОВ ТУРМАЛИНА В ИНТЕРВАЛЕ 300-650 K ..... 45
ELEMENTARY MAGNETIC POLES IN SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES ..... 46
ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ НАНОВКЛЮЧЕНИЙ ЖИДКОГО PB НА ДИСЛОКАЦИЯХ В АЛЮМИНИИ ИЗ ТРАЕКТОРИЙ ИХ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ ..... 47
ИЗМЕНЕНИЕ ТЕМПЕРАТУР МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ И ПЛОТНОСТИ ДЕФЕКТОВ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ СПЛАВА TI-NI-FE ЧЕРЕЗ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИНТЕРВАЛЫ B2 ↔ R ИЛИ B2 ↔ R ↔ B19’ ПРЕВРАЩЕНИЙ ..... 48
ЗАРОЖДЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ AL В АМОРФНОМ СПЛАВЕ AL87NI8GD5 ПРИ НАГРЕВЕ И ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ..... 49
ТЕКСТУРНЫЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА ..... 50
ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕ- СКИХ СТЕКОЛ FE40NI40P14B6 И FE48CO32P14B6 ..... 51
СПИН-ОПТИЧЕСКИЕ И КОГЕРЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ДЕФЕКТНЫХ ЦЕНТРОВ В ПОЛИТИПЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ 6*H*-SIC ..... 52
СОЗДАНИЕ В ОБЪЕМЕ КРИСТАЛЛА МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСКООБРАЗНОЙ ПОЛОСТИ НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ С ПОЛИРОВАННЫМИ ВНУТРЕННИМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ ..... 53
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ B- GA2O3 ИЗ РАСПЛАВА ДЛЯ ПРИБОРОВ СИЛОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ ..... 54
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕМРИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДИРОВАННОГО СЕЛЕНИДА СВИНЦА ..... 55
ОСОБЕННОСТИ РАСПАДА АМОРФНОЙ ФАЗЫ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ ..... 56
РЕЛАКСАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС С ОЧЕНЬ МАЛЫМ ВРЕМЕНЕМ РЕЛАКСАЦИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ ..... 57
ABSORPTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATION IN PESHLE-TELLER POTENTIAL QUANTUM WIRE ..... 58
РАСЧЕТ РАДИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОГО ПРОФИЛЯ ПЛОТНОСТИ ТРОЙНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СТРУКТУРЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА СОСТАВА AGINS/ZNS МЕТОДОМ SAXS ..... 59
ON THE FORMATION OF INVERSE ISOSBESTIC POINT ON TRANSVERSE MAGNETORESISTANCE CURVES FOR VARIOUS COMPOUNDS ..... 60
ИНЖЕНЕРИЯ ДИСПЕРСИИ СПЕКТРА СТОЯЧИХ СПИНОВЫХ ВОЛН В НЕПРЕРЫВНО ГРАДУИРОВАННЫХ ТОНКИХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ СПЛАВА PD-FE ..... 61
THE STUDY OF HEAT CAPACITY OF LAVES PHASE NDRH2 ..... 62
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ ALN ПО ДАННЫМ МЕТОДА ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ..... 63
ВЛИЯНИЕ ОБЪЕМНОГО ЭФФЕКТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПРИ РАСПАДЕ АМОРФНОЙ ФАЗЫ ..... 64
НИЗКОРАЗМЕРНЫЙ МАГНЕТИЗМ НА ПРИМЕРЕ BANI2(SEO3)3·3H2O, SR2MN(SEO3)2CL2, SRCU(HSEO3)2CL2·6H2O ..... 65
ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В СОЕДИНЕНИИ LAB6 С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ ..... 66
ЭНЕРГИЯ УРБАХА И ПЛАЗМЕННАЯ ЧАСТОТА В МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ TLFES2 И TLFESE2 ..... 67
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ХАРАКТЕРИСТИК ВАКАНСИЙ И ЧАСТОТ СКАЧКОВ АТОМОВ В ВОЛЬФРАМЕ ..... 68

СИНТЕЗ ФУЛЛЕРЕНОВ C60 И C70 ..... 69

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОПИРУЕМОСТИ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ В ЦЕЛЯХ ПОВЫШЕНИЯ ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ..... 70

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСЕЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В КРИСТАЛЛАХ $A_{II}B_{VI}$ ПРИ РОСТЕ ИЗ РАСПЛАВА ..... 71

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НА ПРИМЕРЕ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ ..... 72

ФОТОИНДУЦИРОВАННЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ФОТОННОЙ СТРУКТУРЫ ГОЛУБЫХ ФАЗ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ..... 73

РАЗМЕЩЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В МИКРО- И НАНОСФЕРАХ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ ..... 74

ВЗАИМОСВЯЗЬ НАПРЯЖЁННОГО СОСТОЯНИЯ АМОРФНЫХ МИКРОПРОВОДОВ НА ОСНОВЕ FE И ИХ МАГНИТНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ, ОПРЕДЕЛЯЕМОЙ ИЗ ИЗМЕРЕНИЙ ИМПЕДАНСА ..... 75

*1D* СТРУКТУРЫ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА *BI2TE3<FE>* ..... 76

ШИРОКОПОЛОСНЫЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЛАБОРАТОРНЫХ АНАЛОГОВ МЕЖЗВЕЗДНЫХ И ОКОЛОЗВЕЗДНЫХ ЛЬДОВ ..... 77

ИЗУЧЕНИЕ КВАНТОВО-СТОХАСТИЧЕСКОГО СООТВЕТСТВИЯ НА ПРИМЕРЕ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ ..... 78

МУЛЬТИТЕРМИНАЛЬНЫЕ ДЖОЗЕФСОНОВСКИЕ SNS СТРУКТУРЫ В УСЛОВИЯХ НЕРАВНОВЕСНОЙ КВАЗИЧАСТИЧНОЙ ИНЖЕКЦИИ ..... 79

СВЯЗЬ МЕЖДУ РЕЛАКСАЦИЕЙ ДЕФЕКТНОЙ ПОДСИСТЕМЫ И МОДУЛЕМ СДВИГА В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ ..... 80

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ АМГ6М, 1163АМ И В95, ВЫЗВАННЫЕ ТЕРМООБРАБОТКОЙ МАТЕРИАЛОВ ..... 81

БИОСОВМЕСТИМОСТЬ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ TI-MO ..... 82

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ ИЗ-ЗА ОБМЕННОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ..... 83

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ОБРАЗОВАНИЯ СЕГРЕГАЦИЙ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В УПРУГОМ ПОЛЕ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В ОЦК ЖЕЛЕЗЕ ..... 84

LIGHT ABSORPTION IN A QUANTUM CONSTRICTION IN A LONGITUDINAL MAGNETIC FIELD ..... 85

МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ БИСЛОЙНЫХ МОСТИКОВ PDFE-NB ..... 87

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММЫ 3D-MLSI ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ СВЕРХПРОВОДНИКОВЫХ НЕЙРОНОВ ..... 88

СТАБИЛИЗАЦИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ЦКЭХ В ДВУХСЛОЙНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ В ШИРОКИХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ GAAS В НАКЛОННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ..... 89

ПОЛУЧЕНИЕ УЛЬТРАТОНКИХ B-W НАНОПРОВОЛОК ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИЕЙ В СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ ..... 90

СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ПЕРЕХОД В НАНОПРОВОЛОКАХ АМОРФНОГО ГАЛЛИЯ ..... 91

ОСОБЕННОСТИ СПИН-ФЛУКТУАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ ..... 92

ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ НИЗКОРАЗМЕРНОГО ОРГАНИЧЕСКОГО ПРОВОДНИКА **к**-$(BEDT\text{-}TTF)_2CU[N(CN)_2]CL_2$ ..... 93

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ МУАРОВОГО ГРАФЕНА С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПОДЛОЖКИ ..... 94

СВЯЗЬ МЕЖДУ РЕЛАКСАЦИЯМИ МОДУЛЯ СДВИГА И ОБЪЕМА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ ..... 95

СВЕРХБЫСТРЫЕ СЦИНТИЛЛЯЦИИ В КЛАСТЕРНО – ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ «НЕОРГАНИКА – ОРГАНИКА» ..... 96

УПРУГИЕ ПОЛЯ И ЭНЕРГИИ КВАНТОВЫХ ДИСКОВ И ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В НАНОПРОВОЛОКАХ ..... 97

ШИРОКОПОЛОСНАЯ ТГЦ-ИК СПЕКТРОСКОПИЯ ПРОВОДЯЩИХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЁНОК ..... 98

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ И ОТНОСИТЕЛЬНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ ЖИДКОСТИ ..... 99

СИНТЕЗ КОМПОЗИТА ДЕТОНАЦИОННЫЕ НАНОАЛМАЗЫ / КВАРЦЕВОЕ СТЕКЛО ..... 100

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МОДИФИЦИРОВАННОГО ОДНО- И ДВУСЛОЙНОГО ГРАФЕНА ..... 101

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА ЭНЕРГИЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ ПОДСИСТЕМ ..... 102

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ZRXTI1-XCH2 (CH=S, SE, TE) ..... 103

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА МЕХАНИЗМ ПРОВОДИМОСТИ И СПЕКТРЫ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В КРИСТАЛЛАХ БРОМИДА ТАЛЛИЯ ..... 104

НАНОЧАСТИЦЫ АЛЮМИНИЯ И ПЛАТИНЫ ДЛЯ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ПЛАЗМОН-УСИЛЕННОЙ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ..... 105

ИЗБЫТОЧНАЯ ЭНТАЛЬПИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ И СТЁКОЛ ..... 106

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ CUINS2 ..... 107

БЕЛЫЙ ПИГМЕНТ НА ОСНОВЕ ПОЛЫХ КРЕМНЕЗЁМНЫХ ЧАСТИЦ: ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЧАСТИЦ НА КОЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИХ ДИСПЕРСИЙ ..... 108

МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОЛИЗА АЛКОКСИДОВ ..... 109

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, ВОЗНИКАЮЩИЕ НА ДОМЕННЫХ СТЕНКАХ НА ПОВЕРХНОСТИ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ОСОБЕННОСТЯМИ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ..... 110

АНДРЕЕВСКИЙ ТОК ПРИ НАЛИЧИИ СПИНОВОГО РАССЕЯНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК ..... 111

ТЕМПЕРАТУРА ЗАМЕРЗАНИЯ РАЗОГРЕТОГО РАСПЛАВА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ..... 112

НАСЫЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ВАНАДИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ..... 113

РОЛЬ СОЛЬВАТАЦИИ И НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВАХ БИКАЛУТАМИДА ВРАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ..... 114

О ДИФФУЗИОННОМ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИИ УГЛЕРОДА В СТАЛИ ПРИ И ПОСЛЕ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ..... 115

ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПНИКТИДОВ NA(FE,CO)AS И BA(FE,NI)2AS2 С ВАРИАЦИЕЙ СТЕПЕНИ ДОПИРОВАНИЯ В НОРМАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ ..... 116

ДИНАМИКА ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПАВ ..... 117

ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ОСНОВАНА НА САМООБМАНЕ ..... 118

О ПРОТИВОРЕЧИЯХ В СОВРЕМЕННОЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ..... 119

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ НЕ ПРОТИВОРЕЧИТ РЕАЛИЗМУ ..... 120

ОБОЛОЧЕЧНАЯ СТРУКТУРА ПРИМЕСНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ, СФОРМИРОВАННЫХ В ХОЛОДНОЙ ГЕЛИЕВОЙ СТРУЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ РАЗЛИЧНЫЕ ВИДЫ ПРИМЕСЕЙ ..... 121

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОЛНОВОГО И ВИХРЕВОГО ДВИЖЕНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ ..... 122

КИНЕТИКА РАСТЕКАНИЯ И ПРОПИТКИ FE РАСПЛАВАМИ СИСТЕМЫ AG-CU: ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ РАСПЛАВА ПО ВНЕШНЕЙ ПОВЕРХНОСТИ И ВНУТРИ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ..... 123

ПРОДОЛЬНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ НАНОПРОВОЛОКЕ ..... 124

НЕКОТОРЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ХЛОРИДА И БРОМИДА СЕРЕБРА ..... 125

ЛОКАЛИЗОВАННЫЙ ПОВЕРХНОСТНЫЙ ПЛАЗМОННЫЙ РЕЗОНАНС В КВАЗИУПОРЯДОЧЕННОМ НАНО- КОМПОЗИТЕ BI/GAAS ..... 126

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАТУХАНИЯ ВИХРЕВОГО ДВИЖЕНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДЫ РАЗНОЙ ГЛУБИНЫ ..... 127

ТОПОГРАФИЯ СКОЛОТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ TI0.5ZR0.5CH2 (CH = S, SE, TE) ..... 128

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИТОВ AL –AL2O3 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ ..... 129

НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛУМЕТАЛЛОВ ..... 130

CROSSOVER FROM KINEMATICAL TO DYNAMICAL REGIME OF X-RAY DIFFRACTION IN FREE-STANDING SMECTIC FILMS ..... 131

ЭФФЕКТ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ПОПЕРЕЧНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В P-ZNAS2 ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ..... 132

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В N- CDAS2 ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ..... 133

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА 3D ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ С МАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ ..... 134

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРТОФЕРРИТА ЛАНТАНА LA1-XCAXFEO3-γ (X = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0) ..... 135

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРОГА ГЕНЕРАЦИИ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ ВОЛНАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ HE-II ..... 136

УСТОЙЧИВОСТЬ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ С УРАВНЕНИЕМ СОСТОЯНИЯ В ФОРМЕ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА ..... 137

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ КОРРОЗИЯ МЕТАЛЛОВ С УЧАСТИЕМ ПЛЕНКИ ВОДЫ ..... 138

СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ ПЛЁНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ПОЛЕ КОРОННОГО РАЗРЯДА ..... 139

ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ИЗГИБЕ ОТРАЖАЮЩИХ ПЛОСКОСТЕЙ КРИСТАЛЛА ..... 140

СТРОЕНИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ФЛЮОРИТОПОДОБНЫХ МОЛИБДАТОВ LI*X*ND5–*X*MO3O16±Δ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 20–900 °C ..... 141

ОБРАЗОВАНИЕ И АННИГИЛЯЦИЯ ТОЧЕЧНЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ НЕМАТИК – ИЗОТРОПНАЯ ЖИДКОСТЬ ..... 142

РЕГУЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИСТИРОЛА С $LABR_3$(CE) ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ И ДЕФОРМАЦИОННЫМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ ..... 143

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ NBXBI2SE3 ВБЛИЗИ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ..... 144

ТЕКСТУРНЫЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА ..... 145

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СОПРОТИВЛЕНИЯ И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ПЛЁНОК [(COFEB+SIO2)+ZNO]50 В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ 0–9 ТЛ ..... 146

QUANTUM-MECHANICAL CALCULATIONS OF ELASTIC AND THERMAL PROPERTIES OF C14 FE6NB4AL2 LAVES PHASE ..... 147

СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕРЕБРЯНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОЧАСТИЦ, СФОРМИРОВАННЫХ ФС-ЛАЗЕРОМ В ЦИНК-ФОСФАТНОМ СТЕКЛЕ ..... 148

ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЙ ПЕРЕХОД В LUB12 ПО ДАННЫМ ЯМР ..... 149

ЯМР ДОПИРОВАННОГО СВИНЦОМ BI:2201 ..... 150

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ РОСТА И СНИЖЕНИЕ ДЕФЕКТНОСТИ КРИСТАЛЛОВ КРС-5 С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ..... 151

ЭФФЕКТ АНОМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРЕМНИИ ..... 152

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВМСИМОСТЬ ПРОВОДИМОСТИ В СТРУКТУРАХ N-$AL_{0.24}GA_{0.74}$AS/GAAS153

ЭВОЛЮЦИЯ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ И ВЕЛИЧИНЫ ГМИ ЭФФЕКТА МИКРОПРОВОДОВ ПРИ ЧАСТИЧНОЙ НАНОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ..154

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ Г-MGH2.....155

ВКЛАД СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В ФОРМИРОВАНИЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА СЛОИСТОГО СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА- ПОЛУПРОВОДНИКА TLGASE2.....156

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СЛОИСТОМ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ- ПОЛУПРОВОДНИКЕ $TLINS_2$, ЛЕГИРОВАННОМ АТОМАМИ LA.....157

БИСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ С ГРАФЕНОМ: DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ В АТОМНОПОДОБНОМ БАЗИСЕ.....158

ПРОЧНОСТЬ КОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРОПИТКОЙ ГРАФИТА ЛЕГКОПЛАВКИМИ МЕТАЛЛАМИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ.....159

РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ТВЕРДЫХ И ЖИДКИХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР.....160

ПРОГНОЗ ФАЗОВОГО СОСТАВА, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ МОЛИБДЕНОВОЙ СТАЛИ ТИПА М9Ю.....161

ОСОБЕННОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ГИДРОКСИАПАТИТА ДОПИРОВАННОГО РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГООТЖИГА.....162

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОБРАТНОЕ МАРТЕНСИТНОЕ ($\alpha \rightarrow \gamma$) ПРЕВРАЩЕНИЕ В МЕТАСТАБИЛЬНОМ СПЛАВЕ FE-18CR-10NI.....163

ТОК ВИГНЕРА И ЕГО СВЯЗЬ С КВАНТОВО-КЛАССИЧЕСКИМ ПЕРЕХОДОМ.....164

ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ: ЭКСИТОНЫ ИЛИ СВОБОДНЫЕ НОСИТЕЛИ ЗАРЯДА?.....165

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С МЕЖФАЗНЫМИ ГРАНИЦАМИ$\alpha$-FE/$FE_3C$.....166

О СПЕКТРЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ШЕРОХОВАТОСТЕЙ ФОСФОЛИПИДНЫХ МУЛЬТИСЛОЁВ.....167

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕТАЛЛОВ НА ПРОВОДИМОСТЬ И ПАРАМЕТРЫ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК (COFEB/COTANB+SIO2/MGO)...168

ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЕ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК MN НА ПОВЕРХНОСТИ PT(332) СО СПИРАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРОЙ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ДЗЯЛОШИНСКОГО-МОРИЯ.....169

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ.....170

РАСЧЕТ И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДИФРАКЦИОННЫХ ФАЗОВОГО И БОРМАНОВСКОГО КОНТРАСТА ДЕФЕКТА КУЛОНОВСКОГО ТИПА В ТОНКОМ НЕПОГЛОЩАЮЩЕМ SI(111) И СИЛЬНО ПОГЛОЩАЮЩЕМ SIC-6H МОНОКРИСТАЛЛАХ.....171

ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКАЯ СТРУКТУРНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ЗАРЯДОВЫЕ СТРАЙПЫ В ГЕКСАБОРИДАХ $PRB_6$ И $NDB_6$.....172

ОСОБЕННОСТИ РАБОТЫ МНОГОКУБИТНОГО КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА ПРИ ОТЛИЧНОЙ ОТ НУЛЯ ТЕМПЕРАТУРЕ (НА ОСНОВЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ПЛАТФОРМЫ).....173

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ СПЛАВОВ AL-NI МЕТОДОМ МЕХАНИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.....174

ЭЛЕКТРОН-ЯДЕРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЯДЕР БОРА $^{11}$B И СПИНОВОГО ДЕФЕКТА В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА.....175

РАЗВИТИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА NI50MN25GA19FE6.....176

УПРУГОСТЬ ГОЛУБЫХ ФАЗ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ.....177

ДРОБНЫЙ КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ДВУХСЛОЙНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ....178

РОЛЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ В ЭТИОЛОГИИ ОБРАЗОВАНИЯ КОНКРЕМЕНТОВ В ОРГАНИЗМЕ ЧЕЛОВЕКА.....179

ВОЛНОВОЙ РЕЛЬЕФ НА ПОВЕРХНОСТИ АМОРФНОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ CO-FE-CR-SI-B ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ УФ ЛАЗЕРОМ ..... 180

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ NI/CU ..... 181

СПИНОВЫЕ ДЕФЕКТЫ И ИХ ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ПЕРСПЕКТИВНОМ МАТЕРИАЛЕ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ 6*H*-SIC ..... 182

ПОВЕДЕНИЕ НАНОТВЕРДОСТИ РАСТВОРОВ МЕДИ И ТИТАНА ПРИ НАЛОЖЕНИИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЯ ..... 183

РЕНТГЕНОВСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КРУПНЫХ HPHT АЛМАЗОВ ..... 184

МЕХАНИЗМЫ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ BAY2F8 ПРИ ДВОЙНОЙ АКТИВАЦИИ ИОНАМИ $TB^{3+}$-$YB^{3+}$ ..... 185

IMPACT OF GEOMETRICAL DIMENSIONS AND MAGNETIC FIELD ON INTERBAND LIGHT ABSORPTION IN A QUANTUM DOT SUPERLATTICE ..... 186

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ПО ТОЛЩИНЕ ТОНКИХ ВТСП ПЛЕНОК YBA2CU3O7-δ С РАЗНЫМ РЕЛЬЕФОМ ПОВЕРХНОСТИ ..... 187

SNS-АНДРЕЕВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПНИКТИДА НЕДОДОПИРОВАННОГО СОСТАВА $BAFE_{2-X}NI_XAS_2$ С X=0.07 ..... 188

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСЕЙ ВОДОРОДА И ВАНАДИЯ С ВАКАНСИЯМИ В ГЦК-ТИТАНЕ: AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ..... 189

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОТЖИГОВ В РАЗНЫХ АТМО- СФЕРАХ И ОБЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ НА СВОЙСТВА И ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ $GAGG:CE^{3+}$ ..... 190

ВАРЬИРОВАНИЕ ГЕОМЕТРИИ, СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИТОВ ПРИ ИХ ФОРМИРОВАНИИ ИЗ РАСТВОРОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ..... 191

ЭФФЕКТЫ ПАМЯТИ В МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТИ КРИСТАЛЛОВ ..... 192

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НОВОГО ЛИТЕЙНОГО СПЛАВА AL-ZN-MG-CU-Y С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ ПРИМЕСЕЙ ..... 193

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НЕПРЕРЫВНОГО ИЗМЕРЕНИЯ ЖЕСТКОСТИ (CSM) ДЛЯ АНАЛИЗА ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОУПОРЯДОЧЕННЫХ ПРИРОДНЫХ ПОЛИМЕРОВ В ПРОЦЕССЕ НАНОИНДЕНТИРОВАНИЯ ДРЕВЕСИНЫ СОСНЫ И ЕЛИ ..... 194

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СВС НА ФОРМИРОВАНИЕ MAX-ФАЗЫ TI2ALN ..... 195

ВОССТАНОВЛЕНИЕ И УЛУЧШЕНИЕ КАЧЕСТВА ТРЕХМЕРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ КОНФОКАЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМА РИЧАРДСОНА-ЛЮСИ ..... 196

МАГНИТНЫЕ, ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК (COFEB+SIO2) С РАЗНОЙ СТРУКТУРОЙ ..... 197

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСЛОЕВ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЖЕЛЕЗОМ ..... 198

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ МИКРОТРЕЩИН В ОБРАЗЦАХ ГОРНЫХ ПОРОД В ПРОЦЕССЕ ПОЭТАПНОГО НАГРУЖЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ..... 199

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСЕЙ В СЕРЕБРЕ МЕТОДОМ ГИБРИДНОГО КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО/МОЛЕКУЛЯРНО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ (QM/MM) ..... 200

ПРЯМОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПОРЯДКА ФЕРРОСЕЛЕНИДОВ НАТРИЯ, КАЛИЯ И РУБИДИЯ С ИЗОВАЛЕНТНЫМ ЗАМЕЩЕНИЕМ ..... 201

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ РОЛИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В МЕХАНИЗМЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ПНИКТИДОВ NA(FE,CO)AS ..... 202

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ИМПЕДАНСА СТРУКТУР [(COFEB+SIO2)/ZRO2]50/СИТАЛЛ В ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ 10 HZ−10 MHZ И В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 120−420 K ..... 203

ДИХАЛЬКОГЕНИДЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ..... 204

ПУТИ СНИЖЕНИЯ ТЕРМОДЕФОРМАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СВАРИВАЕМЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПРИ ДИФФУЗИОННОЙ СВАРКЕ ..... 205

ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В CDGA2SE4 В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР 4-300К ..... 206

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ СПИНОВ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТИ ..... 207

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И КИНЕТИКИ РАСПАДА ТВЁРДОГО РАСТВОРА В АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ AL-MN-CU-ZR-ER ..... 208

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕГРЕГАЦИИ И ПРЕЦИПИТАЦИИ НИКЕЛЯ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СЕРЕБРЕ ..... 209

ОБРАЗОВАНИЕ ТЕРМОСТАБИЛЬНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРЕМНИИ ПРИ СОПРЯЖЕННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ТЕМПЕРАТУРЫ И ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОНАМИ ..... 210

НАНОСЕКУНДНАЯ ДИНАМИКА РАЗРУШЕНИЯ ТВЕРДЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ И ОБОСНОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ МЕТОДОВ КОНТРОЛЯ ПРОЧНОСТИ НА ОСНОВЕ РЕГИСТРАЦИИ ЭМИССИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ ..... 211

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ЧАСТИЧНОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПОРЯДКА В СПЛАВЕ FE3AL В ПРОЦЕССЕ МЕГАПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В РАМКАХ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ ..... 212

ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОКРЕМНИЯ ..... 213

ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ СИЛИКАТА ВИСМУТА, ЛЕГИРОВАННЫХ ПРИМЕСЬЮ КОБАЛЬТА ..... 214

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХОЛЛОВСКИХ ДАТЧИКОВ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК INSB/GAAS ..... 215

ИЗУЧЕНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПОКРЫТИЙ ИЗ БЫСТРОРЕЖУЩИХ СТАЛЕЙ ..... 216

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПОКРЫТИЙ ИЗ БЫСТРОРЕЖУЩИХ СТАЛЕЙ ..... 217

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДИОКСИДЕ КРЕМНИЯ ..... 218

РАЗРАБОТКА ОТЕЧЕСТВЕННОГО ОБОРУДОВАНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ SIC ДИАМЕТРОМ 150 ММ ..... 219

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ ЛЮДЕРСА В СПЛАВЕ AL-MG СО СТРУКТУРНОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ ..... 220

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ $V_2O_5$ ПУТЕМ ДЕФОРМАЦИЙ СТРУКТУРЫ ..... 221

ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ СТАРЕНИЯ НА ПАРАМЕТРЫ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ В95ПЧ ..... 222

ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕННОСТИ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС СТАРЕНИЯ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА В95ПЧ ..... 223

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ СИГНАЛА ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПАРАМЕТРЫ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ AL-LI 224

ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО И ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК9 ПРИ ИСКУССТВЕННОМ СТАРЕНИИ ..... 225

НАСТРОЙКА ПРОВОДИМОСТИ ПУТЕМ ДЕФОРМАЦИИ РЕШЕТКИ ..... 226

МЕМРИСТИВНЫЕ СОСТОЯНИЯ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ, КОНТРОЛИРУЕМЫЕ ФО-ТО-ЭЛЕКТРО- ИНДУЦИРОВАННЫМИ ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ ..... 228

DFT МОДЕЛИРОВАНИИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ В АТОМНОПОДОБНОМ БАЗИСЕ ..... 229

РЕЗОНАНСНАЯ МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТЬ С ИМПУЛЬСНОЙ НАКАЧКОЙ ..... 230

РЕГУЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИПОВЕРХНОСТНЫМ ДЕФОРМАЦИОННЫМ ЛЕГИРОВАНИЕМ ..... 231

ПАЙЕРЛСОВСКИЙ ПЕРЕХОД КАК СЛЕДСТВИЕ СПОНТАННОГО ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЯ ФАЗЫ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ ..... 232

КОРОТКИЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ УЧЕТА ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ЛИГАНДА В ТЕОРИИ НЕЧЕТНОГО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНАХ ..... 233

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ, ИМПЛАНТИРОВАННОМ ЦИНКОМ ..... 234

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ C60 ПРИ НАКЛОННОМ ПАДЕНИИ ПУЧКА ..... 235

ЗАМЕДЛЕНИЕ И УСКОРЕНИЕ ДИФФУЗИИ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОМ СПЛАВЕ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ С ОЦК РЕШЁТКОЙ ..... 236

ИССЛЕДОВАНИЕ ГАШЕНИЯ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ПОРИСТОМ КРЕМНИИ, ВЫЗВАННОГО ИММЕРСИОННЫМ ОСАЖДЕНИЕМ CU И AG ..... 237

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И МАГНЕТИЗМ В ЭПИТАКСИАЛЬНОМ ГРАФЕНЕ 238

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НОВЫХ ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫХ СПЛАВОВ AL–ZR–SM И AL–SC–SM ..... 239

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ В ГЕТЕРОГЕННОЙ АМОРФНОЙ ФАЗЕ ..... 240

О МЕТОДЕ ОЦЕНКИ ИЗМЕНЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ СВОБОДНОГО ОБЪЕМА В АМОРФНОЙ ФАЗЕ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ ..... 241

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОНДЕНСАТОГИДРАТОВ ..... 242

ПЕРЕСТРОЙКА АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ В КОМПОЗИТЕ CU-NBTI ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПАКЕТНОЙ ГИДРОЭКСТРУЗИИ ..... 243

ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТАТИКИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ДИФФУЗИИ ВАКАНСИЙ И АТОМОВ В СИСТЕМЕ FE–CR С ОЦК И ГЦК СТРУКТУРАМИ ..... 244

О МЕХАНИЗМЕ СПАРИВАНИЯ В ДВУХЩЕЛЕВОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ ZRB12 С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ ..... 245

МАГНЕТОФОНОННЫЙ РЕЗОНАНС В ДВУМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ ..... 246

АДСОРБЦИЯ ВОДОРОДА НА ДЕКОРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ ..... 247

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ДИНАМИКА ЗОЛОТЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ ..... 248

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНО-КЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ ПРИ ВНЕДРЕНИИ АТОМА НИКЕЛЯ ..... 249

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ МЕЖДУ ФОРМИРОВАНИЕМ ПРЕДЗАРОДЫШЕВЫХ КЛАСТЕРОВ И АНИЗОТРОПИЕЙ РОСТА КРИСТАЛЛОВ KDP И DKDP ..... 250

РОСТ И ЭВОЛЮЦИЯ НАНОПРОВОДОВ IR НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКА GE(001) ..... 251

УПРАВЛЕНИЕ КИРАЛЬНОСТЬЮ И ЗАВИХРЕННОСТЬЮ МАГНИТНЫХ СОЛИТОНОВ В НАНОСТРУКТУРАХ «ДИСК-НАНОПРОВОЛОКА» ..... 252

КОНКУРЕНЦИЯ ОКТАЭДРИЧЕСКОЙ И ТЕТРАЭДРИЧЕСКОЙ КООРДИНАЦИИ ИНТЕРКАЛАНТА В СЛОИСТЫХ ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ IV ГРУППЫ ..... 253

ИЗМЕНЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДА В СПЛАВАХ NB-MO-C В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА ..... 254

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНОГО ПОЛИУРЕТАНА И ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ..... 255

МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВАЛЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ FE И КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В CA-ЗАМЕЩЕННОМ ОРТОФЕРРИТЕ $LA_{1-X}CA_XFEO_{3-Г}$ (X = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0) ..... 256

ЛЕГИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДНЫМИ И ПОСТПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ КАК СПОСОБ УПРАВЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННЫМИ СВОЙСТВАМИ V2O5 ..... 257

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ЛЕГИРОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВОВ AL-CR ..... 258

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ И МЕХАНИЗМЫ ЛОКАЛЬНОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ ВЫСОКОУПОРЯДОЧЕННЫХ ПРИРОДНЫХ ПОЛИМЕРОВ (НА ПРИМЕРЕ ДРЕВЕСИНЫ СОСНЫ И ДУБА) ..... 259

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК SRIRO3 И

ГЕТЕРО- СТРУКТУР НА ЕГО ОСНОВЕ ..... 260
ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ ..... 261
К ВОПРОСУ ОБ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЯХ И ИСКАЖЕНИЯХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ..... 262
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ КОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ СЕРЕБРА С ДОБАВЛЕНИЕМ AL2O3, ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫМ НАПЫЛЕНИЕМ ..... 263
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫМ МЕТОДОМ ..... 264
ЗАРОЖДЕНИЕ И ДИНАМИКА МАГНИТНЫХ СКИРМИОНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА ..... 265
ЭЛЕКТРОННЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА И ТЕМПЕРАТУРА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СОЕДИНЕНИИ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ И НЕИДЕАЛЬНЫМ НЕСТИНГОМ ..... 266
ПЭМ-СТРУКТУРА ПЛАЗМЕННОЙ НАПЛАВКИ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ Р18 НА СТАЛЬ 30ХГСА ..... 267
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНАЯ КЕРАМИКА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВКЛАДА ИОННОЙ (ПРОТОННОЙ) ПРОВОДИМОСТИ В ЭЛЕКТРОННЫХ ПРОВОДНИКАХ ..... 268
ПОЛИМОРФИЗМ, ПРОВОДИМОСТЬ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОЛЬФРАМАТОВ $LN_2WO_6$ (LN = SM, EU) И ИХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ АНАЛОГОВ ..... 269
АВТОМАТИЗАЦИЯ РАБОТЫ С ДАННЫМИ В ПЕРВОПРИНЦИПНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ..... 270
МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ ..... 271
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНОЙ МЕДИ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ ГИДРОЭКСТРУЗИЕЙ ..... 272
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ДАВЛЕНИЯ И КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ РАСТВОРА ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ..... 273
МЕМРИСТИВНЫЕ СОСТОЯНИЯ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ, КОНТРОЛИРУЕМЫЕ ФО-ТО-ЭЛЕКТРО- ИНДУЦИРОВАННЫМИ ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ ..... 274
МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФЕНА ПРИ ГИБРИДНОМ КОНТАКТЕ С МАГНИТНЫМИ И ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ ..... 275
ФОТОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ В CE-АКТИВИРОВАННЫХ ФТОРИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ ..... 276
ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА ДЛЯ ИСТОЧНИКОВ ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ ..... 277
МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОСТИ ..... 278
О ВЛИЯНИИ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ НА СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В КРИСТАЛЛАХ YB6 ..... 279
СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА ШЕЕЛИТОПОДОБНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МОЛИБДАТОВ DY2MOO6, ЛЕГИРОВАННЫХ АТОМАМИ СВИНЦА ..... 280
НОВЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ КВАНТОВОГО РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА БЛОХОВСКИХ ВОЛН ЭЛЕКТРОНОВ В ТОНКОЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ ..... 281
ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНОГО ПИННИНГА В СВЕРХПРОВОДНИКАХ PRFEASO1-XFX НА ЗНАЧЕНИЯ ПЛОТНОСТИ КРИТИЧЕСКОГО ТОКА И НАПРЯЖЕННОСТИ ВЕРХНЕГО КРИТИЧЕСКОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ ..... 282
ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МАЛОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА ИЗ БИОПОЛИМЕРОВ ЦИКЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ В УСЛОВИЯХ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА И СПЕКТР ЕГО ПРИМЕНЕНИЙ ..... 283

ФОРМИРОВАНИЕ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР МЕТОДАМИ МСХТ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ ..... 284

НЕЛИНЕЙНАЯ МАГНИТНАЯ ДИНАМИКА И ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРЁХСЛОЙНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНКАХ ЖИГ С НЕМАГНИТНОЙ ПРОСЛОЙКОЙ ..... 285

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ НА РАЗЛИЧНЫХ ЭТАПАХ ПОЛУЧЕНИЯ МАГНИТНЫХ НАНОПРОВОЛОК ..... 286

НАНОПРОВОЛОКИ ИЗ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ – ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА, МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ И ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ..... 287

РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПРИ НАЛОЖЕНИИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЯ ..... 288

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ: АНАЛИЗ С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДЕЛИ ИМПЕДАНСА ВАРБУРГА ..... 289

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДНОЙ ФАЗЫ ШЕВРЕЛЯ $MO_6S_6I_2$ ..... 290

ИЗМЕНЕНИЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТОНКИХ ПЛЕНОК SMS В ДИНАМИКЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ..... 291

ВОССТАНОВЛЕНИЕ И УЛУЧШЕНИЕ КАЧЕСТВА ТРЕХМЕРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ КОНФОКАЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМА РИЧАРДСОНА-ЛЮСИ ..... 292

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК GE/SIGE ГЕТЕРОСТРУКТР ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ МОДУЛЯТОРОВ ..... 293

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 5F И 6D ЭЛЕКТРОНОВ PU3+ СО СПИНАМИ ЯДЕР ФТОРА В CAF2 ..... 294

СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ТЕРАГЕРЦОВЫЙ БОЛОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ МЕТА-АТОМА ..... 295

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ КАСКАД ВОЛН ВТОРОГО ЗВУКА ..... 296

ЛЕГИРОВАНИЕ CU И NI MIST-CVD ПЛЕНОК CR2O3 ..... 297

ОТРАЖЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ ОТ СТЕНКИ ПРИ НАЛИЧИИ ЗАТУХАНИЯ В ФОРМАЛИЗМЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ ..... 298

STUDY ON THE FORMATION, STABILITY AND PROPERTIES OF THE D019 PHASE IN FE3GA-TYPE ALLOYS ..... 299

ОБЛАСТЬ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА В P-N ПЕРЕХОДЕ НА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ..... 300

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ CEF3-YF3-TBF3 С РАЗЛИЧНЫМ СООТНОШЕНИЕМ ИОНОВ CE3+ И TB3+, В ТОМ ЧИСЛЕ СТРУКТУРЫ ЯДРО-ОБОЛОЧКА ДЛЯ ЦЕЛЕЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ ..... 301

ПРОВЕРКА ЗАКОНА КВАНТОВАНИЯ ЗАРЯДА С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕЙ КЕЛЬВИН-ЗОНД МИКРОСКОПИИ ..... 302

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ НА СТРУКТУРУ И ПРОЦЕССЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО СПЛАВА ZR42.5CU42.5AL10FE5 ..... 303

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУР В ПРОЦЕССЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СПЛАВОВ ..... 304

МИКРОСТРУКТУРА, ТЕКСТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СПЛАВА CU-HF, ДЕФОРМИРОВАННОГО КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ ..... 305

ЭКСПЕРИМЕНТ КАРМАНА ДЛЯ РАСТВОРА ПОЛИМЕРОВ В МИКРОКАНАЛЕ ПРИ ОБТЕКАНИИ БОЛЬШОГО ПРЕПЯТСТВИЯ ..... 306

ПЛАЗМОННЫЙ РЕЗОНАНС В ПОВЕРХНОСТНО-ЛЕГИРОВАННЫХ КОЛЛОИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ CDS ..... 307

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МИКРОПРОВОДЕ CO83FE7C1SI7B2 В ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СПЕКТРА ЭПР ..... 308

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОГО ТОРОИДАЛЬНОГО ВИХРЯ В ЛАБОРАТОРНЫХ УСЛОВИЯХ

.....309
ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ТИТАНАТА БАРИЯ СТРОНЦИЯ.....310
РЕЖИМЫ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ .311
ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ИСКУССТВЕННЫЕ ДЖОЗЕФСОНОВСКИЕ АТОМЫ ДЛЯ КВАНТОВОЙ СИМУЛЯЦИИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ.....312
ТЕПЛОЕМКОСТЬ ГИДРИДА И ДЕЙТЕРИДА НИКЕЛЯ.....313
ИЗУЧЕНИЕ ХЕМОРЕЗИСТИВНЫХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ОКСИДА ВАНАДИЯ .314
ИНДУЦИРОВАННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ ПЛЕНКИ ФЕРРИТАГРАНАТА.....315
ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ МАГНИТНЫХ БИОКЛЕТОК ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ В ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ ПЛЕНКИ ФЕРРИТА-ГРАНАТА.....316
FUNCTIONALIZED MWCNT-ENHANCED NANOCOMPOSITES OF $FE_2O_3$, NIO, AND PVDF FOR ADVANCED SENSING AND ENERGY APPLICATIONS.....317
НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕРАГЕРЦОВОЙ ФОТОНИКИ.....318
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ B-GA2O3 ИЗ РАСПЛАВА ДЛЯ ПРИБОРОВ СИЛОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ.....319
ВЛИЯНИЕ СТАРЕНИЯ ПЕРЕД ДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКОЙ ЗАГОТОВОК НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОВОЛОК ИЗ СПЛАВА AL-0.36ZR.....320
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И AB INITIO РАСЧЕТЫ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ СИСТЕМЫ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ TLGAXIN1-XTE2.....321

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.01

# Индуцируемые магнитным полем фазовые переходы в редкоземельных интерметаллидах

**Мушников Н. В.**

[1]*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия,* E-mail mushnikov@imp.uran.ru

Магнитные фазовые переходы привлекают внимание исследователей, поскольку они сопровождаются не только изменением магнитной структуры соединения, но и аномалиями электросопротивления и магнитной энтропии, линейной и объемной магнитострикции, что находит применение в различных технических устройствах. В докладе представлены результаты исследования магнитных структур и магнитных фазовых переходов в интерметаллических соединениях $R$$Mn_2Si_2$, $R$$Fe_5Al_7$ и $R$$Fe_2$ ($R$ – редкоземельный элемент или иттрий).

В интерметаллидах $R$$Mn_2Si_2$ баланс конкурирующих обменных взаимодействий Mn-Mn, $R$-Mn и $R$-$R$ изменяется при изменении межатомных расстояний Mn-Mn. Дополнительно на формирование магнитного упорядочения при низкой температуре оказывают существенное влияние симметрия решетки и магнитная анизотропия. Это позволяет реализовать разнообразные спонтанные и индуцированные магнитным полем фазовые переходы. В $La_{1-x}Sm_xMn_2Si_2$ обнаружены большая линейная и объемная магнитострикция и положительное магнитосопротивление при индуцированном магнитным полем переходе из антиферромагнитной в ферромагнитную структуру. В $GdMn_2Si_2$ результирующий магнитный момент ориентирован перпендикулярно легкой $c$-оси подрешетки Mn и переориентируется к $c$-оси при легировании германием. В $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$ конкуренция отрицательных Tb-Mn и Mn-Mn обменных взаимодействий и сильной одноосной магнитной анизотропии создает фрустрированное состояние ионов Tb, что препятствует упорядочению подрешетки Tb.

В ферримагнетиках $RFe_5Al_7$ обнаружены фазовые переходы в магнитном поле вблизи точки компенсации и аномальная смена типа магнитного упорядочения при изменении температуры. С использованием рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма в магнитных полях до 30 Тл получено прямое экспериментальное доказательство скачкообразного вращения магнитных моментов 3$d$- и 4$f$-подрешеток.

Интерметаллиды $R$$Co_2$ перспективны для использования в качестве магнитокалорических материалов. Особый интерес к этим соединениям обусловлен магнитной нестабильностью их зонной $d$-подсистемы. В отсутствие $f$ - $d$ обменного взаимодействия подрешетка Co находится в парамагнитном состоянии. Приложение магнитного поля до 71 Тл в $YCo_2$ индуцирует метамагнитный переход в зонной системе электронов кобальта. В $R$$Co_2$ с магнитными $R$ подсистема Co упорядочена в поле межподрешеточного обменного взаимодействия, которое оказывается больше поля метамагнитного перехода. Во внешнем поле ожидаются два перехода, связанные с разупорядочением, а затем вновь с упорядочением подрешетки кобальта. Измерения критических полей метамагнитных переходов в полях до 350 Тл позволили получить полную достоверную информацию о величинах молекулярного поля межподрешеточного обменного взаимодействия в $R$$Co_2$.

Предложены модели, позволяющие объяснить наблюдаемые экспериментально закономерности формирования магнитного упорядочения и его изменения под действием магнитного поля в редкоземельных интерметаллидах.

Исследование поддержано Российским научным фондом, проект № 23-12-00265.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.02

# Пниктиды и халькогениды железа – необычная сверхпроводимость и нематическое состояние

**Коршунов М. М.[1], Тогушова Ю. Н.[2]**
[1] *Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск, Россия,* mkor@iph.krasn.ru
[2]*Сибирский Федеральный Университет, г. Красноярск, Россия,* ytogushova@sfukras.ru

В сложных системах нередко возникает сочетание нескольких конкурирующих или сосуществующих дальних порядков разной природы. К таким системам относятся пниктиды и халькогениды железа, многоорбитальные эффекты в которых приводят к возникновению необычной сверхпроводимости [1, 2]. Параметр порядка, имеющий противоположные знаки на разных листах поверхности Ферми, получил название состояние $s_{\pm}$, поскольку является вариантом расширенной $s$-симметрии. Многообразие экспериментальных данных по сверхпроводящему состоянию можно объяснить в рамках спин-флуктуационного механизма куперовского спаривания [3]. Помимо данных по спин-резонансному пику, обнаруженному в неупругом рассеянии нейтронов, спиновый экситон, характерный для состояния $s_{\pm}$, наблюдался и в спектрах Андреевского отражения [4].

Экспериментально обнаруженная разница в сопротивлении вдоль взаимно перпендикулярных направлений в плоскости железа в тетрагональной фазе [5] свидетельствует о возникновении электронного нематического порядка [6]. Описание влияния нематического порядка на формирование сверхпроводящего состояния проводилось на основе пятиорбитальной модели соединений железа. Вычисленный в рамках теории среднего поля нематический параметр порядка симметрии $B_{2g}$ зависит от коэффициента нематического взаимодействия $V_{nem}$ и меняется скачком при его увеличении. Нарушение симметрии поверхности Ферми приводит к нарушению симметрии с $C_4$ до $C_2$ в зависимости спиновой восприимчивости от волнового вектора $q$. В рамках спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания это приводит к тому, что в нематической фазе главное решение имеет структуру $s_{\pi\pm}$ типа и большую величину критической температуры $T_c$ перехода в сверхпроводящую фазу, чем обычные в случае отсутствия нематичности состояния $s_{\pm}$ и $d_{x^2-y^2}$ типов [6].

## Литература

1. Hirschfeld P. J., Korshunov M. M., Mazin I. I. // Rep. Progr. Phys. – 2011. – V. 74, – P. 124508.
2. Коршунов М. М. // Успехи физических наук. – 2014. – Т. 184. – С. 882.
3. Maiti S., Korshunov M. M., Maier T. A., Hirschfeld P. J., Chubukov A.V. // Phys. Rev. Lett. – 2011. – V. 107. – P. 147002.
4. Korshunov M. M., Kuzmichev S. A., Kuzmicheva T. E. // Materials. – 2022. – V. 15. – P. 6120.
5. Chu J.-H. *et al.* // Science. – 2010. – V. 329. – P. 824.
6. Fernandes R. M. *et al.* // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 85. – P. 024534.
7. Коршунов М.М., Тогушова Ю.Н. // Письма в ЖЭТФ. – 2024. – Т. 119 – В. 4. – С. 302-307.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.03

## О сверхпроводимости при нормальных условиях

**А.В. Садаков, В.М. Пудалов**

*Центр им. В.Л. Гинзбурга, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

Достижение сверхпроводимости в условиях окружающей среды, т.е. при температурах порядка комнатной и при атмосферном давлении, является проблемой огромной важности. В результате интенсивных исследований сверхпроводимости в полигидридах, проведенных в последние годы при МБ давлениях, сама возможность осуществления сверхпроводимости с критической температурой $T_c$ порядка 300К уже не вызывает сомнений. В частности, в тройном полигидриде $(La,Sc)H_{12}$ недавно обнаружено не только исчезновение сопротивления при 265К, но и признаки сверхпроводящего перехода в диапазоне 265-290К, выявленные как в DC-, так и в радиочастотных измерениях. Главным результатом проведенных исследований полигидридов является более глубокое понимание возможностей и ограничений электрон-фононного механизма спаривания и водородных связей. Однако, создание материалов с такими же высокими значениями $T_c$, но при нормальном давлении является намного более сложной задачей. Она требует новых подходов к решению и пока является вызовом как для теории, так и для эксперимента. В докладе будет дан краткий обзор состояния в данной области, выявленных ограничений на значения критической температуры, возможных путей решения этой проблемы, а также критический разбор нескольких новых сообщений на данную тему.

**Литература**

1. D.V. Semenok, I.A. Troyan, A.G. Ivanova, et al. “Superconductivity at 253 K in lanthanum-yttrium ternary hydrides”, Materials Today, 48, 18-24 (2021).
2. I.A. Troyan et al. “High-temperature superconductivity in hydrides” Phys. Usp. **65**, 748 (2022); https://doi.org/10.3367/UFNe.2021.05.039187
3. И. А. Троян, Д. В. Семенок, А. В. Садаков, И.С. Любутин, В. М. Пудалов, “Прогресс, проблемы и перспективы комнатно-температурной сверхпроводимости”, ЖЭТФ 166 вып.1(7), 74 (2024).
4. D.V. Semenok, I.A. Troyan, D.Zhou, A. Sadakov, K, Pervakov et al. “Ternary superconductor hydrides under pressure of Anderson theorem: Near record superconductivity in $(La,Sc)H_{12}$, Advanced Functional Materials (2025), in press.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.04

# Синтез, проводящие свойства, атомная структура редкоземельных молибдатов на основе флюоритоподобных фаз

**Алексеева О. А.[1], Орлова Е. И.[1,2]**
[1]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Разработка материалов с высокой кислородной и протонной проводимостью является ключевой задачей для создания эффективных твердооксидных топливных элементов. Перспективной альтернативой традиционным электродным материалам на основе перовскитных оксидов выступают соединения с флюоритоподобной структурой.

В работе представлены результаты исследования двух классов редкоземельных молибдатов $Ln_5Mo_3O_{16}$ и $Ln_2MoO_6$ (*Ln* = La – Dy) со структурой, производной от флюорита. Оба семейства материалов были модифицированы за счет гетеровалентного допирования, что позволило расширить их функциональные свойства. Для синтеза и анализа материалов $MLn_4Mo_3O_{15}X$ (*M* = Li, Na, K; *X* = F, Cl) и $Ln_{2-x}Me_xMoO_6$ (*Ln* = La-Dy; *Me* = Ca, Pb) применен комплекс методов, включающих твердофазный синтез поликристаллических образцов, рост монокристаллов из раствора в расплаве; рентгеноструктурный анализ в широком диапазоне температур (30-1050 К); дифференциальная сканирующая калориметрия и термогравиметрия; ИК- и люминесцентная спектроскопия; масс-спектометрия, сканирующая электронная микроскопия; импедансная спектроскопия для оценки проводимости в сухой и влажной средах, а также при различных парциальных давлениях кислорода.

Впервые получены монокристаллы номинальных составов $LiNd_4Mo_3O_{16}$, $LiLa_4Mo_3O_{15}F$, $NaLa_4Mo_3O_{15}F$, $NaLa_4Mo_3O_{15}F_{1-x}Cl_x$ ($x$ = 0–0.7), $DyPbMoO_6$. Исследование физических свойств полученных фаз показало их существенное изменение по сравнению с недопированными соединениями. Содопирование катионной и анионной подрешеток привело к появлению протонной составляющей проводимости, отсутствующей в исходных фазах $Ln_5Mo_3O_{16}$. Для соединений этого семейства обнаружен обратимый фазовый переход, сопровождающийся резким увеличением проводимости, достигающей $10^{-2}$ См/см при 1050К. По данным рентгеноструктурного анализа атомы Na(Li, Pb), локализуются вблизи позиций редкоземельных катионов, а примеси галогенов попадают в частично занятые общие позиции атомов кислорода и междоузлия. Методом прецизионного рентгеноструктурного анализа в интервале температур 293–1050 К установлены уход атомов хлора (фтора) из структуры и термоактивированное перераспределение атомов кислорода по базовым и межузельным позициям, а также обратимое изменение заселенности кислородных позиций при нагреве–охлаждении. Резкий рост проводимости происходит при одновременном выполнении трех условий: увеличении числа вакансий, появлении новых путей переноса заряда и, возможно, увеличении подвижности основных носителей заряда — ионов кислорода за счет электростатического отталкивания между анионами ($O^{2-}$, $F^-$, $Cl^-$).

Проведенные исследования демонстрируют, что редкоземельные молибдаты с флюоритоподобной структурой являются многофункциональными материалами, сочетающими высокую ионную и электронную проводимость, термическую стабильность и возможность тонкой настройки свойств через гетеровалентное легирование.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00221).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.05

## Лазерный эффект на звуке

**Астафьев О. В.[1,2], Сандуляну Ш. В.[2], Болгар А. В.[2], Шлыков П. Ю[1,2]**
[1]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*
[2]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

Мы экспериментально продемонстрировали фундаментальный эффект квантовой оптики – лазерное состояние в акустической (фононной) системе. Элементарная сверхпроводниковая квантовая система имеет набор уровней энергии подобно атому, поэтому её ещё называют искусственным атомом. Искусственный атом позволяет реализовать фундаментальные эффекты квантовой оптики на чипе и наблюдать ранее недостижимые явления. Нами уже было показано, что искусственный атом можно связать с резонатором на поверхностных акустических волнах в квантовом режиме с помощью встречно-штыревых преобразователей (ВШП) [1, 2]. В представляемой работе нам удалось реализовать лазерный режим в акустической системе на частоте ~3,5 ГГц. Искусственный атом был изготовлен в геометрии потокового кубита, чтобы реализовать механизм инверсной заселенности при накачке на третий уровень. Акустическое поле резонатора, в свою очередь, преобразовывалось в электрическое также с помощью ВШП и детектировалось. Мы обнаружили, что при определенных условиях, когда нижний переход находится близко к резонансу резонатора, а переход между основным и вторым возбужденным состоянием накачивался внешним полем, появляется «мощный» пик излучения близко к частоте резонатора. Причем ширина этого пика на порядок уже, чем собственная ширина пика резонатора, а число фононов в резонаторе в лазерном режиме достигало нескольких десятков.

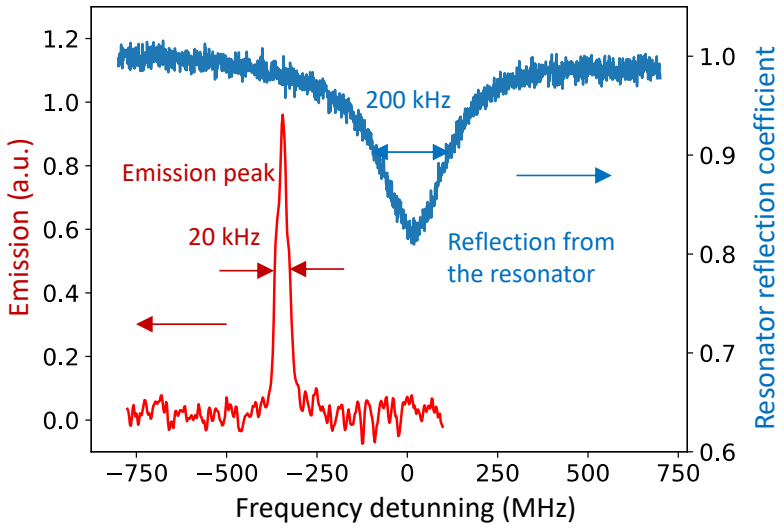



Рисунок. Синяя кривая: отражение от резонатора. Красная кривая: пик излучения в лазерном режиме. Измерения проводились в области частоты резонатора 3,5 ГГц.

### Литература

1. Aleksey N. Bolgar, Julia I. Zotova, Daniil D. Kirichenko, Ilia S. Besedin, Aleksander V. Semenov, Rais S. Shaikhaidarov, and Oleg V. Astafiev // Phys. Rev. Lett. 120, 223603 (2018).
2. A. N. Bolgar, D. D. Kirichenko, R. S. Shaikhaidarov, S. V. Sanduleanu, A. V. Semenov, A. Yu. Dmitriev, O. V. Astafiev // Commun. Phys. 3, 207 (2020).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.06

# Физика границ зерен и свойства ультрамелкозернистых материалов

**Валиев Р.З.**
*Институт физики перспективных материалов, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия, ruslan.valiev@ugatu.su*

Границы зерен (ГЗ, или межкристаллические границы) традиционно являются объектом прецизионных исследований в физическом материаловедении в связи с их необычной атомной структурой и важной ролью в свойствах материалов [1-3]. В связи с появлением в начале этого века и развитием тематики ультрамелкозернистых (УМЗ) материалов, включая нанокристаллические материалы, интерес к их изучению существенно возрос. Многочисленные исследования последних лет свидетельствуют, что наноструктурирование металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформацией (ИПД), связанные с образованием УМЗ структуры и наноразмерных частиц вторых фаз и нанокластеров, открывает возможность значительного повышения их механических и функциональных свойств [4, 5].

В УМЗ материалах с размерами зерен менее 1 мкм границы зерен имеют наибольшую протяженность и играют определяющую роль в свойствах материалов. В докладе представлены результаты недавних исследований классификации разных типов ГЗ в УМЗ материалах, где выделены 4 типа межкристаллических границ – мало- и большеугловые ГЗ, специальные и произвольные, равновесные и неравновесные, с внесенными зернограничными дислокациями, а также границы, содержащие сегрегации легирующих элементов.

Такие границы оказывают решающее влияние на механизмы деформации – диффузию, проскальзывание по границам и др. и, как результат, определяют уникальные свойства УМЗ материалов. Как пример, в докладе рассмотрены реализация сверхвысокой прочности и сверхпластичности в ряде наноструктурных сплавов, подвергнутых ИПД обработке. Обсуждаются также их инновационные применения в технике и медицине [4, 5].

**Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00445-П**, https://rscf.ru/project/22-19-00445/

## Литература

1. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л.К. // (под ред. Л.Г. Орлова) Границы зерен в чистых материалах. - Москва: Наука, 1987. - 158 с.
2. Валиев Р.З., Вергазов А.Н., Герцман В.Ю. // Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ в практике электронной микроскопии. – Москва: Наука, 1991. – 230 с.
3. Suton A.P., Balluffi R.W. //Interfaces in crystalline materials. – Oxford University Press, 1995.
4. Валиев Р.З., Жиляев А.П., Лэнгдон Т.Дж. //Объемные наноструктурные материаы. Фундаментальные основы и применения. – Санкт-Петербург: Эко-вектор, 2017. – 479 с.
5. Valiev R.Z., Alexandrov I.V., Kawasaki M., Langdon T.G.// Ultrafine-Grained Materials. - SpringerNature, 2024.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.07

# ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

**Варюхин В.Н., Малашенко В.В.**
*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, РФ*
*malashenko@donfti.ru*

Анализ неупругих процессов, происходящих в функциональных материалах под действием высокоэнергетических внешних нагрузок, привлекает все большее внимание исследователей в связи с важностью их понимания как с научной, так и с практической точек зрения. Такие нагрузки могут быть реализованы как в процессе обработки функциональных материалов, так и на стадии эксплуатации [1]. Под действием таких нагрузок происходит высокоскоростная пластическая деформация металлов и сплавов, которая характеризуется тем, что дислокации как основные носители пластической деформации совершают надбарьерное скольжение по кристаллу. Такое движение имеет динамический характер: дислокация преодолевает другие структурные дефекты без помощи термических флуктуаций. Развитая нами теория динамического взаимодействия дефектов (ДВД) позволяет в рамках единого подхода решить широкий круг задач динамики дислокаций, предсказать существование новых динамических эффектов, а также выявить общие черты динамического поведения систем совершенно разной физической природы, обладающих колебательными степенями свободы [2-4]. Динамическая область охватывает дислокационные скорости 10-$10^3$м/с. Механизм диссипации заключается в необратимом переходе энергии внешних воздействий в энергию поперечных дислокационных колебаний в плоскости скольжения. Он весьма чувствителен к условиям возбуждения дислокационных колебаний, т.е. зависит от вида колебательного спектра, в первую очередь от наличия в нём щели, создаваемой коллективными взаимодействиями. Учет этих взаимодействий позволил предсказать новые динамические эффекты, обнаружение которых может оказать стимулирующее влияние на постановку новых целенаправленных экспериментов. Это эффект сухого трения, ориентационный эффект динамического взаимодействия краевых дислокаций с круговыми дислокационными петлями, эффект блокировки динамического торможения дислокаций точечными дефектами в приповерхностной области, зависимость динамического торможения от типа дислокаций. Проанализировано влияние постоянного магнитного поля на динамику дислокаций в низкотемпературной области и влияние давления при комнатных температурах. Показаны общие черты динамического поведения в следующих процессах: динамическое торможение дислокаций точечными дефектами, торможение дислокаций атмосферами Снука и Коттрелла в термофлуктуационной области, торможение дислокаций магнонами, торможение 180-градусной доменной стенки точечными магнитными дефектами, работа туннельного диода и эффект Ганна, заряд ионистора. Показаны общие черты возникновения динамической неустойчивости при торможении дислокаций точечными дефектами, в эффекте Ганна и эффекте Портевена-Ле-Шателье.

## Литература

1. Razorenov S.V. Matter and Radiation at Extremes. – 2018. – Vol. 3. – P. 145
2. Malashenko V.V., Sobolev V.L., Khudik B.I. Phys. Stat. Sol. (b). – 1987. –V. 143. – No. 2, 425 – 431.
3. Варюхин В.Н., Малашенко В.В. Известия РАН. Серия физ. – 2018. – Т. 82. – С. 1213-1218.
4. Малашенко В.В. 2024. – ФТТ. – 2024. – Т. 66. – № 8. – 1403-1407.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.08

# Перспективы применения синхротронного излучения для решения диагностических и технологических задач в микроэлектронике

**Рощупкин Д.В.**
*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, rochtch@iptm.ru*

Создание источников синхротронного излучения 3 и 4 поколений, лазеров на свободных электронах позволяет решать огромный круг диагностических задач в микро- и наноэлектронике. Современные источники синхротронного излучения, обладающие пространственно-временной когерентность излучения, позволяют реализовать методы высокоразрешающей рентгеновской микроскопии и развивать методы рентгеновской литографии для формирования наноразмерных структур.

Высокая интенсивность и пространственно-временная когерентность синхротронного излучения позволяют реализовать различные методы рентгеновской микроскопии, включая микрофлуоресцентную микроскопию, рентгеновский метод наведенного тока и ряд других методов и подходов. На рис. 1 представлена возможность реализации рентгеновской микроскопии с использованием эффекта Тальбота, когда на расстоянии Тальбота можно наблюдать прямое изображение бегущей поверхностной акустической волны (ПАВ). В данном случае длина волны ПАВ составляла Λ=10 мкм.

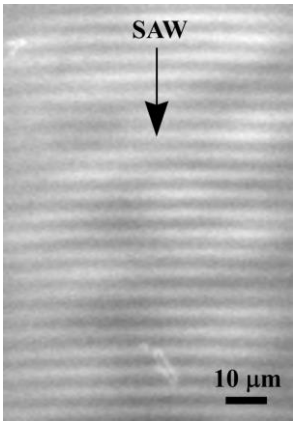



Рис. 1. Изображение поверхностной акустической волны с длиной волны Λ=10 мкм в режиме реального времени.

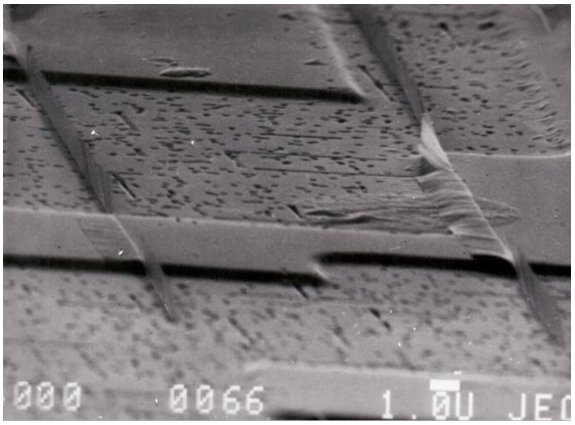


Рис. 2. Рентгеновская литография в ПММА с размером элементов 5 нм.

Кроме решения задач диагностики и материаловедения синхротронное излучение может быть использована и для решения задач рентгеновской литографии с использованием мягкого и жесткого рентгеновского излучения. На рис. 2 представлена возможность рентгеновской литографии для формирования структур в резисте ПММА с размером элементов 5 нм. Также для целей рентгеновской литографии может быть использован и эффект Тальбота, когда на кратных расстояниях Тальбота могут быть получены уменьшенные изображения структур.

В заключение следует отметить, что использование синхротронного излучения позволяет существенно расширить горизонты методов материаловедения и диагностики, решать технологические задачи в микро- и наноэлектронике.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.09

# Дефекты структуры и микротвердость кристаллов $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$, выращенных методом зонной плавки

**Ажгалиева А.С., Борисенко Е.Б., Борисенко Д.Н., Колесников Н.Н., Тимонина А.В., Шахлевич О.Ф.**

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, azhgalieva@issp.ac.ru*

$Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ (CZT) известен как материал для детекторов ионизирующего излучения. Содержание цинка позволяет варьировать значение ширины запрещенной зоны, обеспечивая высокое разрешение и работу детекторов без охлаждения при комнатной температуре. В этой работе для выращивания используется метод вертикальной зонной плавки под давлением инертного газа, который имеет некоторое преимущество над традиционными методами выращивания кристаллов CZT, такими как различные модификации метода Бриджмена и метод движущегося нагревателя. Трудности получения из расплава кристаллов с требуемыми характеристиками обычно связаны с неоднородностью состава, протяженными дефектами, включениями и преципитатами. Включения и преципитаты частиц теллура оказывают негативное влияние на подвижность и время жизни носителей заряда, на энергетическое разрешение и отклик детектора, поскольку они работают как электронные ловушки. Как правило, частицы размером 10–20 мкм оказывают наиболее негативное влияние на работу детектора.

Кристаллы, выращенные из расплава, имели длину 90–120 мм и диаметр 28 мм. Кристаллы представляют собой твёрдый раствор с параметрами элементарной ячейки a=6,458 Å, что соответствует формуле $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$. В выращенных кристаллах CZT наблюдаются включения размером 70–150 мкм, их плотность составляет $3{,}5\cdot10^{2}$ $см^{-2}$. Согласно микроэлементному анализу, эти частицы содержат в основном Te. Несмотря на это, пропускание образцов в диапазоне 2,5-25 мкм находится на уровне 60%. Плотность ростовых дислокаций, выявленных с помощью травления по (110), составляет $\rho_d = 4 \cdot 10^4$ $см^{-2}$. В кристаллах наблюдаются и другие микро- и наноструктурные дефекты. В основном это дислокации и двойники.

На основе полученных данных о размерах и распределении включений частиц теллура была оценена скорость роста частиц и коэффициент диффузии Te в теллуриде цинка-кадмия, который составляет $8\cdot 10^{8}$ $см^2/с$. Была исследована зависимость микротвердости по Виккерсу кристаллов $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ при нагрузках от 0.2 до 2 Н, которая в области пластической деформации составляет 830 МПа.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.10

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАСПЛАВОВ СИСТЕМЫ Cu-Al С MAX-ФАЗАМИ $(Cr_{1-x}Mn_x)_2AlC$: СМАЧИВАНИЕ, ПРОПИТКА И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ

**Жевненко С.Н.[1], Горшенков М.В.[2], Горшков В.А.[3]**
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* zhevnenko@misis.ru
[2]*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* mvg@misis.ru
[3]*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* gorsh.57@mail.ru

В работе исследовали взаимодействие расплавов Al, Al+2ат%Cu, Al+17 ат%Cu, Al+33 ат%Cu, Cu 17 ат%Al и чистой меди с $(Cr_{0.95}Mn_{0.05})_2AlC$ и $Cr_2AlC$ в интервале температур 1030 - 1100 ºС при нагреве. Наблюдение за поведением капли расплава на поверхности пористых прессованных заготовок из MAX-фаз производили с помощью скоростных видео и термовизионной камер [1]. Эксперименты были выполнены в вакууме $10^{-3}$ Па. Порошки MAX фазы получали путем самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, которые очищались в соляной кислоте, после чего из них изготавливались пористые заготовки путем прессования при комнатной температуре. В работе показано, что расплав чистого алюминия при высоких температурах равномерно растворяет MAX фазу, не смачивая ее и не впитываясь в пористое пространство. Взаимодействие с расплавом расплава чистой меди приводит к распаду MAX фаз и образованию жесткого каркаса из карбида хрома, пропитанного бронзой Cu(Al,Cr). Варьируя содержание алюминия в меди, можно предотвратить полный распад MAX-фазы, при этом произвести пропитку и спайку порошка MAX-фазы, получив механически прочный материал. Двухкомпонентные расплавы высокой концентрации Al+17 ат%Cu, Al+33 ат%Cu, Cu 17 ат%Al в основном пропитывают пористую $(Cr_{0.95}Mn_{0.05})_2AlC$, скрепляя порошок. В близи контактной поверхности расплавы растворяют MAX-фазу и в расплаве образуется карбид алюминия. По изменению объема капли на поверхности от времени была определена скорость движения фронта расплава Al+33 ат%Cu внутри пористой $(Cr_{0.95}Mn_{0.05})_2AlC$ при двух температурах. Она оказалась равной 0,08 мм/с при 1050 ºС и 0,21 мм/с при 1130 ºС. Измерения микротвердости в пропитанной Al+33 ат%Cu пористой $(Cr_{0.95}Mn_{0.05})_2AlC$ и распавшейся в контакте с расплавом меди MAX-фазе показали небольшое увеличение механических свойств в первом случае и сильное увеличение твердости во втором. Результаты работы позволяют сделать рекомендации по пропитке расплавом Al+33 ат%Cu порошков $(Cr_{0.95}Mn_{0.05})_2AlC$ и $Cr_2AlC$ для создания композиционного материала, в котором необходимо сохранить MAX-фазы.

Работа выполнена при поддержке грантом РНФ 23-19-00657

## Литература

1. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.11

# Капиллярные осцилляции капли меди и медно-галлиевых расплавов на поверхности вольфрама

**Жевненко С.Н., Слинкин М.М.**
*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* zhevnenko@misis.ru

В экспериментах наблюдали за падением капель меди и медно-галлиевых расплавов на поверхность вольфрама с помощью высокоскоростной съемки с частотой 15000 – 20000 $с^{-1}$. Использовали высоковакуумную установку (вакуум до $10^{-3}$ Па), позволяющую проводить высокоскоростную съемку при высоких температурах (более 2000 ºС) [1]. При падении капли на поверхность она осциллирует: периодически меняются контактные углы, диаметр пятна контакта, центр масс (рис. (влияющий на контактный угол смачивания, поверхностное натяжение и плотность расплава). Частоту основной, низкочастотной моды колебаний анализировали в зависимости от указанных параметров. Результаты сравнивали с теоретическими предсказаниями, полученными в работе [2].

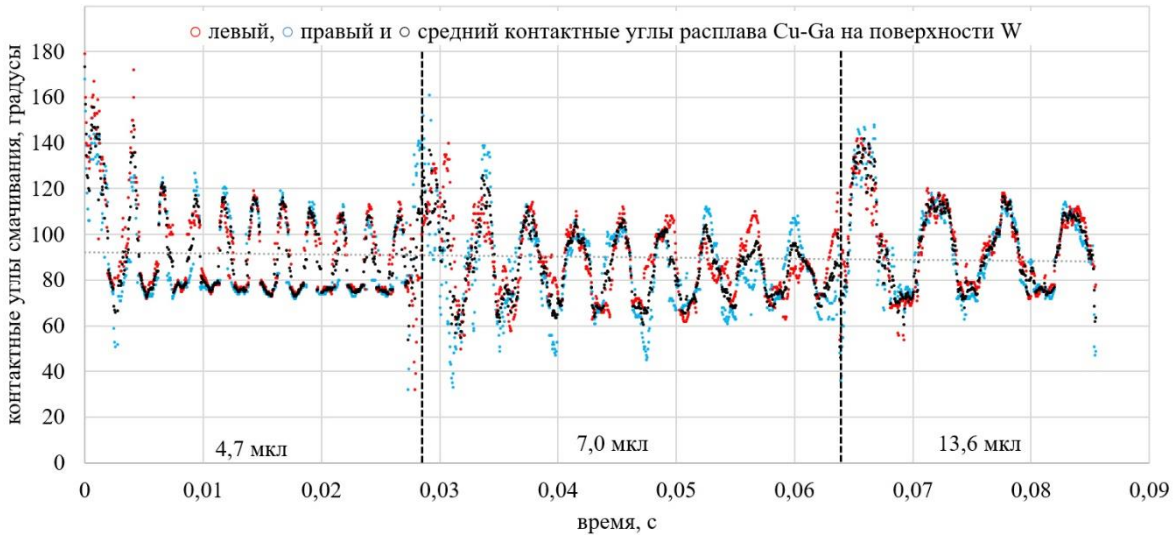



Рис. 1 Зависимость частоты колебаний капли расплава меди на поверхности от ее объема

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSME-2023-0007

## Литература

1. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.
2. Sakakeeny J., Yue L. Natural oscillations of a sessile drop on flat surfaces with mobile contact lines // Physical Review Fluids – 2020 – V. 5 - P. 123604.

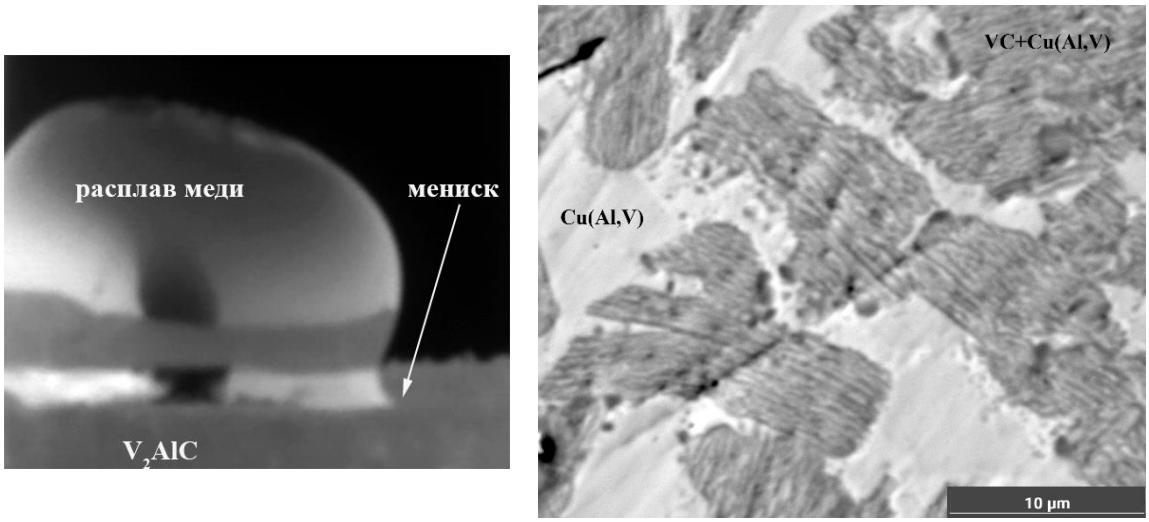
DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.12

# Капиллярное взаимодействие расплава меди с MAX-фазой $V_2AlC$

**Жевненко С.Н.[1], Горшков В.А.[2]**
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* zhevnenko@misis.ru
[2]*НИТУ МИСИС, Москва, РФ,* gorsh.57@mail.ru

В работе исследовали капиллярное взаимодействие расплава чистой меди с слоистой MAX-фазой $V_2AlC$ при различных температурах в интервале 1100 - 1250 ºС. Наблюдение за поведением капли расплава на поверхности пористых прессованных заготовок из MAX-фаз производили с помощью скоростных видео и термовизионной камер [1]. Эксперименты были выполнены в вакууме $10^{-3}$ Па.

При всех температурах капли расплава при контакте формировали контактный угол значительно меньше 90º (рис. 1а), растекались по поверхности и впитывались. При этом, $V_2AlC$ под воздействием расплава распадалась на карбид ванадия, алюминий и часть ванадия переходили в расплав. Структура карбида ванадия также является слоистой (рис. 1б), по-видимому, отражая механизм взаимодействия расплава с MAX-фазой: выход Al и V из фазы вдоль слоев и/или расслоение и затекание расплава.




а б

Рис. 1 Вид капли расплава меди при контакте с поверхностью $V_2AlC$ (а) и микроструктура поперечного шлифа после впитывания капли (б)

Из данных высокоскоростной съемки была определена динамика установления контактного угла смачивания и кинетика впитывания расплава. Термовизионная съемка указывает на наличие значительного эндотермического теплового эффекта при взаимодействии MAX-фазы с расплавом.

Работа выполнена при поддержке грантом РНФ 23-19-00657

## Литература

1. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.13

# Экспериментальное исследование изменения плотности листов при получении низколегированных сплавов молибдена ЛМ1 и ЛМ2

**Гнесин Б. А., Карпов М. И., Гнесин И. Б., Внуков В.И., Строганова Т. С., Прохоров В. Д., Желтякова И. С.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,*
gnesin@issp.ac.ru

Исследованы плотности листов низколегированных молибденовых сплавов ЛМ1 и ЛМ2 с карбидным упрочнением в условиях опытного производства ИФТТ РАН. Плотность измеряли методом Архимеда на образцах, отобранных на различных этапах производства. После электронно-лучевой плавки (ЭЛП) плотность сплавов ЛМ1 и ЛМ2 составила 10,113 и 10,121 г/см$^3$, соответственно. Горячая, теплая и холодная прокатки, высокотемпературные отжиги сформировали различные распределения карбидов в структуре тонких холоднокатаных листов [1].

Плотность сплава ЛМ1 после горячей прокатки до 5,10 мм составила ~10,117 г/см$^3$, после отжига она возросла до ~10,146 г/см$^3$. Плотность образцов сплава ЛМ2 даже после горячей прокатки до толщины 5,10 мм составила ~10,055 г/см$^3$, несколько упав в сравнении с плотностью литой заготовки этого сплава. Если для ЛМ2 после горячей прокатки были характерны лишь редкие и короткие трещины расслоения, которые, вероятно, возникали и росли вблизи карбидных частиц, то при холодной прокатке, когда деформация карбидов вообще невозможна и явно несовместна с деформацией молибденовой матрицы, образование и рост трещин значительно усиливаются, и после холодной прокатки до 0,17 мм плотность ЛМ2 упала до ~10,007 г/см$^3$. Введение перед холодной прокаткой промежуточного высокотемпературного отжига при 1550°С привело для листов ЛМ2 толщиной 0,17 мм к плотности ~10,141 г/см$^3$.

Понижение плотности обусловлено накоплением дефектов (трещин и пор) в процессе деформации при прокатке, а увеличение плотности связано с частичным залечиванием дефектов во время отжигов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

## Литература

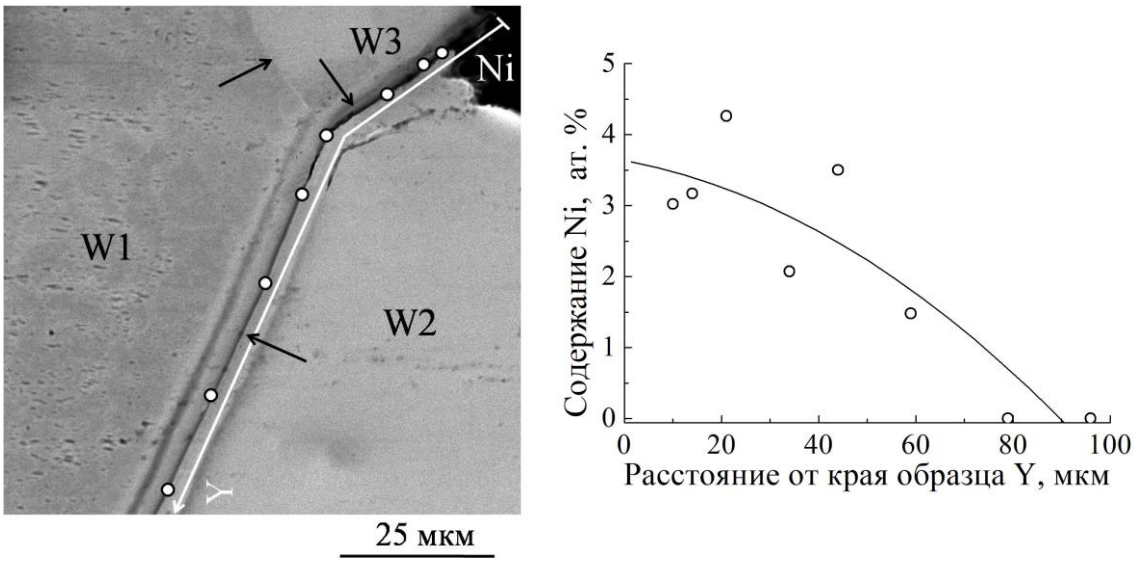
[1] Gnesin B.A., Karpov M.I., Aristova I.M., Gnesin I.B., Postnova E.Yu., Abrosimova G.E., Vnukov V.I., Zheltyakova I.S., Prokhorov D.V., Stroganova T.S. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – Vol. 18, Iss. 6. – P. 1712–1722.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.14

# ПРОНИКНОВЕНИЕ РАСПЛАВА НИКЕЛЯ ПО ГРАНИЦАМ ТРИКРИСТАЛЛА ТВЕРДОГО ВОЛЬФРАМА

**Сурсаева В. Г., Кийко В. М.**
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия,* kiiko@issp.ac.ru

Как смачивание поверхности, так и проникновение и распределение жидких фаз по границам зерен играет важную роль в синтезе тугоплавких металлов [1, 2], влияя на их прочность, теплопроводность, электропроводность и другие свойства [3].




а б

Рис. 1. а – участок вертикального сечения образца Ni-W, стрелками показаны границы между зернами W1, W2 и W3, черно-белые «точки» – места рентгеноструктурного элементного микроанализа; б – содержание никеля в «точках» вдоль оси Y, показанных на рис. 1а, линия – аппроксимация экспериментальных значений.

Трикристалл вольфрама был получен на ростовой экспериментальной установке «Зона» Института физики твердого тела РАН. Ni-W – образец был изготовлен путем плавления никеля в вакууме на трикристалле вольфрама при температуре 1600 $^{o}$C с выдержкой в течение 1 часа. На рис. 1а показан участок сечения у края вольфрамового образца, покрытого расплавом никеля, с границами раздела между зернами вольфрама. Зависимость содержания никеля вдоль границ раздела зерен вольфрама от края образца, покрытого никелем, показана на рис. 1б. Убывающая зависимость – оценочно – квадратичная.

## Литература

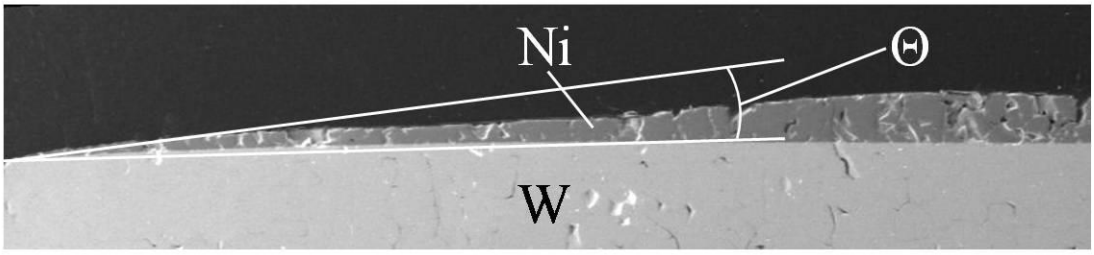
1. Glebovsky V. G., Straumal B. B., Semenov V. N., Sursaeva V. G., Gust W. // High Temp. Ma ter. & Processes 13. – 1994 – No. 3 – P. 67-73.
2. Сурсаева В. Г., Глебовский В. Г., Семенов В. Н., Копецкий Ч. В., Шульга Ю. М., Швиндлерман Л. С. // Физика металлов и металловедение. – 1985. – Т. 59. – Вып. 4. – С. 807-814.
3. Страумал Б.Б. Фазовые переходы на границах зерен. – 2003. – М.: «Наука». – 328 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.15

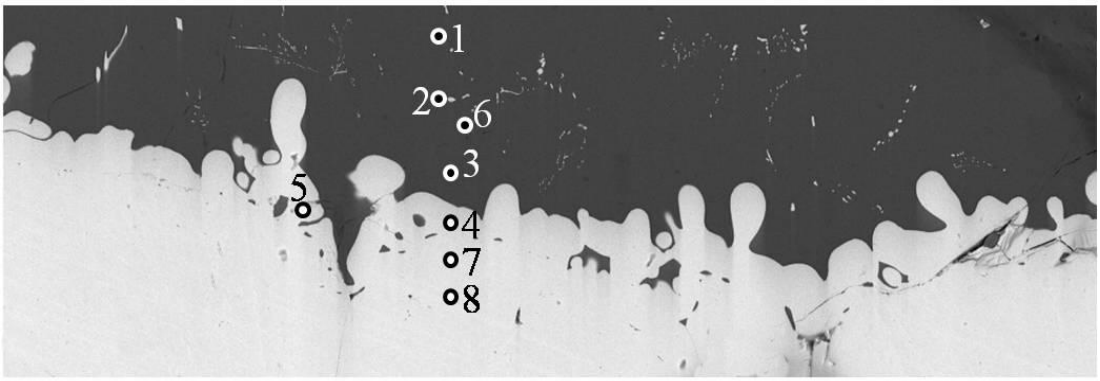
# СМАЧИВАНИЕ РАСПЛАВОМ НИКЕЛЯ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛЬФРАМА

**Кийко В. М.[1], Слижевская Я. Ю.[2,3], Страумал Б. Б.[1,2]**
*[1]Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия*
*[2]Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», г. Москва, Россия*
*[3]Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия*
kiiko@issp.ac.ru

Образец никель-на-вольфраме изготавливался путем плавления брусочка никеля на полированной поверхности поликристаллического вольфрама в вакуумной печи при температуре 1800 °С с выдержкой в течение 1 часа.




а




б

Рис. 1. а –участок вертикального сечения образца Ni-на-W, Θ – краевой угол смачивания; б – участок вдоль границы Ni–W: «точки» 1–8 – места локального микроанализа химических элементов.

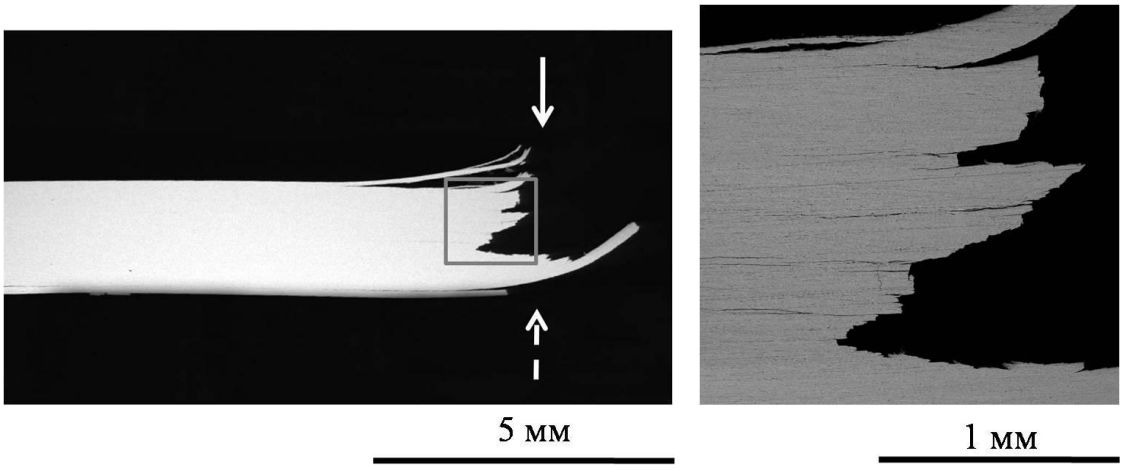
Снимки под электронным микроскопом, оснащенном энергодисперсионным локальным рентгеноспектральным микроанализатором, участков металлографического шлифа вертикального сечения образца показаны на рис. 1. На рис. 1а показан краевой угол смачивания Θ, равный 3°46′ ± 7′. На рис. 1б показан результат взаимодействия никеля и вольфрама: в точках 1–3 – твердые растворы с преобладанием никеля, в «точках» 4 и 5 обнаружено соединение $Ni_4W$; в точке 6 – соединение $NiW_2$, а в «точках» 7–8 – твердые растворы с преобладанием вольфрама.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.16

# СЛОИСТЫЙ МОЛИБДЕНОВЫЙ КОМПОЗИТ: ПОЛУЧЕНИЕ И СТРУКТУРА

**Кийко В. М., Коржов В. П.**
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия,* kiiko@issp.ac.ru

Получение и исследование слоистого молибден-молибденового композита нацелено на разработку как собственно молибденового материала [1] с повышенной трещиностойкостью, так и на разработку технологической схемы изготовления тугоплавких металлических матриц [2] для слоисто-волокнистых композитов.




а б

Рис. 1. а – участок продольного сечения слоистого образца из молибдена после испытаний на трехточечный изгиб, сплошная стрелка указывает направление приложения нагрузки, пунктирная – направление распространения макротрещины; б – область, выделенная рамкой на рис. 1а.

Образец изготовлен путем диффузионной сварки пакета фольг из технически чистого молибдена в вакууме под нагрузкой в режиме 1400 ºС – 13 МПа – 2 ч. Такой способ получения материала при температурах существенно более низких, чем при плавильных способах, позволяет в значительной мере сохранить положительные свойства исходных материалов, а выбор режима диффузионной сварки обеспечивает нехрупкий характер разрушения сформированной структуры. Катанная молибденовая фольга, как известно, имеет боле высокую прочность в сравнении с объемными молибденовыми блоками, что также обеспечивает повышенную прочности слоистой структуры. На рис. 1а показан участок продольного сечения образца после разрушения в результате испытаний. Траектория макротрещины извилиста и в основном соответствует слоистой структуре материала, которая ведет к повышению трещиностойкости композита в целом. Расслоения и сдвиги по границам разделов компонентов слоистой структуры (рис. 1б) приводят к дополнительной диссипации энергии, также увеличивающей сопротивление материала разрушению наряду с множественными областями пластической деформации молибдена в области разрывов фольг.

## Литература

1. https://yandex.ru/search/?text=прочность+молибденовых+сплавов&clid=2411726&lr=219
2. Милейко С. Т. // Прикладная механика и техническая физика. – 2014. – Т. 55. – № 1 – С. 166-178.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.17

# ПРОЧНОСТЬ И ДЕФОРМИРОВАНИЕ СЛОИСТОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ МОЛИБДЕНА В ИНТЕРВАЛЕ 20–1400 ºС

**Кийко В. М., Коржов В. П., Орлов В.И.**
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия*, kiiko@issp.ac.ru

Изделия из молибдена, как правило, применяются в широком диапазоне температур. Возникающая при этом рекристаллизация структур может приводить к охрупчиванию молибдена [1, 2]. Предлагаемый композитный материала, получаемый методом диффузионной сварки катанного молибдена в виде фольг, в значительной мере решает проблему хрупкости. На макроскопическом уровне это проявляется в виде деформационных кривых, характерных для нехрупких материалов. Примеры такого поведения композитных образцов под нагрузкой показаны на рис. 1а, 1б, 1в, 1г. Прочности образцов в интервале 20 – 1400 ºС (рис. 1д) во многих случаях существенно превосходят прочности известных сплавов на основе молибдена [3].

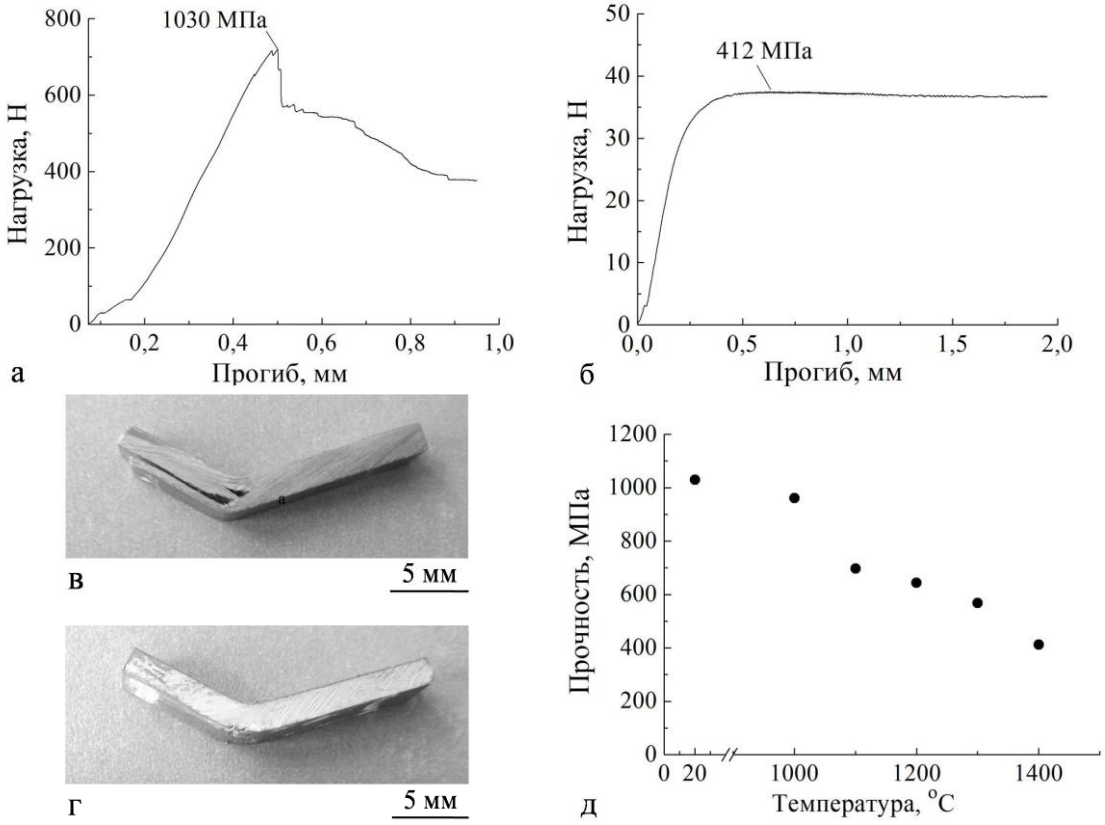



Рис. 1. Диаграммы нагрузка – прогиб образцов при испытаниях на трехточечный изгиб: а – при 20 ºС, б – при 1400 ºС (в поле графиков указаны максимальные напряжения); в и г – образцы после испытаний; д – зависимость прочности образцов от температуры.

## Литература

1. Колачев Б.А., Ливанов В.А., Елагин В.И. Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов / Москва: Металлургия. – 1988. – 294 с.
2. Молибден. Под ред. Натансона А. / Москва: Иностранная литература. – 1959. – 304 с.
3. https://yandex.ru/search/?text=прочность+молибденовых+сплавов&clid=2411726&lr=219

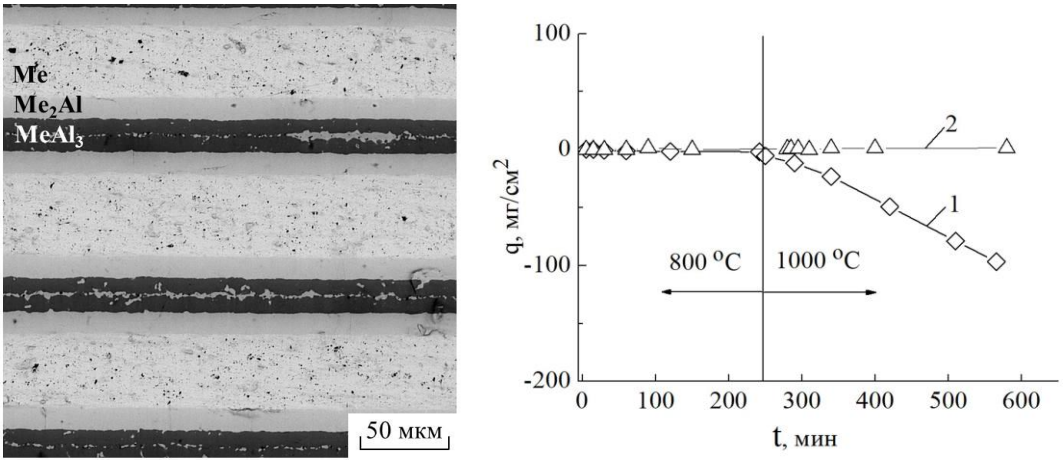
DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.18

# Жаростойкость композитов на основе ниобия и молибдена с интерметаллидным упрочнением и хром-алмазным покрытием

**Коржов В. П., Кийко В. М., Строганова Т. С., Желтякова И. С.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,*
korzhov@issp.ac.ru

Исследованы микроструктура и жаростойкость композитов на основе ниобия или молибдена со слоистой структурой, состоящей из чередующихся слоев твёрдого раствора Al в Mo (или Nb) и слоев интерметаллидов $Me_2Al/MeAl_3/Me_2Al$ (где Me = Mo или Nb) (рис.1 а). На основе рентгеноспектрального и рентгеноструктурного анализов установлен состав электрохимического хромового покрытия, модифицированного наноалмазными частицами. Покрытие с толщиной ~55 мкм характеризовалось высокой плотностью и воспроизводило рельеф поверхности подложки [1]. Испытания композитов на жаростойкость (рис. 1 б) показали, что покрытие было устойчивым вплоть до 1000°C, однако, выше этой температуры Mo/Al-композит подвергался интенсивной коррозии из-за образования летучих оксидов молибдена, причём разрушение инициировалось в области технологического отверстия в образце. Nb/Al-композит продемонстрировал более высокую устойчивость: после 10 часов испытаний (см. рис 1) геометрическая форма образца композита сохранилась, а потери массы отсутствовали.

Установлено, что причиной полной деградации стержня Mo/Al-композита стало технологическое отверстие, приведшее стержень к коррозионному разрушению изнутри и последующему растрескиванию хрупкого защитного покрытия. Результаты работы указывают на необходимость оптимизации технологии нанесения защитных покрытий.




а) б)

Рис.1. Микроструктура композита Me/Al (а) и удельные изменения массы q Mo/Al- (1) и Nb/Al-образцов (2) композитов с хром-алмазным покрытием в зависимости от времени выдержки t на воздухе при 800°C в течение 4 ч и затем при 1000°C в течение 6 ч (б).

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

[1] Petkov V., Aleksandrova M., Valov R., Korzhov V., Kiiko V., Stroganova T. // International Scientific Journals «Machines. Technologies. Materials». – 2023. – V.17 – Iss. 2. – P. 67–69.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.19

# Спектрально-кинетическая характеризация композитных структур $CeF_3/CeO_2$, активированных ионной парой $Nd^{3+}/ Yb^{3+}$ для целей температурной сенсорики

**Докудовская А. К.[1], Рахматуллин Р. М.[1], Семашко В. В.[1,2], Кораблева С. Л.[1], Морозов О. А.[1,2], Родионов А. А.[1], Пудовкин М. С.[1]**

[1]*Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань*, Россия, fyz0561999@gmail.com

[2] *Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань*, Россия

**Введение.** Температурное картирование методом люминесцентной термометрии является очень мощным инструментом для получения информации о температуре исследуемого объекта и ее распределении с субмикронным пространственным разрешением. Эта методика востребована в гипертермии, производстве микросхем, стоматологии, теромогенетике и т. д. Благодаря низкой энергии фононов, высокой химической и механической стабильности, отсутствию фотообесцвечивания и низкой цитотоксичности оксиды и фториды церия, а также композиты на их основе являются крайне перспективными материалами для многих научных, медицинских и промышленных целей.

**Результаты и обсуждения.** Были синтезированы однофазные (гексагональная структура) наночастицы $Nd^{3+}$(мол. 0.1%), $Yb^{3+}$ (мол. 0.5%): $CeF_3$ методом соосаждения. Эти наночастицы отжигали на воздухе при 600 ◦C в течение 15, 30, 60 и 120 мин для получения двухфазных наночастиц $Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3/CeO_2$. После 120 мин отжига были получены однофазные $Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$: $CeO_2$ (кубическая фаза). Частицы $Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3/CeO_2$ (15, 30 и 60 мин) продемонстрировали комбинации фаз $CeF_3$ и $CeO_2$. Физический размер образцов постепенно увеличивался от 19 нм ($Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3$) до ~ 409 нм ($Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3/CeO_2$ (120 мин)). Предполагается, что двухфазные образцы состоят из спечённых наночастиц $CeF_3$ и $CeO_2$ со средним размером ОКР ~65 нм. В качестве температурно-зависимого параметра было взято отношение интенсивностей полос люминесценции (LIR) (LIR = $I_{Nd}/I_{Yb}$) (Рис.1.). Убывающий характер функции LIR для $CeF_3$ связан с тем, что $Nd^{3+}$ передает энергию $Yb^{3+}$ посредством резонансного переноса при участии фононов, который более эффективен при более высоких температурах. Возрастающий характер функции LIR для однофазных $CeO_2$ связан с тем, что трехвалентные легирующие ионы образуют кластеры, в которых концентрационное тушение, в частности, $Yb^{3+}$ происходит более эффективно по отношению к передаче энергии от $Nd^{3+}$ к $Yb^{3+}$. LIR для двухфазных образцов более сложны и могут рассматриваться как комбинация LIR однофазных образцов.

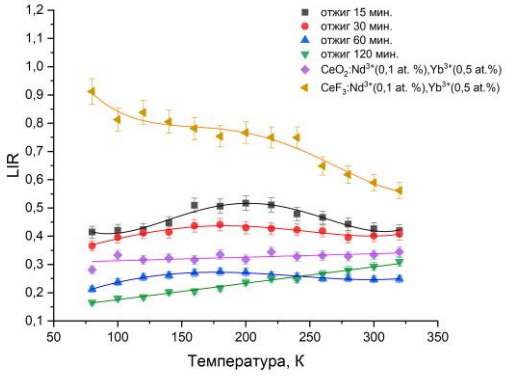



Рис.1. Зависимость функции LIR от температуры однофазных ($Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3$ и $Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeO_2$) и двухфазных $Nd^{3+}$, $Yb^{3+}$:$CeF_3/CeO_2$ образцов.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.20

# Индуцированное беспорядком сосуществование зонного низкоспинового и локализованного высокоспинового состояний Mn в легированном родием MnSi

**Краснорусский В. Н.[1], Боков А. В.[1], Волкова З. Н.[1,2], Геращенко А. П.[1,2], Щелкачев Н. М.[1], Магницкая М. В.[1], Сканченко Д. О.[1,3], Алтынбаев Е. В.[1,3], Алферьев И. В.[4], Саламатин Д. А.[1], Сидоров В. А.[1], Семено А. В.[1,5], Бражкин В. В.[1], Цвященко А. В.[1]**

[1]*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[3]*НИЦ ПИЯФ "Курчатовский институт", Санкт-Петербург, Россия*
[4]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
[5]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*
magnma@yandex.ru

Несмотря на 60-летнюю историю исследований зонного магнетизма в MnSi, эта область остается актуальной для изучения. Интерес к ней сохраняется, хотя физика слабого зонного магнетизма осложнена малыми магнитными моментами и неоднозначной ролью локальных взаимодействий.

В данной работе исследуются легированные родием соединения MnSi, в которых методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на $^{55}$Mn было обнаружено высокоспиновое (HS) состояние магнитных моментов Mn. Легирование MnSi родием приводит к переходу в HS-состояние для $Mn_{1-x}Rh_xSi$ при $x = x_c \approx 0.025$, где возникают два магнитных момента на атоме Mn ($\approx 1.3$ и $2.2\ \mu_B$), упорядочивающихся ниже 200 K. Однако этот переход затрагивает лишь часть атомов Mn, тогда как остальные сохраняют низкоспиновое (LS) состояние. При этом взаимодействие Дзялошинского–Мории (DM) для спиральных LS-состояний моментов Mn сохраняется вплоть до $x \approx 0.13$.

Кроме того, изменение концентрации Rh приводит к заметным изменениям в фазовых диаграммах «магнитное поле – температура». В частности, обнаружено, что температурный интервал существования A-фазы, отвечающей за скирмионную решетку исходного соединения, значительно расширяется при легировании родием вплоть до $x = 0.025$. Метод малоуглового нейтронного рассеяния подтвердил наличие скирмионной решетки в геликоидальной магнитной фазе $Mn_{0.98}Rh_{0.02}Si$. Таким образом, легированный родием MnSi демонстрирует сосуществование HS и LS состояний Mn.

Наши расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT) показали, что такое поведение возможно только в случае, когда Rh занимает позиции не только Mn, но и Si в структуре MnSi. Кроме того, установлено, что легирование MnSi иридием (Ir) не приводит к образованию высокотемпературной фазы, а скорее подавляет DM-взаимодействие. Несмотря на принадлежность Rh и Ir к одной группе, их влияние на MnSi при легировании оказывается принципиально различным [1].

## Литература

1. Krasnorussky V.N., Bokov A.V., Volkova Z.N., Gerashchenko A.P., Chtchelkatchev N.M., Magnitskaya M.V., Skanchenko D.O., Altynbaev E.V., Alferev I.V., Salamatin D.A., Sidorov V.A., Semeno A.V., Brazhkin V.V., Tsvyashchenko A.V. // Phys. Rev. Mater. – 2024. – Т. 8. – С. 124405.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.21

# УГЛОВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ ФМР КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК ($CoFeZr+Zr_2O_3$)

**Блинов З.Н.[1], Котов Л.Н.[1], Заварин Д.В.[1]**

[1]*Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия,*
blinovzosim@gmail.com

Наноструктурные материалы, в том числе и композитные металл-диэлектрические пленки, обладают рядом уникальных свойств, не характерных для - массивных материалов [1-3]. Применение композитных пленок в магнитной наноэлектронике может решить проблему сверхбыстрой обработки информации [2]. Композитные пленки, могут быть интересными объектами для исследования, благодаря тому, что их магнитные и проводящие свойства могут изменяться в широких пределах при варьировании толщины плёнок и концентрации магнитных металлических сплавов и диэлектриков [2, 3]. В настоящей работе проведены исследования угловых зависимостей параметров (резонансной линии и ее ширины) ферромагнитного резонанса (ФМР) композитных плёнок $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Zr_2O_3)_{1-x}$ при разных углах $\varphi$ между направлением постоянного магнитного поля и плоскостью плёнок с разными концентрациями металлического сплава.

Данная серия композитных плёнок получена при напылении слоёв на полимерную (лавсановую) подложку в атмосфере аргона с добавлением азота [2]. Наличие азота в атмосфере напыления плёнок приводит к тому, что для этих плёнок характерна гранулированная структура. В экспериментах при комнатной температуре записывались резонансные линии ФМР с помощью радиоспектрометра РЭ-1306 при разных углах $\varphi$ в интервале от 0 до 90°. Затем на основе полученных линий ФМР определялось значения ширины линии ΔB и положения максимума линии ФМР (или резонансного поля) $B_r$ и $\Delta B$. При φ=0 постоянное и переменное магнитные поля были взаимно перпендикулярны и лежали в плоскости плёнки. Для композитных пленок $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Zr_2O_3)_{1-x}$ положение резонансной линии $B_r$ с ростом угла $\varphi$ немонотонно увеличивается, а скорость роста $B_r$ возрастает. Ширина линии ФМР $\Delta B$ исследуемых пленок имеет различное поведение в интервале от 0 до 90°. При малых углах $\varphi < 40^0$ ширина линии $\Delta B$ практически не изменяется, а при больших углах $\Delta B$ увеличивается. Так же следует отметить, в процессе анализа было обнаружено – параметры ФМР уменьшаются при увеличении концентрации металлического сплава в исследуемых образцах, что свидетельствует о возникновении ФМР в образцах при меньших значениях индукции магнитного поля.

**Исследования выполнены за счёт гранта РНФ, проект № 25-72-20063**

## Список литературы

1. P.G. Baranov, A.M. Kalashnikova, V.I. Kozub, at al // UFN, 189(8), 849 (2019).

2. Котов Л. Н., Судьенков Ю. В., Ласёк М. П. и др. // Письма в ЖТФ. 2025. Т. 51. № 6. С. 8 - 11. DOI: 10.61011/PJTF.2025.06.59923.20065

3. Л.Н. Котов, М.П. Ласёк, В.К. Турков и др. // Известия РАН. Серия физическая. – 2020. – Т. 85, № 9. – С. 1255–1257.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.22

# Спектр ансамбля джозефсоновских контактов, содержащих майорановские фермионы и взаимодействующих с одномодовым резонатором

**Казак А. И.[1], Сеидов С. С.[1]**
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, Россия, m2212291@edu.misis.ru*

Коллективные явления ансамбля джозефсоновских контактов взаимодействующих с электромагнитной волной в одномодовом резонаторе хорошо изучены [1]. Майорановские фермионы, обладающие антикоммутативными свойствами $\gamma_i = \gamma_k^{\dagger}$ , $\{\gamma_i\, \gamma_k\} = 2\delta_{ik}$ , предположительно существуют в конденсированных системах в виде квазичастиц. В частности, известна схема джозефсоновского контакта с майорановскими фермионами, в котором возникает дробный эффект Джозефсона [2].

Ансамбль джозефсоновских контактов, содержащий майорановские фермионы, взаимодействующий с электромагнитной волной в резонаторе описывается гамильтонианом вида:

$$H = H_{Dicke} + \sum_i^N \; H_i \; ,$$

где $H_{Dicke}$ – модель Дике, а $\sum_i^N \; H_i$ – ансамбль джозефсоновских контактов содержащих майорановские фермионы.

Гамильтониан Дике:

$$H_{Dicke} = \frac{\hat{p} + \omega\, \hat{q}}{2} + g\hat{p}\, \hat{S}_Y - \omega_0 \hat{S}_Z \; .$$

Эффективный гамильтониан одиничного джозефсоновского контакта содержащего майорановские фермионы:

$$H_{eff} = H_0 + E_M^2 \; cos\, (\tfrac{\varphi - gq}{2})\; e^{i\varphi}\; [H_0 - E]^{-1},$$

где $H_0 \; = \; E_C\, n^2 - E_J \; cos\, (\varphi - gq)$ соответствует трансмону, который имеет точное решение [3] в базисе функций Матье.

Таким образом, получен эффективный гамильтониан одиночного джозефсоновского контакта, содержащего майорановские фермионы, найден энергетический спектр исследуемой системы, оценено влияние майорановских фермионов.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" в НИТУ МИСИС (Стратегический проект "Квантовый интернет", грант К2-2022-025).

## Литература

1. R. H. Dicke, “Coherence in spontaneous radiation processes,” Phys. Rev., vol. 93, pp. 99–110, Jan 1954.
2. Coulomb stability of the 4□-periodic Josephson effect of Majorana fermions / B. van Heck, F. Hassler, A. R. Akhmerov [и др.] // Phys. Rev. B. — 2011. — Нояб. — Т. 84, вып. 18. — С. 180502.
3. Koch J. et al. Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box //Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. – 2007. – Т. 76. – №. 4. – С. 042319.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.23

# ГИГАГЕРЦОВЫЙ РЕЗОНАНСНЫЙ ОТКЛИК и ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ при ФОТОВОЗБУЖДЕНИИ КИРАЛЬНЫХ МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ и МЕТАСТРУКТУР с CdS, CdSe, GaAs, Si

**Крафтмахер Г.А. [1], Бутылкин В.С.[2], Фишер П.С.[3]**
*ФИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, г. Фрязино, Россия*
*E-mail:* [1]gaarkr139@mail.ru, [2]vasebut@yandex.ru, [3]fisherps@mail.ru

Для развития элементной базы в микроэлектронике, связанной с проблемами передачи, приема и преобразования информации с помощью волн микроволнового диапазона, исследуем новые оптически-управляемые структуры и их функциональные возможности. Применяем цепочки планарных электропроводящих киральных кольцевых элементов с разрывами, нагруженными CdS, CdSe-включениями (фото на рис.1). Кольца выполнены методом фотолитографии на металлизированных медью полиамидных пленках. В [1] было предложено использовать CdS и CdSe в качестве элементов оптического управления в микроволновых структурах. Измеряем динамику резонансного отклика прохождения $T$ микроволн с метаструктурами в условиях свободного пространства в разрыве прямоугольных волноводов. Показано, что при изменении мощности оптического излучения $P_\lambda$ = 0 − 250 мВт ($\lambda$ = 0.97 мкм), направляемого оптоволокном в область определенного разрыва, в многорезонансном спектре $T$ происходит плавная селективная трансформация соответствующего резонансного отклика без изменения резонансных откликов других элементов в зависимости от геометрии и вида метаструктуры. Исследованы также цилиндрические образцы (фото на рис.2) на основе киральных многозаходных медных спиралей с полупроводниковыми сердечниками GaAs, Si и включениями CdS и CdSe: метадиполи (мини-резонаторы). Впервые метадиполи с GaAs-сердечником исследованы в [2]. Исследуемые структуры могут быть полезны для применений в управляемых фильтрах и антеннах; для экспресс-тестов, востребованных развитием новых технологий и разнообразием полупроводников.

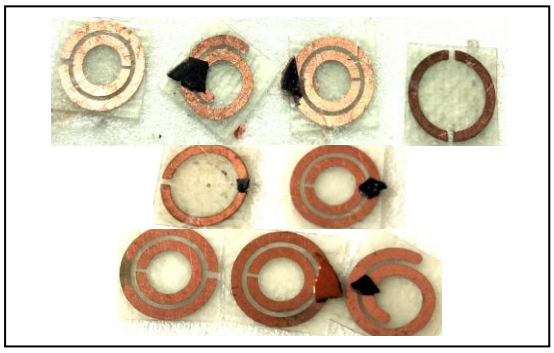


Рис.1

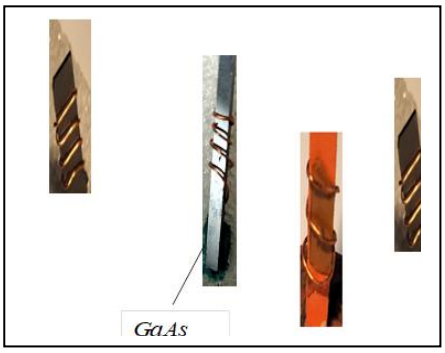



Рис.2

## Литература

1. Крафтмахер Г.А., Бутылкин В.С., Казанцев Ю.Н., Мальцев В.П., Фишер П.С. // Письма в ЖЭТФ 2021. Т. 114. № 9. С. 586.
2. Крафтмахер Г.А., Бутылкин В.С., Фишер П.С. // Физика твердого тела. 2025. Т. 67. Вып. 1. С. 31.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.24

# ФОНОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МАТЕРИАЛОВ С ИНВЕРСИЕЙ ЗНАКА АНГАРМОНИЗМА

**Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Гаджимагомедов С.Х.**

*Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

*zhariyat@mail.ru*

В [1] изложена проблема отсутствия понимания роста теплопроводности сверхпроводников ниже температуры перехода ($T_c$). Обзор литературы показывает, что до настоящего времени не существует однозначной интерпретации этого экспериментально наблюдаемого факта. Общее теплосопротивление неметаллов (W) аддитивная величина вкладов от рассеяния на границах образца ($W_b$), дефектах ($W_d$) и фононах $W^{ph}$. Согласно теоретическим представлениям, $W^{ph}$ прямо пропорционально квадрату коэффициента теплового расширения (β), обусловленного ангармонизмом колебаний атомов. Такие представления не учитывают особенностей поведения W(T) при инверсии знака ангармонизма. В ВТСП, где отсутствуют обобщенные зарядовые возбуждения, теплосопротивление, в основном, определяется вкладом деформационного потенциала рассеяния на фононах. На основе экспериментальных данных для большого числа неметаллов [2] нами установлено, что в каждом равновесном состоянии:

$$W(T) - W^b - W^d = W(T) - W^s = W^{ph} = W^*\beta T,$$

где W* – характеристическое (предельное) для каждого материала теплосопротивление, которое при инверсии знака β, различно для области его положительных и отрицательных значений. Тогда при β<0 следует ожидать уменьшения W ниже значения, определяемого вкладом $W^s$, т.е. возрастание теплопроводности. На образцах монокристаллов Si разного размера было показано [2], что W(T) резко падает при температуре инверсии знака β (121 К), а затем уменьшается с нарушением плавного хода.

Заметим, что в любом проводнике деформация решетки приводит как к возбуждению зарядов, так и к их релаксации. В то же время, в рыхлоупакованных структурах деформация решетки (удаление и приближение атомов) при их легировании может привести к переходу из состояния диэлектрика в состояние проводника и даже сверхпроводника. В этой связи, вопросы, связанные с инверсией знака ангармонизма, становятся особенно актуальными при создании материалов с заданной проводимостью и сверхпроводимостью. Для ВТСП, как и для многих рыхлоупакованных структур, характерна инверсия знака β ниже и выше $T_c$, а также непосредственно в точке перехода, например, для как у $MgB_2$. На основании этих фактов приводятся критерии перехода материалов в состояние фононной «сверхтеплопроводности»: значения деформационного потенциала рассеяния должны быть близки к нулю, либо он приобретает отрицательный знак.

Работа выполнена в рамках государственного задания FZNZ-2025-0003

## Литература

1. Гинзбург В.Л. //Письма в ЖЭТФ. – Т.49. – №1. – С. 50-51.
2. Палчаев Д.К., Мурлиева Ж.Х., Палчаева Ф.Д. //ТВТ. – 2010. –Т. 48. – № 4. – С. 512–520.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.25

# ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА ПО СВЧ СПЕКТРАМ ОТРАЖЕНИЯ В ДИАПАЗОНЕ 8-56 ГГЦ

**Антонец И.В.[1], Голубев Е.А.[2]**

[1]*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия, aiv@mail.ru*

[2]*Институт геологии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия, yevgenygolubev74@mail.ru*

Разупорядоченные углеродные материалы природного происхождения (шунгиты и антраксолиты) обладают сложной структурой с локальными закономерностями. В основе такой структуры лежат разориентированные друг относительно друга ленты и слои разупорядоченного углерода, а также пачки графеновых слоев размерами от единиц до десятков нанометров. Содержание углерода природных шунгитов варьируется от 2 до 97 ат.%, что в совокупности с огромным разнообразием структурных нано- и микроэлементов, вносящих значительные вклады в их электрофизические свойства, определяют прикладное значение шунгитов при создании суперконденсаторов, аккумуляторов, температурных и электрохимических датчиков. Особую значимость приобретает оценка как непосредственно электрофизических свойств природных разупорядоченных углеродных материалов в широком диапазоне частот, так и влияние на них элементов нано- и микроструктуры [1–3].

В работах [2,4] при помощи спектроскопии импеданса исследована проводимость для образцов шунгитов на средних и высоких частотах в диапазоне 50 кГц–15 МГц, проведена оценка динамической проводимости в диапазонах 8–12 ГГц и 26–38 ГГц [3,5]. В настоящей работе впервые по СВЧ спектрам отражения оценена динамическая проводимость природного разупорядоченного углерода в широком диапазоне 7.6–56 ГГц. Для исследований использовались ультратонкие пластины шунгитов Карелии и антраксолитов с острова Новая Земля и Колумбии толщиной 8–20 мкм. СВЧ динамическая проводимость рассчитывалась, используя механизмы замкнутой и разомкнутой цепей модели внутригранулярных токов [1,6].

Получены частотные спектры СВЧ динамической проводимости в диапазоне 7.6–56 ГГц. Проведено сравнение СВЧ проводимости на частотах 9, 15, 23, 32, 52 ГГц со статической проводимостью на постоянном токе. Показано, что для одних образцов шунгитов во всем частотном диапазоне превышение СВЧ динамической проводимости над статической составляет не более 1.5-2.5 раз, а для других может достигать 13-23 раз, причем чем выше исследуемый частотный диапазон, тем превышение значительней. Определена проводимость гранул и оценен ее вклад в СВЧ проводимость природного разупорядоченного углерода. Проведено сравнение полученных результатов СВЧ динамической проводимости со значениями проводимостей на средних и высоких частотах в диапазоне 50 кГц–15 МГц.

Исследование выполнено в рамках госзадания ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина» № 075-03-2024-162 по теме «Влияние структуры на статические и динамические электропроводящие свойства разупорядоченного углерода».

1. Antonets I.V., Golubev Ye.A. et. al. // J. Phys. Chem. Solids. – 2022. – V. 171. – P. 110994.
2. Golubev Ye.A, Antonets I.V. // Nanomaterials. –2022. – V. 12. – P. 3797.
3. Golubev Ye.A., Antonets I.V. et. al. // Mater. Chem. Phys. – 2019. – V.226. – № 3. – P. 195-203.
4. Голубев Е.А., Антонец И.В., Королев Р.И. // ФТТ. – 2023. – Т. 65. – №12. – С. 2111-2013.
5. Antonets, I.V., Golubev, Ye.A. et. al. // Curr. Appl. Phys. – 2021. – V. 29. – P. 97-106.
6. Antonets I.V., Golubev Ye.A., Shcheglov V.I. // Mater. Chem. Phys. – 2022. – V. 290. – P.126533.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.26

# ТЕРМОЦИКЛИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ TiNi

**Беляев С.П.[1], Реснина Н.Н.[1], Базлов А.И.[1,2], Сибирев А.В.[1], Поникарова И.В.[1], Бикбаев Р.М.[1], Иванов А.М.[1]**

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, spbelyaev@mail.ru*

[2]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

Долгое время полагали, что увеличение плотности дислокаций является основной причиной уменьшения температур мартенситных переходов при термоциклировании сплавов с памятью формы на основе TiNi. Это было основано на том, что в образцах сплавов на основе TiNi, подвергнутых термоциклам через температурный интервал мартенситных переходов, плотность дислокаций была выше, чем до термоциклирования. Однако, многие факты противоречат таким представлениям. Установлено, что при большом количестве циклов температуры переходов могут меняться немонотонно с числом циклов; температуры разных переходов (B2 ↔ B19', B2 ↔R, B2 ↔B19, R↔B19') меняются по разному при термоциклировании; температуры мартенситных превращений в тонких лентах стабильны при термоциклировании, тогда как в крупнокристаллических образцах того же состава они меняются. Для того, чтобы понять причину имеющихся противоречий необходимо исследовать взаимосвязь между изменением температур мартенситных переходов и плотности дислокаций/дефектов при термоциклировании в разных сплавах при большом количестве циклов. Данное исследование проведено в настоящей работе для сплавов на основе TiNi разного состава (эквиатомный TiNi, TiNi с избытком никеля и 6 сплавах системы Ti-Hf-Ni-Cu с разной концентрацией гафния и меди в крупнозернистом и ультрамелкозернистом состояниях). Все сплавы были подвергнуты 500 термоциклам через температурный интервал мартенситных переходов. Температуры мартенситных переходов регистрировали методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Изменение плотности дефектов оценивали двумя методами – по изменению электросопротивления, измеренного в аустенитной или мартенситной фазах, и по уширению рентгеновских пиков (методом Вильямсона-Холла).

Полученные результаты показали, что плотность дефектов/дислокаций немонотонно меняется при термоциклировании – она увеличивается, затем падает и вновь увеличивается. Химический состав сплавов влияет на количество циклов, которые занимает каждая из стадий, но не влияет на зависимость плотности дефектов от числа циклов. Впервые показано, что изменение температур мартенситных переходов при термоциклировании не коррелирует с изменением плотности дефектов. Этот результат является общим для всех исследованных сплавов на основе Ti-Ni и указывает на то, что изменение плотности дислокаций/дефектов не является основной причиной изменения температур мартенситных переходов при термоциклировании сплавов на основе TiNi.

*Работа выполнена в рамках гранта РНФ (№23-19-00280). Исследование структуры сплавов выполнено в ресурсном центре «Рентгенодифракционные методы исследования» Научного парка СПбГУ*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.27

# Визуализация приповерхностных заряженных слоев в полярном направлении кристалла триглицинсульфата

**Е.С. Иванова[1,*], В.И. Аккуратов[1], А.Г. Куликов[1], Ю.В. Писаревский[1]**

[1] *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, ivanova.el.ser@gmail.com*

Методом рентгеновской топографии впервые получены изображения слоев пространственного заряда, образующихся в приповерхностных областях сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата (ТГС) за счет действия внешнего электрического поля вдоль полярного направления [010]. Важным преимуществом кристалла ТГС для рентгенодифрационных экспериментов является его состав из легких атомов, что позволяет проводить исследования в геометрии дифракции «на просвет» и регистрировать информацию от всего объема образца [1]. Метод рентгеновской топографии позволяет с высоким пространственным разрешением визуализировать искажения кристаллической решетки по контрасту, сформированному за счет интерференции расходящихся от дефекта лучей. Слои пространственного заряда проявляются в увеличении интегральной интенсивности рентгеновского излучения. Были получены топограммы образца ТГС как до приложения внешнего электрического поля, так и в процессе подачи поля напряженностью $E$ = 30, 55, 100 и 150 V/mm вдоль полярного направления. Проводилось две серии измерений для рефлексов 060 и 400. При приложении поля для рефлекса 060 наблюдалось образование областей с увеличенной интегральной интенсивностью вблизи электродов, относительно исходного состояния и среднего значения в объеме (рис. 1). При этом поле противоположной полярности меняет картину распределения интенсивности. Наибольший рост интенсивности наблюдается вблизи электрода с отрицательным потенциалом. Для рефлекса 400 изменение интегральной интенсивности вблизи электродов гораздо слабее. Приложение поля вдоль неполярного направления [100] не вызывает изменений на топограммах. При снятии электрического поля картина интегральной интенсивности возвращается к исходной.

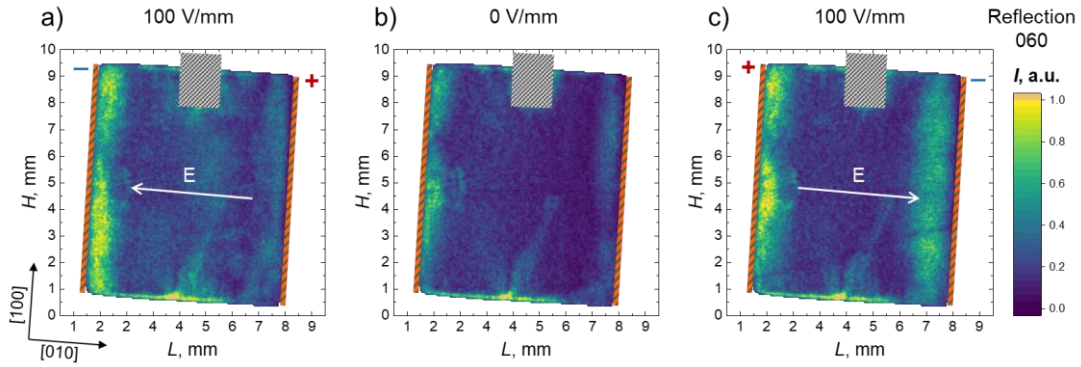



Рисунок 3. Пространственное распределение интегральной интенсивности дифракционного отражения 060 кристалла ТГС без приложенного электрического поля (b) и во внешнем электрическом поле обеих полярностей (a, c). Электрическое поле $E$= 100 V/mm приложено вдоль полярной оси. Знак соответствует внешнему потенциалу на электроде. Серым цветом выделена зона закрепления кристалла, оранжевым – электроды.

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

## Литература

1. Akkuratov V., Kulikov A., Pisarevsky Yu., Blagov A., Kovalchuk M. // Journal of Applied Crystallography. – 2023. – V. 56. – № 1. P. – 247-253.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.28

# Электронная структура халькогалогенидной фазы Шевреля $Mo_6S_6I_2$

**Г.Д. Комаров, А.М. Ионов, С..Г. Протасова, Р.Н. Можчиль, О.Г. Рыбченко**
*ИФТТ РАН, Московская область, г. Черноголовка*

Тройные халькогениды молибдена, фазы Шевреля $M_xMo_6X_8$ интересны из-за ряда уникальных физико-химических свойств таких как сверхпроводимость, каталитическая активность и др.[1] Электронная структура йодированной фазы Шевреля $Mo_6S_6I_2$ мало исследована и представляет интерес для понимания физико-химических свойств соединения.

Образцы $Mo_6S_6I_2$ был получен методом ампульного синтеза. Полученные образцы обладали кристаллической структурой *hR*42. Критическая температура начала сверхпроводящего перехода в $Mo_6S_6I_2$ 14 K.

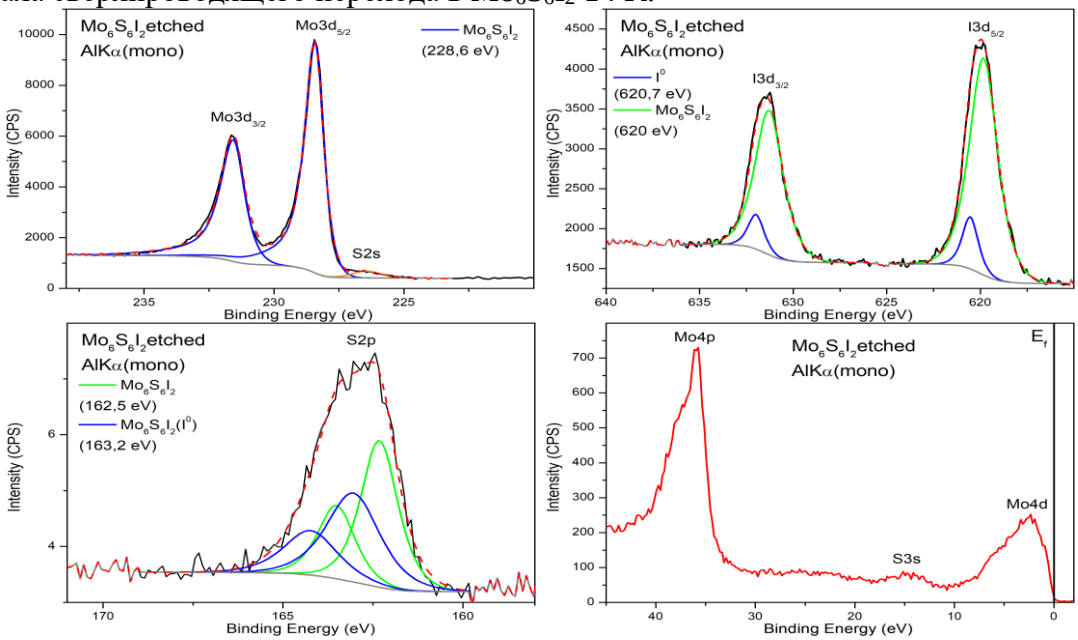



**Рис. 1.** РФЭС спектры фазы $Mo_6S_6I_2$, остовных уровней и валентной зоны

Исследование электронной структуры образцов проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на электронном спектрометре со сферическим секторным анализатором “Kratos" с использованием излучения AlKα(mono) (E = 1486,69 эВ). В спектре наблюдаются характерные линии остовных уровней молибдена $Mo3d_{5/2}$ (228,6 эВ), серы $S2p_{3/2}$ (163 эВ), йода $I3d_{5/2}$(620 эВ) с присутствием элементарного интеркалированного йода. Вид спектра Mo3d для $Mo_6S_6I_2$ представленного на рис.1 является типичным для всех соединений типа фазы Шевреля [2]. Уширенные, неразрешаемые 2p (162,5эВ и 163,2 эВ) состояния серы можно объяснить влиянием изменения электронной плотности вследствие наличия интеркалированного йода в структуре.

Согласно анализу РФЭС валентная зона фазы $Mo_6S_6I_2$ образована 4d состояниями молибдена вблизи уровня Ферми с максимумом в интервале 2-5 эВ и 3s состояния серы около 14 эВ. При прогреве образца $Mo_6S_6I_2$ in situ в камере электронного спектрометра (до 500°C,$10^{-8}$ Торр) не происходило заметных изменений в структуре остовных линий, отмечено удаление интеркалированного йода из образца.

**Литература**

1. Peña, O. Chevrel phases: Past, present and future / O. Peña // Physica C: Superconductivity and its Applications. – 2015. – Vol. 514. – P. 95-112.
2. Electronic structure of the Chevrel-phase compounds SnxMo6Se7.5: Photoemission spectroscopy and band-structure calculations / K. Kobayashi, A. Fujimori, T. Ohtani [et al.] // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 2001. – Vol. 63, No. 19. – P. 1951091-1951097.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.29

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ И ЧАСТОТНО-ИМПЕДАНСНЫХ СПЕКТРОВ ТУРМАЛИНА В ИНТЕРВАЛЕ 300-650 К

**Л.Н. Котов[1,*], Фацинь Донг[2], С.В. Лебедев[3], А.В. Королёва[3], Е.Л. Котова[4], Р.И. Королев[1], Чжан Вэй[2]**

*[1] Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Россия*
*[2] Юго-Западный университет науки и технологий, 621010, Маньянг, Китай*
*[3] Санкт-Петербургский государственный университет, 198904, Санкт-Петербург.*
*[4] АО «ВНИИ ГАЛУРГИИ», 190103, Санкт-Петербург, Россия*
**e-mail: kotovln@mail.ru*

Широкий спектр функциональных материалов, синтезируемых по природным аналогам турмалина, имеют большие перспективы применения в экологии окружающей среды, хранения и преобразования тепловой энергии, а также в области медицины, в частности, имплантологии и вирусологии [1]. Определённые разновидности турмалинов, обладающих хорошими пироэлектрическими свойствами, широко используются в различных приложениях, начиная от инфракрасной визуализации/зондирования и преобразования энергии тепла в электронную эмиссию, заканчивая новыми приложениями в химии, экологии [1,2].

В работе проведены исследования по влиянию температуры на рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФЭС) и на частотные зависимости импеданса турмалина в диапазоне частот 50 кГц-15 МГц, в интервале температур 300 - 630 К. Определены относительные концентрации атомных компонент Al, B, C, Fe, Mg, Na, O, Si в составе исследованных турмалинов. Обнаружено, что до температуры Т=450 К концентрация электронов $n_v$ *O1s* уменьшается, а выше - постепенно возрастает (рис.1*а*). Концентрация электронов *C1s* имеет обратную зависимость к *O1s*. Такое поведение может быть связано с разными необратимыми процессами, например, с десорбцией и адсорбцией ионов и ионных комплексов. Показано, что на температурную динамику частотных спектров импеданса сильное влияние оказывает температурное изменение концентрации электронов *O1s, C1s, Fe2s*. Обнаружены сильные отличия импеданса при нагреве и охлаждении турмалина, особенно, в диапазоне частот 5-10 МГц и в интервале температур 300-450 К (рис.1*б*), которые показывают, что на основе кристаллов турмалина можно вырабатывать электрическую энергию.

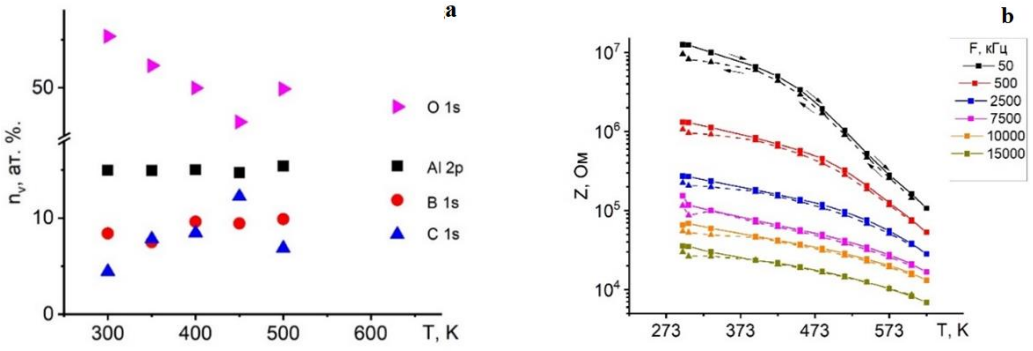



Рис.1. Концентрации электронов *O1s, Al 2p, B 1s, C1s* при разных температурах (*а*). Температурные зависимости импеданса Z турмалина на разных частотах (*б*).

1. Liang Y., Tang X., Zhu Q., Han J., Wang C. // Chemosphere. 2021. V. 281. № 130780.
2. Tian Yu, Jiawei Wang, Nengjie Ding, Xin Guo, Meicheng Wang, Yao Chen // J. of Indust. and Eng. Chemistry, 2024. V. 131. P. 44. https://doi.org/10.1016/j.jiec.2023.10.048

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.30

# ELEMENTARY MAGNETIC POLES IN SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES

**Mintairov A. M.[1], Axenov V. Yu.[1], Davydov V. Yu.[1], Eliseyev I. A.[1], Vlasov, A. S.[1], Cirlin G. E.[2], Gridchin V. O.[2], Kirilenko D. A.[2], Kotlyar K. P.[2], Reznik R. R.[2], Shugbaev T.[2], Brichkin A. S.[3], Golishkov G. M.[3], Chernenko A. V.[3], Barettin D.[4], Blundell S. A.[5]**

[1] *Ioffe Institute, RAS, Saint Petersburg 194021, Russia*, amintairov@mail.ioffe.ru
[2] *Alferov University, St. Petersburg 194021, Russia*
[3] *Osipyan Institute of Solid State Physics*, RAS, *Chernogolovka, 142432, Russia*
[4] *Department of Electronic Engineering, "Università Niccolo" Cusano 00133, Rome, Italy*
[5]*Universite Grenoble Alpes, CEA, CNRS, IRIG, SyMMES, F-38000, Grenoble, France*

Filled single-electron states of 2D quantum dots in the Wigner localization regime – Wigner quantum dots (WQDs), can generate magnetic flux quanta vortices $\hat{o}$ in zero magnetic field *B*, which corresponds to the generation of elementary magnetic poles (*m*-poles) [1], the existence of which was predicted in 1931 by Dirac [2]. *M*-poles in WQDs form magneto-electron or Dirac anyon (DA) states studied in details by us in InP/GaInP$_2$ WQDs using magneto-photoluminescence (PL) spectra [1]. The $\hat{o}$-vortices in DAs have radius $r_\phi=a_B^*$, where $a_B^*$ is Bohr radius, and generate field $\hat{\mathcal{B}}=\phi_0/\pi r_\phi^2$, where $\phi_0$ is flux quanta value. Values of $\hat{\mathcal{B}}$ up to 15 T have been measured in InP/GaInP$_2$ WQDs having $a_B^*$=8 nm and much stronger fields are expected for reduced $a_B^*$. Dependence $\hat{\mathcal{B}}\sim(a_B^*)^{-2}$ resulting in the possibility generate huge magnetic fields in nanoscale is a fundamental property of *m*-pole and its experimental demonstration, except possible intriguing applications, is critical for their identification. These requires engineering of *m*-pole/DA nanostructures having different $a_B^*$ together with the ability to measure $\hat{\mathcal{B}}$. Here we suggest and realize such structure, which is monolayer (ML) InN/GaN nanowire grown by molecular beam epitaxy on [111] Si substrates. It has about two times reduced $a_B^*$ compared to InP/GaInP$_2$ WQDs and can be tested for the presence of *m*-poles using measurements of PL spectra as was described in our previous studies [1]. Using these, we demonstrate *m*-pole self-formation and corresponding increase of $\hat{\mathcal{B}}$ up to 60 T (see Fig.1), confirming existence of *m*-poles.

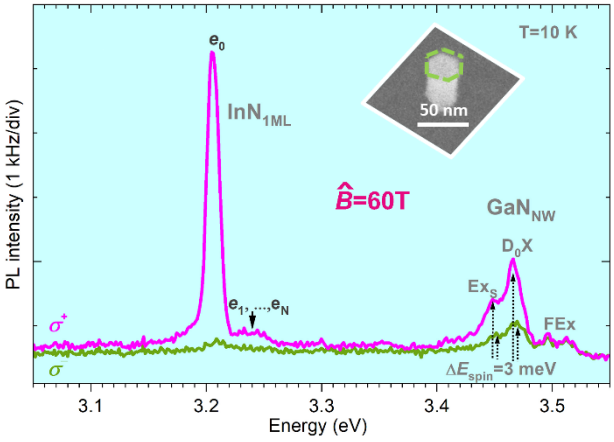



Fig.1 Circular polarized PL spectra of $InN_{1ML}/GaN_{NW}$ WQD (see SEM image in the inset) measured at 10 K and $B$= 0 T. The field $\hat{\mathcal{B}}$=60 T is measured using value of Zeeman spin splitting of GaN exciton peaks ($Ex_S$ and $D_0X$) $\Delta E_{spin}(B)=kB$, where $k$=0.05 meV/T [3].

[1] A. M. Mintairov, et al, Phys. Rev. B, **111**, 045410 (2025).
[2] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A. V. **133**, 60 (1931).
[3] M. Julier et al, Phys. Rev. B, **56** R7108 (1997).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.31

# Об определении коэффициентов диффузии нановключений жидкого Pb на дислокациях в алюминии из траекторий их теплового движения

**Прокофьев С. И.**
*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

*In situ* ПЭМ наблюдения показывают, что в объеме зерен алюминия нановключения жидкого Pb демонстрируют случайные блуждания [1]. Если же включения в алюминии связаны с закрепленными дислокационными сегментами, то их смещение под действием тепловых флуктуаций из своего равновесного положения на сегменте вызывает появление обусловленной линейным натяжением дислокации возвращающей силы, которая всегда направлена к линии дислокации и от ближайшего закрепленного конца дислокации в сторону середины сегмента [1, 2]. Это приводит к тепловым осцилляциям включений вблизи линии дислокации. В первом приближении, можно считать, что одномерные продольные тепловые осцилляции вызваны притяжением включений к середине сегмента, где находится их равновесное положение. Это позволяет использовать для определения коэффициентов диффузии включений решение Смолуховского задачи об одномерном движении броуновской частицы, движущейся под действием линейной возвращающей силы [3].

Если сегмент достаточно длинный, взаимодействием включения с его концами можно пренебречь. Тогда тепловое движение включения можно рассматривать, как одномерные случайные блуждания, и коэффициент диффузии включения с хорошей точностью определяется уравнением Эйнштейна [1, 2].

При небольшой длине сегмента, при приближении включения к его закрепленным концам сила его отталкивания от них быстро возрастает. Поэтому, использование уравнения Смолуховского приводит к недооценке величины коэффициента диффузии, которая связана с торможением включения вблизи концов дислокационного сегмента. Введение в уравнение Смолуховского члена, учитывающего влияние этого торможения, позволило понизить предельную длину дислокационного сегмента, при которой величина коэффициента диффузии включения, связанного с ним, может быть определена с приемлемой точностью. Приведенные примеры показывают, что величины коэффициентов диффузии включений, полученные при использовании модифицированного уравнения Смолуховского, на 50-75% выше величин, полученных с использованием уравнения Смолуховского.

## Литература

1. Prokofjev S., Zhilin V., Johnson E., et al. // Def. Diff. Forum. – 2005. – V. 237-240. – P. 1072-1078.
2. Johnson E., Prokofjev S., Zhilin V., Johnson E., et al. // Z. Metallkd. – 2005. – B. 96 – S. 1171-1180.
3. Smoluchowski M. Sitzungsber. Kais. Akad. Wissensch. Wien (IIa). – 1914. – B. 123. – S. 2381-2405.

*Работа выполнена в рамках Госзадания ИФТТ РАН*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.32

# ИЗМЕНЕНИЕ ТЕМПЕРАТУР МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ И ПЛОТНОСТИ ДЕФЕКТОВ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ СПЛАВА Ti-Ni-Fe ЧЕРЕЗ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИНТЕРВАЛЫ B2 ↔ R или B2 ↔ R ↔ B19’ ПРЕВРАЩЕНИЙ

**Реснина Н.Н., Беляев С.П., Сибирев А.В., Поникарова И.В., Данилов Д.В.**
*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, resnat@mail.ru*

Целью данной работы явилось исследование изменения температур мартенситных переходов и плотности дислокаций/дефектов при термоциклировании сплава $Ti_{50,7}Ni_{46,6}Fe_{2,7}$ через температурный интервал B2 ↔ R или B2 ↔ R ↔ B19’мартенситных переходов. В работе провели две серии экспериментов, в одной из которых образцы термоциклировали в интервале температур от 20 ºС до -100 ºС, при которых реализуется только B2 ↔ R превращение. Во второй серии образцы термоциклировали в интервале температур от 20 ºС до -196 ºС, при которых реализуются B2 ↔ R ↔ B19’ превращения. Все образцы термоциклировали 500 раз и после различного количества циклов измеряли температуры мартенситных переходов, величину сопротивления в B2, R и B19’ фазах при постоянной температуре и оценивали плотность дислокаций методами рентгенодифракционного анализа и дифракции обратно-рассеянных электронов (ДОРЭ).

Полученные результаты показали, что плотность дефектов/дислокаций немонотонно зависит от номера цикла, как при термоциклировании через температурный интервал B2 ↔ R превращения, так и через B2 ↔ R ↔ B19’ превращения. Она увеличивается в первых 40-50 циклах, затем падает и вновь возрастает. При этом температуры начала прямого B2 → R и окончания обратного R → B2 переходов слабо меняются с циклами вне зависимости от того до какой температуры охлаждали образец и как меняется плотность дислокаций. Вместе с тем, температуры окончания прямого B2 → R и начала обратного R → B2 перехода не меняются, если термоциклирование осуществляли через температурный интервал B2 ↔ R превращения и уменьшаются, если термоциклировали через B2 ↔ R ↔ B19’ превращения. Температуры R ↔ B19’ превращения сильно уменьшаются при термоциклировании вне зависимости от того, увеличивается плотность дефектов или уменьшается. Данные КАМ карт, полученных методом ДОРЭ согласуются с данными об изменение плотности дефектов, полученных при изменении электросопротивления и данным рентгеноструктурного анализа. При термоциклировании увеличивается разориентация внутри зерен, что связано с увеличением плотности дефектов и доли малоугловых границ. При большом количестве циклов доля малоугловых границ падает и интенсивность на КАМ картах уменьшается.

Таким образом, можно заключить, что при термоциклировании увеличение плотности дефектов приводит к увеличению доли малоугловых границ. Начиная с некоторого цикла, плотность дислокаций падает, что сопровождается уменьшением доли малоугловых границ. Однако изменение температур мартенситных переходов не связано с этими процессами

*Работа выполнена в рамках гранта РНФ (№23-19-00280). Исследование структуры выполнено на оборудовании ресурсных центров «Нанотехнологии» и «Дифракционные методы исследования» Научного парка СПбГУ*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.33

# ЗАРОЖДЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ Al В АМОРФНОМ СПЛАВЕ $Al_{87}Ni_8Gd_5$ ПРИ НАГРЕВЕ И ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

**Свиридова Е.А.[1,2], Васильев С.В.[1,2], Абросимова Г.Е.[3], Ткач В.И.[1]**
[1]*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, Россия*
[2]*Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, Макеевка, Россия*
[3]*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*
E-mail: ksvir@list.ru

Алюминиевые сплавы с нанокомпозитными структурами, которые формируются путем частичной кристаллизации аморфной матрицы, представляют практический интерес, поскольку обладают исключительно высокими прочностными характеристиками. Наряду с традиционными термическими методами получения нанофазных композитов, в последние годы все большее внимание исследователей привлекает процесс нанокристаллизации в условиях интенсивной пластической деформации. Характерными особенностями деформационно-индуцированных нанокомпозитных структур является их повышенная пластичность по сравнению с полученными термообработкой и существенно (в 2–4 раза) более мелкие размеры нанокристаллов [1]. Ввиду сильной зависимости свойств нанофазных композитов от структурных параметров, разработки теоретических моделей процессов механически индуцированной кристаллизации представляются актуальными.

Проведенные в работе экспериментальные исследования показали, что нанокомпозитные структуры, формирующиеся в аморфном сплаве $Al_{87}Ni_8Gd_5$ в процессе изотермической выдержки (1 час при 448 K) и при деформации методом кручения под высоким давлением (1 оборот при 4 ГПа) имеют существенно различные структурные параметры: размеры нанокристаллов (14 и 6 нм), их долю (5 и 22%) и объемную плотность ($3.48\times10^{22}$ и $1.95\times10^{24}$ м$^{-3}$) соответственно. Для описания процесса деформационно-индуцированного зарождения в рамках классической модели предложен подход, базирующейся на использовании оцененного по росту значения эффективного коэффициента диффузии в сочетании с оценкой работы образования критического зародыша при комнатной температуре, который позволил корректно описать экспериментально наблюдаемые различия структурных параметров нанофазных композитов в деформированных и термообработанных образцах.

Полученные в результате анализа значения эффективного коэффициента диффузии, контролирующего переход атомов в кристаллическую фазу, и удельной свободной энергии границы раздела зародыш/аморфная фаза для условий термически- и деформационно-индуцированной нанокристаллизации с учётом вклада приложенного внешнего давления согласуются с имеющимися в литературе оценками.

## Литература

1. Aronin A., Budchenko A., Matveev D., Pershina E., Tkatch V., Abrosimova G. Rev. Adv. Mater. – 2016. – Vol. 53. – P. 53-69.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.34

# ТЕКСТУРНЫЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА

**Антонец И. В.[1], Устюгов В. А.[2]**

[1] *СГУ им. Питирима Сорокина, г. Сыктывкар, Россия,* aiv@mail.ru

[2] *СГУ им. Питирима Сорокина, г. Сыктывкар, Россия,* ustyugov@syktsu.ru

Интерес исследователей к природному разупорядоченному углероду (шунгитам и антраксолитам) обусловлен наличием ряда полезных для промышленности свойств. Среди них химическая стабильность, высокая электропроводность [1], потенциал для применения в составе комплексных металлорганических адсорбентов [2]. При этом в настоящее время не существует общепринятой модели строения шунгитов в силу разнообразности агрегатов составляющих его графеновых слоев. Основной метод исследования структуры природного разупорядоченного углерода — высокоразрешающая электронная просвечивающая микроскопия (ВРЭМ) показывает наличие в образцах графеновых пачек, лент, глобул, находящихся в сложной пространственной конфигурации [3]. Открытым остается вопрос о достоверном определении статистических распределений по размерам, количеству этих структурных образований, а также их связи с физическими свойствами.

В настоящей работе предложен компьютерный алгоритм для автоматизированной сегментации изображений ВРЭМ шунгитовых образцов на области с высокой и низкой степенью структурированности. В основу метода положено исследование текстурных свойств участков изображений с применением метрик Харалика для матрицы совместной встречаемости градаций серого [4]. Выявлено, что использование таких метрик как «энергия» и «энтропия» (термины из оригинальной работы Харалика [4]) позволяют с высокой степенью точности определять участки изображений, содержащие структурные элементы («энтропия»), а также шунгитовые поры, характеризующиеся отсутствием четко просматриваемой структуры («энергия»). Применение к полученным распределениям признаков Харалика по участкам изображений микроскопии образца процедур поиска локальных максимумов позволяет с хорошей точностью определять границы структурных элементов (пачек и лент из графеновых слоев или пор).

С использованием разработанного согласно вышеописанным алгоритмам программного обеспечения получены статистические распределения участков поверхности образцов разупорядоченного углерода по степени структурированности, оценены размеры пор и отдельных локализованных структурных образований.

Исследование проведено в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина» от 17.01.2024 № 075-03-2024-162 по теме «Влияние структуры на статические и динамические электропроводящие свойства разупорядоченного углерода».

## Литература

1. Golubev, Ye.A., Antonets, I.V. // Nanomaterials. – 2022. – V.21, № 12. – P.3797.
2. Sukhinina, N.S., Khodos, I.I., Zver'kova, I.I., Turanov, A.N., Karandashev, V.K., Emel'chenko, G.A. // Inorg. Mater. – 2022. – V. 58, №10. – P.1114–1121.
3. Golubev, Ye.A., Antonets, I.V., Korolev, R.I., Prikhodko, A.S., Borgardt, N.I., Sun, S. // Materials Chemistry and Physics. – 2024. – V. 317. – P.129181.
4. Haralick, R.M., Shanmugam, K., Dinstein, H. // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. – 1963. – V. SMC-3, №6. – P. 610−621.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.35

# ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ И $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$

**Васильев С.В.[1,2], Свиридова Е.А.[1,2], Лимановский А.И.[1], Ткач В.И. [1]**
*[1]Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, Россия*
*[2]Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, Макеевка, Россия*
E-mail: vasils75@gmail.com

В рамках модели Аврами и комбинированной модели Колмогорова-Кэщиева [1] проведен анализ изотермических кинетических кривых кристаллизации металлических стекол (МС) $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ и $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$, температуры начала превращения в которых при нагреве со скоростью 0,167 K/c составляют соответственно 666 и 727 K. Установлено, что процессы зарождения в исследованных МС носит нестационарный характер, уровень которого выше в МС $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$. Определены значения времен, характеризующих нестационарность, а также скорости зарождения и роста кристаллических фаз в стационарных условиях в интервалах 617–662 и 683–714 K соответственно. По экспериментально установленным значениям скоростей роста кристаллов [2,3] и характеристических времен определены изменения стационарных скоростей зарождения, составляющие в МС на FeNi и FeCo основе $3{,}4\times10^{15}$–$1\times10^{17}$ $м^{-3}с^{-1}$ и $3\times10^{17}$–$7{,}5\times10^{17}$ $м^{-3}с^{-1}$ соответственно.

По результатам анализа значений скоростей зарождения и роста в рамках классических моделей гомогенного зарождения и линейного изотропного роста соответственно определены вариации входящих в них кинетических (коэффициент диффузии на межфазной границе) и термодинамических (работа образования критических зародышей, движущей силы кристаллизации, удельной свободной энергии границы раздела зародыш/матрица) параметров. Установлено, что несмотря на более низкие величины работы образования критических зародышей в МС $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$ в диапазоне температур 610–720 K (12960–20930 K) по сравнению с МС $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ (17900–23850 K) повышенная термическая устойчивость аморфной структуры в МС на основе FeCo в условиях стационарного зарождения обусловлена более низкими коэффициентами диффузии на межфазной границе ($1{,}2\times10^{-20}$–$3{,}6\times10^{-16}$ $м^2/с$ и $1{,}0\times10^{-24}$–$2{,}7\times10^{-18}$ $м^2/с$ соответственно).

Сравнение экспериментально измеренных времен начала кристаллизации с рассчитанными для стационарного режима зарождения показало, что дополнительный вклад в термическую устойчивость аморфных состояний в исследованных стеклах вносит нестационарный характер зарождения, увеличивая времена начала кристаллизации в 1,34–4,5 раз в МС $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ и в 3–7 раз в МС $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$.

Результаты проведенного анализа находятся в разумном согласии с имеющимися в литературе данными.

## Литература

1. Васильев С.В., Ткач В.И., Свиридова Е.А., Лимановский А.И., Цветков Т.В. // Физ. техн. выс. давл. – 2017. – Т. 27, № 1. – С. 63–76.
2. Vasiliev S.V., Tkatch V.I., Aronin A.S., Kovalenko O.V., Rassolov S.G. // J. Alloys Compds. – 2018. – Vol. 744 – P. 141–145.
3. Васильев С.В., Парфений В.И., Першина Е.А., Аронин А.С., Коваленко О.В., Ткач В.И. // ФТТ. – 2020. – Т. 62, № 12. – С. 2012–2019.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.36

# Спин-оптические и когерентные свойства дефектных центров в политипе карбида кремния 6*H*-SiC

**Грачева И. Н.[1], Мурзаханов Ф. Ф.[1], Мамин Г. В.[1], Ермакова Ю. Е.[1], Дмитриева Е. В.[1], Байбеков Э. И.[1], Гафуров М. Р.[1]**

[1]*Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия,*
Irina.Gracheva@kpfu.ru

Твердотельные спиновые дефекты в полупроводниковых матрицах представляют интерес для исследователей как платформа для создания ансамбля электронных кубитов. Свойства высокоспинового центра ($S$ = 1), состоящего из атома азота (N), замещающего атом углерода, и ближайшей вакансии по кремнию в политипе карбида кремния 6*H*-SiC, подобны свойствам NV-центров в алмазе [1]. В данной работе изучены особенности спиновой поляризации NV-центров в кристалле карбида кремния и влияние лазерного возбуждения на когерентные свойства центра окраски методом фотоиндуцированной импульсной ЭПР-спектроскопии (W-диапазон, 94 ГГц). Детектирование темной моды после оптического импульса замедляет скорости спин-фононного взаимодействия NV-дефектов с локальным окружением на один порядок по сравнению с непрерывным лазерным облучением, достигая временной области секундного масштаба ($T_1$ = 0,74 с) при температуре $T$ = 50 К. Обнаружена чрезвычайно эффективная спиновая поляризация NV-центров, необходимая для установления начального чистого квантового состояния.

Влияние оптической накачки на динамические свойства NV-центра также исследовалось путем регистрации электронных осцилляций Раби в X- и W-диапазонах. Основным механизмом затухания спиновой намагниченности для осцилляций Раби является неоднородное распределение магнитной компоненты $\mathbf{B}_1$ внутри резонатора и, соответственно, исследуемого кристалла. Несмотря на высокую концентрацию дефектов NV, спин-спиновое взаимодействие играет незначительную роль во времени затухания [2].

Также были изучены температурные зависимости спин-спиновой и спин-решеточной релаксации NV-центров. Определены характерные времена релаксации и основные механизмы, определяющие параметры процессов.

Полученные спин-оптические и когерентные свойства очерчивают временную область многоимпульсных квантовых манипуляций с участием оптических и микроволновых источников для перспективных NV-центров в квантовой фотонике.

## Литература

1. von Bardeleben H. J., Cantin J. L., Csóré A., Gali A., Rauls E., Gerstmann. U. // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 94. – P. 121202.
2. Baibekov E.I. // JETP Lett. – 2011. – V. 93, P. 292-297.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности – FZSM-2024-0010

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.37

# СОЗДАНИЕ В ОБЪЕМЕ КРИСТАЛЛА МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСКООБРАЗНОЙ ПОЛОСТИ НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ С ПОЛИРОВАННЫМИ ВНУТРЕННИМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ

**Степанцов Е.А.**

*Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия, stepantsov@ns.crys.ras.ru*

После разработки метода твердофазного сращивания кристаллов к нему проявляется повышенный интерес, как в исследовательском плане, так и в прикладном. В соответствии с данным процессом кристаллические заготовки совмещаются по предварительно полированным поверхностям, нагреваются, прижимаются друг к другу, выдерживаются в таких условиях в течение некоторого времени и охлаждаются. Такая выдержка осуществляется течение нескольких десятков минут, а прижатие проводится до давления, не доходящего до предела упругости. Поэтому пластической деформации материала не имеет места. Дальнейшим развитием метода твердофазного сращивания кристаллов является предварительное травление сращиваемых поверхностей с созданием рельефа по заранее заданному рисунку. В настоящей работе такое травление проводилось на кристаллах фианита направленным и однородным по сечению пучком плазмы разогнанных ионов аргона, а рисунок представлял собой круг диаметром 18 мм. Глубина травления составляла по 50 нм и больше соответственно на каждой паре образцов. На рис. 1 представлен монокристалл, полученный твердофазным сращиванием заготовок с протравленными углублениями по 50 нм. В результате получился монокристалл с полостью в его объеме в виде диска диаметром 18 мм и расстоянием между плоскими поверхностями 100 нм.

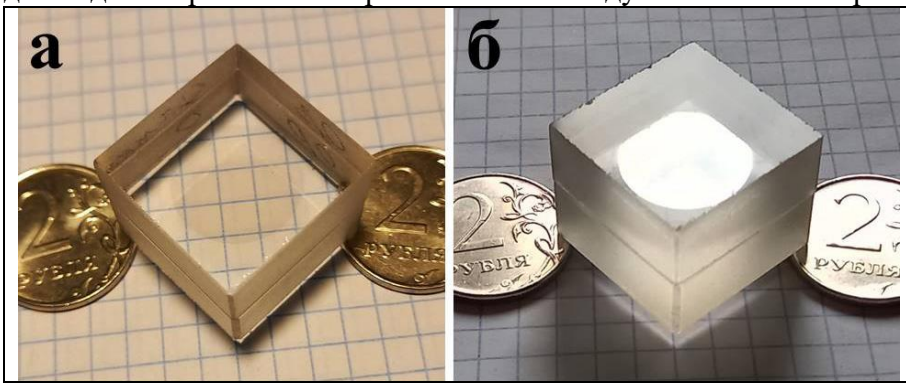



Рис. 1. Вид кристалла с полостью при направлении оси съемки под углом, при котором: а- полость выглядит прозрачной; б- ее верхняя поверхность полностью отражает свет.

Из рис. 1а видно, что в области внутренней полости материал полностью прозрачен, но в ней заметно небольшое затемнение, причем степень этого затемнения во всех точках диска одинакова. На рис.1б можно видеть, что при более остром угле съемки по отношению к поверхности диска свет от него полностью отражается. Оба эти факта свидетельствуют о том, что по всей площади полости зазор между ее поверхностями не только не нарушался, но даже имел одинаковую толщину. При толщине зазора в 100 нм диск выглядел бесцветным. Когда эта толщина на других образцах была больше, в силу интерференции лучей, отраженных от нижних и верхних плоскостей полостей зазоры имели интерференционную окраску, причем разную, соответствующую толщине зазора, но во всех случаях однородную по всей площади, что подтверждает их однородность по толщине.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ "Курчатовский институт".

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.38

# РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕМРИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДИРОВАННОГО СЕЛЕНИДА СВИНЦА

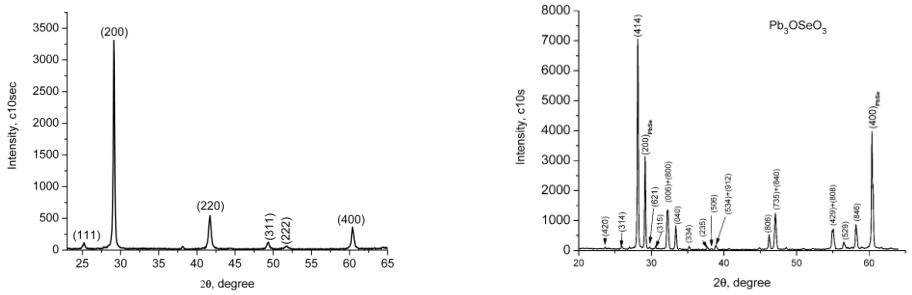
**И. М. Шмытько[1], Н. А. Тулина[1], А. Н. Россоленко[1], А, А. Иванов[2], Д.Н.Борисенко[1], Н.Н.Колесников[1]**

[1]*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук РАН, Черноголовка, 142432 Россия.*

[2] *Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва*

*E-mail: shim@issp.ac.ru*

Для создания мемристоров мы использовали структуры на основе оксидированного селенида свинца PbSeOx, которые демонстрируют характеристики p-n переходов [1]. Для их получения методом Бриджмена выращивались высококачественные монокристаллы PbSe. Полученные монокристаллы служили в качестве мишени для нанесения пленок PbSe методами импульсного лазерного напыления и испарения в вакууме на кремниевые подложки. Следующим этапом было формирование оксидированного селенида свинца PbSeOx в исходных монокристаллах, пленках и в полученных из монокристаллов порошках. Оксидирование перечисленных типов образцов осуществлялось термообработкой на воздухе в режиме изотермических отжигов согласно литературным данным [2]. Методом рентгеновской дифрактометрии в геометрии Брэгга - Брентано исследовались структурные состояния всех типов образцов в зависимости от температуры и времени отжига (рис.1). В результате были выбраны оптимальные режимы получения p-n переходов PbSe/PbSeO3 во всех формах исследованных селенидов свинца: монокристаллов, пленок, порошков. Используя оксидированный селенид свинца как интерфейс, были сделаны гетероструктуры Ag/PbSeO3/PbSe, демонстрирующие стабильные мемристивные характеристики [3].




(a) (b)

Рис.1. Дифракционные спектры исходной напыленной пленки (a) и после отжига при T=550 C в течение 18 часов (b).

Работа поддержана в части государственных заданий Института Физики твердого тела РАН.

Литература

1.Vladimir Kasiyan, Zinovi Dashevsky, Casey Minna Schwarz, M. Shatkhin, Elena Flitsiyan, Leonid Chernyak and Dmitry Khokhlov. Infrared detectors based on semiconductor p-n junction of PbSe. Journal of Applied Physics 112, 086101 (2012)

2.https://books.google.ru/books?id=QDPEAAAQBAJ&pg=PA299&lpg=PA299&dqPb3SeO3&source=bl&ots=0T7QhAn5b_&sig=ACfU3U1HZ0cFodn2O5BpD9LxCgs1Xyvsag&hl=ru&sa=X&ved=2ahUKEwiypufV586HAxX2ExAIHS3OH04Q6AF6BAgLEAM#v=onepage&q=Pb3SeO3&f=false

3.Н.А. Тулина, А.Н. Россоленко, И.М. Шмытько, И. Ю. Борисенко, Д.Н. Борисенко, Н.Н. Колесников. Свойства интерфейсных структур на основе оксидированного селенида свинца. Принято в журнал Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и Нейтронные Исследования. – 2025. – № 4.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.39

# Особенности распада аморфной фазы в металлических системах

**Абросимова Г.Е.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия, gea@issp.ac.ru*

Кристаллизация аморфной фазы имеет ряд особенностей, отличающих формирование нанокристаллов в аморфной фазе от соответствующих процессов формирования кристаллов из жидкой фазы и процессов фазовых превращений, происходящих при переходе одних кристаллических фаз в другие. Аморфное состояние является нестабильным. Один из критериев стабильности аморфной фазы связан с подобием ближнего порядка в аморфном сплаве и возникающих кристаллических фазах. Если кластеры в аморфном сплаве похожи по локальному окружению атомов на структуру равновесных кристаллических фаз, то последующая кристаллизация облегчена, т.е. стабильность аморфного сплава понижена. Кристаллизация аморфных сплавов чаще всего происходит по механизму зарождения и роста и может быть первичной, эвтектической или полиморфной; в некоторых случаях наблюдается спинодальный распад аморфной фазы. При кристаллизации по механизму зарождения и роста важнейшим параметром является величина критического зародыша, минимальным размером которого является размер элементарной ячейки. При кристаллизации аморфных металлических сплавов в абсолютном большинстве случаев образуются метастабильные фазы, некоторые из которых формируются только при распаде аморфной структуры. Далее рассмотрены примеры кристаллизации гомогенной или гетерогенной аморфной фазы в сплавах разного химического состава:

- эвтектическая кристаллизация вместо полиморфной (образование нескольких фаз вместо одной: система Ni-Zr);

- одновременное образование стабильных и метастабильных фаз (система PdNiP);

- одновременное образование кристаллических и квазикристаллических фаз (сплавы на основе Zr, система Al-Mn);

- наследование ближнего порядка ($Al_{85}Ni_{10}Ce_5$, сплавы на основ Co) ;

- изменение ближнего порядка с температурой;

- расслоение и образование гетерогенной аморфной фазы (мелкомасштабное, среднемасштабное);

- спинодальный распад;

- многоступенчатый переход в равновесное состояние;

- корреляция структура-свойства.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.40

# РЕЛАКСАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС С ОЧЕНЬ МАЛЫМ ВРЕМЕНЕМ РЕЛАКСАЦИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

**Афонин Г. В. [1], Макаров А. С.[1], Кобелев Н. П.[2], Хоник В. А.[1]**
[1]*Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия,*
v.a.khonik@yandex.com
[2]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*

Проведены изменения внутреннего трения (ВТ) в четырнадцати объемных металлических стеклах (МС) на частотах $f = 0.4 - 1.7$ МГц методами резонансной ультразвуковой спектроскопии (РУС) и электромагнитного акустического преобразования (ЭМАП). В двенадцати из этих МС обнаружен пик внутреннего трения при температурах 400–500 K, который почти не зависит от предварительной термообработки. Пик ВТ смещается в сторону высоких температур с ростом частоты, что говорит о его релаксационной природе. Поскольку пик ВТ определяется условием $2\pi f\tau = 1$, можно рассчитать время релаксации $\tau$, которое оказалось примерно 0.3 микросекунды во всех случаях. Релаксационный процесс со столь малым временем релаксации обнаружен в МС впервые.

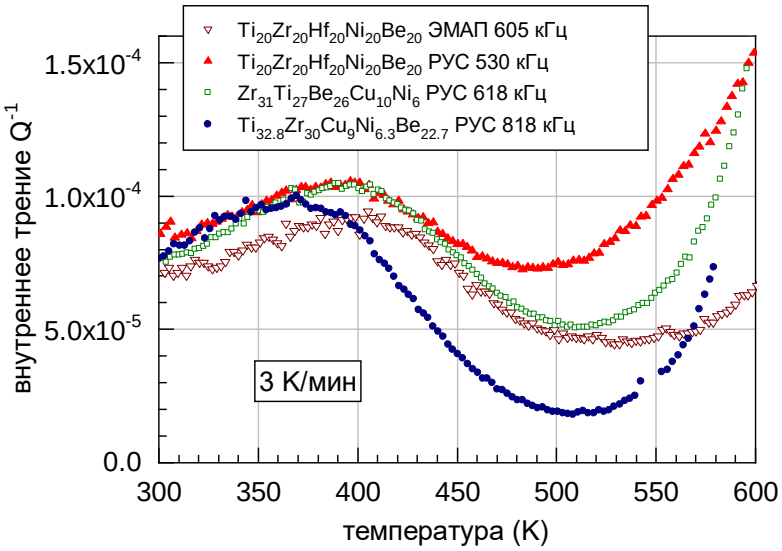



Рис. Температурные зависимости внутреннего трения для трех металлических стекол, полученные методами РУС и ЭМАП.

Аргументируется идея о том, что природа обнаруженных пиков ВТ определяется релаксацией дефектов типа межузельных гантелей, вмороженных в твердое стекло при закалке расплава. Эти дефекты можно рассматривать как упругие диполи и их переориентация в поле приложенного механического напряжения вызывает неупругую деформация и появление релаксационного пика ВТ. Определены активационная энтальпия (0.62–1.08 эВ) и активационная энтропия ($4 \leq \Delta S/k_B \leq 15$) процесса переориентации дефектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-12-00162.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.41

# Absorption of electromagnetic radiation in Peshle-Teller potential quantum wire

**Babanli A. M.[1], Ibragimov B.G. [2,3], Agayev Z.S.[3]**

*[1]Department of Physics, Süleyman Demirel University, 32260 Isparta, Turkey[2]*

*[2]Azerbaijani-French University, 183 Nizami street, Baku, Azerbaijan*

*[3] Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan*

The optical and kinetic properties of low-dimensional quantum systems (quantum well, superlattice, quantum wires, quantum dots) differ radically from the properties of their massive materials. The optical and electronic properties of low-dimensional semiconductor structures are an important part of the physics of modern semiconductors. An important feature of these heterophase systems is the strong relationship between component composition, geometric shape and size as well as their physical properties. In the theoretical description of processes in nanostructures, Hamiltonian real construction procedure is very important for the the theoretical description of processes in nanostructures.

If studing of the sample geometry supports the symmetry of the Hamilton operator, then it forms the component composition of the nanostructure, physicochemical, mechanical, etc. features and profile of the limiting potential of the environment system.

In low-dimensional systems, various limiting potentials - rectangular, parabolic, triangular, etc. type potentials are applied. Due to its adjustable asymmetry feature, the Pöschl-Teller potential is expected to provide interesting optical properties, so, many researchers are interested in this type of potential. Pöschl -Teller have different types of potential - (Sec, Csc) squares , Sech squares , cot- squares, tan squares and Morse quantum well . The results of the study show that the Pöschl -Teller potential has rich applications in optical devices or resonance tunneling devices . Optical absorption in quantum wells with confinement potential of the Peshel-Teller type has been extensively studied.

In this paper, optical absorption with confinement potential is studied in Peshel-Teller-type quantum wires.

The interband absorption coefficient is calculated by the following expression [1]:

$$\alpha = \frac{2\pi\sqrt{e}}{c\hbar N_f} \sum_{N\ n\ p_x} \sum_{N'n'p_x'} f_0\left(E_{n_1,n_2,p_z}\right)\times$$

$$\left|\langle N,n,p_x|H_R|N',n',p_x'\rangle\right|^2 \delta\left(E_{N,n\ ,p_x} - E_{N',n',p_x'} + \hbar\omega\right),$$

The absorption coefficient is considered in the case of linear polarization and circular polarization. An expression for the absorption coefficient of electromagnetic radiation in a Peshle-Teller potential quantum wire was obtained. The absorption coefficient was calculated by the first-order excitation theory. The cases of linear and circular polarization of light are considered, and the absorption carries like as a resonant character.

## References

1. Ibragimov G.B. // Physica status solidi (b).-2004.- 241 (8), C.- 1923-1927.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.42

# Расчет радиально-симметричного профиля плотности тройных квантовых точек структуры ядро/оболочка состава AgInS/ZnS методом SAXS

**Амарантов С.В.**
*НИЦ Курчатовский институт, Москва, РФ, amarantov_s@mail.ru*

Структурно-люминесцентные квантовые точки (КТ) I-III-VI (I = Cu, Ag; III = In, Al, Ga; VI = S, Te, Se) [1] обладают возможностями тонкой настройки спектрального диапазона путем изменения размера и состава. Это делает возможным спроектировать КТ испускающие свет в видимом и ближнем инфракрасном (ИК) диапазонах. Благодаря низкой токсичности, люминесцентной и коллоидной стабильности, КТ состава I-III-VI возможно использовать в качестве многофункциональных люминесцентных меток в живых организмах. Наличие трех и более элементов в составе позволяют изменять и улучшать оптические и электронные свойства КТ, открывая новые возможности для получения и применения люминесцентных наночастиц. Разделения по размеру КТ AgInS/ZnS осуществлялся путем фракционирования - методом многократного переосаждения и центрифугирования [2]. В результате было получено восемь фракций КТ с диаметром КТ от $D_{max}$3,9 нм до $D_{max}$17,0 нм.

Исследование внутренней структуры КТ проводилось методом малоуглового рентгеновского рассеяния SAXS. Используя модель сферически симметричного приближения из кривой малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS) было получено распределение радиальной плотности внутри частицы $\rho(r)$. С ростом номера образца, который пропорционален суммарному времени седиментации, размер КТ постепенно уменьшался, см. таблицу:

| № | ядро - сульфид серебра-индия | | оболочка ZnS | радиус инерции | max размер | объем |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $R_1$, нм | $R_2$, нм | $R_3$, нм | $R_g$, нм | $D_{max}$, нм | $V_p$, нм$^3$ |
| 1 | 0,77 | 1,81 | 4,40 | 3,6 | 17,0 | 57,9 |
| 2 | 1,04 | 1,58 | 3,49 | 2,7 | 9,0 | 40,7 |
| 3 | 0,45 | 0,89 | 2,70 | 2,3 | 7,9 | 32,1 |
| 4 | 0,38 | 0,85 | 2,57 | 2,0 | 7,0 | 22,3 |
| | $R_C$ | | $R_S$ | | | |
| 5 | 1,33 | | 1,88 | 1,7 | 6,1 | 16,9 |
| 6 | 1,27 | | 1,83 | 1,6 | 5,5 | 13,4 |
| | $R_0$ | | | | | |
| 7 | 1,23 | | | 1,3 | 4,3 | 9,5 |
| 8 | 1,12 | | | 1,2 | 3,9 | 7,4 |

Таблица параметров профиля плотности и размеров КТ.

В работе предложена методика для описания профиля радиального распределения плотности по радиусам. В результате получено, что растворы КТ N1-N4 описываются тремя радиусами: $R_1$, $R_2$, $R_3$, первые два $R_1$ и $R_2$ можно отнести к ядру, для растворов N5, N6 характерно понижение количества параметров модели радиального распределения плотности $\rho(r)$ до двух радиусов $R_C$, $R_S$, а для образцов N7, N8 – оказалось достаточным одного радиуса $R_0$. Таким образом, с уменьшением размера происходят структурные изменения от трех оболочечной далее двух оболочечной и одной оболочечной модели.

Работа выполнена по госзаданию НИЦ «Курчатовский институт».

## Литература

1. Johnson C. M., Pate K. M., Shen Y., et al. // J. Colloid Interface Sci. 2015. Vol. 458. P. 310–314.
2. Raevskaya A.E., Lesnyak V., Haubold D., et al. // Phys. Chem. 2017. Vol. 121. P. 9032–9042.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.43

# ON THE FORMATION OF INVERSE ISOSBESTIC POINT ON TRANSVERSE MAGNETORESISTANCE CURVES FOR VARIOUS COMPOUNDS

**Anisimov M.[1,2], Bogach A.[1], Semeno A.[1,2], Gribanov A.[3], Salamatin D.[2,4], Bokov A.[2], Sidorov A.[2], Tsvyashchenko A.[2]**

[1]*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia,* anisimov.m.a@gmail.com

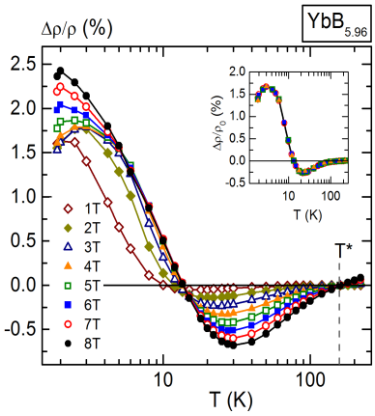
[2]*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Troitsk, Russia*

[3]*Department of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

[4]*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

The phenomenon of isosbestic point (IP) is still the subject of debates [1]. This effect manifests itself, when the family of non-monotonic curves of some physical quantity $f(x, y)$ intersects in a narrow region or even in single point with changing of parameters. A typical example of IP is the temperature behavior of heat capacity $C(T)$ measured at different values of magnetic field $H$ [1, 2]. Sometimes except $H$ an external pressure $P$, chemical pressure $x$ or local interaction strength $U$ may be considered as additional control parameter. Later crossing effects were also detected for $T$-evolution of Seebeck coefficient, elastic moduli, sound adsorption, spin-lattice relaxation rate, etc.

In current work we study the formation of isosbestic point on the curves of transverse magnetoresistance (TMR) measured at temperatures 1.7 − 300 K, in magnetic fields up to 82 kOe. Experiment has been performed on high quality single- and polycrystals of several objects with different transport and magnetic properties, including $Ce_3Pd_{20}Si_6$ heavy-fermion metal [$\rho(300\ K)/\rho_0 = 1.2$], $YbB_{5.96}$ non-magnetic narrow-band semiconductor [$\rho(1.7\ K)/\rho(300\ K) = 1.8$], and ferromagnet $SmCoC_2$ [$\rho(300\ K)/\rho_0 = 1.7$]. Mentioned materials were grown by different procedures: standard arc-melting ($SmCoC_2$), vertical crucible-free inductive zone melting ($YbB_{5.96}$) and melting using a toroid high-pressure cell under both high pressure ($P$ = 8 GPa) and temperature ($T$ = 1500 − 1700 K) conditions ($SmCoC_2$). The high quality of crystals and the chemical composition was controlled by scanning electron microscopy, energy dispersive X-ray spectroscopy, and powder X-ray diffraction methods.




Data obtained allow us to register IP of a new type, which is practically coincides with the position of inversion point separating positive ($\Delta\rho/\rho > 0$) and negative ($\Delta\rho/\rho < 0$) regimes of TMR, see the main panel of Fig.1. The phenomenon, when two characteristic temperatures of different nature practically coincide is very unusual, and they may be considered as one temperature scale (inverse isosbestic point). The example of isosbestic scaling of TMR is presented in the inset of Fig.1.

This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22-12-00008 (https://rscf.ru/project/22-12-00008/) and by the National Research Project No. AAAA-A21-121011590083-9.

## References

1. Greger M., Kollar M., Vollhardt D. // Phys. Rev. B – 2013. – V. 87. – P. 195140.
2. Belevtsev B.I., Krasovitsky V.B., Naugle D.G., Rathnayaka K.D.D., Agnolet G., Felner I. // J. Phys. Cond. Mat. – 2009. – V. 21. – P. 455602.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.44

# Инженерия дисперсии спектра стоячих спиновых волн в непрерывно градуированных тонких эпитаксиальных пленках сплава Pd-Fe

**И. В. Янилкин[1], А. И. Гумаров[1], И. А. Головчанский[2], Б. Ф. Габбасов[1], Р. В. Юсупов[1], Л. Р. Тагиров[1,3]**

*[1] Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия*
*[2] Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*
*[3] КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.*
E-mail: ltagirov@mail.ru

Обменные спиновые волны (СВ) в магнитных тонких пленках и гетероструктурах активно изучаются из-за их свободного от зарядового тока распространения в магнитных материалах, что важно для магнонных приложений. В этом докладе мы представляем результаты серии работ [1-6], в которых были впервые синтезированы тонкие пленки сплава палладий-железо (Pd-Fe) с непрерывным изменением состава сплава по толщине пленки по заранее заданному закону и показано, что закон дисперсии и диапазон энергий стоячих спиновых волн в таком синтетическом магнитном материале могут быть перестроены в самых широких пределах изменением профиля распределения концентрации железа по толщине пленки и температуры измерений.

Непрерывно градуированные эпитаксиальные пленки сплава Pd-Fe с линейным, ступенчатым, лоренцевым, синусоидальным, косинусоидальным и другими вариантами распределения железа в матрице палладия в диапазоне концентраций 2–50 ат.% и толщиной от 50 до 400 нм синтезировались молекулярно-лучевой эпитаксией с использованием программирования зависимости потока осаждаемого материала от температуры эффузионых ячеек [1-4]. СВ изучались с помощью спектрометра ЭПР X-диапазона Bruker ESP300 и широкополосного ФМР с использованием векторного анализатора цепей Rohde & Schwarz ZVB20 в различных геометриях и температурах измерения (10–300 К).

Моделирование спектров СВ проводилось в рамках классического уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта, которое дает хорошее описание экспериментальных спектров для всех толщин пленок, температур и распределений концентраций железа в образцах [2-5]. Исследование серии образцов с разными распределениями, диапазонами изменения концентрации железа и итоговыми толщинами пленок показало, что можно получить разнообразные законы дисперсии резонансных полей и диапазоны резонансных частот/полей [2-5]. Широкополосный ФМР позволил определить константу Гильберта затухания СВ в диапазоне 0.020-0.032 [6].

Работа выполнена при поддержке программы Приоритет-2030 КФУ.

## Литература

1. I.V. Yanilkin, A.I. Gumarov, ... L.R. Tagirov // J. Vac. Sci. Techniol. A. – 2024. – V.42(5). – Art. 052703.
2. I. Yanilkin, A. Gumarov, ... L.R. Tagirov // Nanomaterials (MDPI). – 2022. – V.12. – Art. 4361.
3. I.A. Golovchanskiy, I.V. Yanilkin, ... L.R. Tagirov // Phys. Rev. Mater. – 2022. – V.6. – Art. 064406.
4. I. V. Yanilkin, A.I. Gumarov, ... L.R. Tagirov // Technical Physics. – 2023. – V.68,N2. – P. 202-208.
5. I.V. Yanilkin, A.I. Gumarov, ... L.R. Tagirov // Phys. Rev. B. – 2025. – V.111. – Art. 094428.
6. I.V. Yanilkin, A.I. Gumarov, ... L.R. Tagirov // Appl. Phys. Lett. – 2025. (submitted).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.45

# THE STUDY OF HEAT CAPACITY OF LAVES PHASE $NdRh_2$

**Anisimov M.[1,2], Bokov A.[2], Salamatin D.[2,3], Krasnorussky V.[2], Semeno A.[1,2], Chtchelkatchev N.[2], Magnitskaya M.[2], Sidorov V.[2], Bogach A.[1], Tsvyashchenko A.[2]**

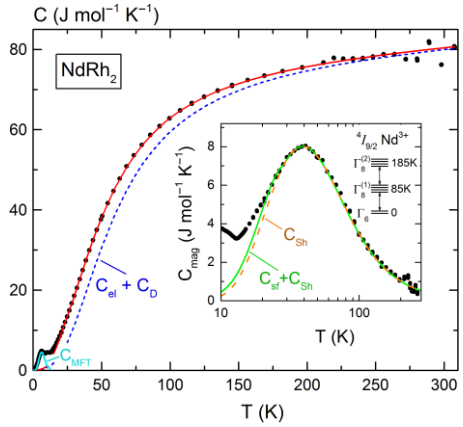
[1]*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*, anisimov.m.a@gmail.com

[2]*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Troitsk, Russia*

[3]*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

Rare-earth (RE) transition metal (TM) compounds $RETM_2$ with a C15 cubic crystal structure ($MgCu_2$-type, sp. gr. *Fd*-3*m*, No. 227) have long-lasting history of investigation. These materials represent almost ideal model systems, due to their simple chemical composition, crystal structure and ease of production. The members of $RETM_2$ family also display a plethora of physical properties, including superconductivity, unusual magnetism, hydrogen absorption, as well as a giant magnetoresistance and substantial magnetocaloric effects [1-3], etc.

In current work we study zero-field heat capacity $C(T)$ of recently synthesized Laves phase $NdRh_2$. This object was successfully obtained using a toroid high-pressure cell under both high pressure ($P$ = 8 GPa) and temperature ($T$ = 1500 − 1700 K) conditions. Experiment has been performed on PPMS-9 setup at temperatures 2 − 300 K. The high quality of the sample and its chemical composition was controlled by X-ray methods as well as by additional measurements of magnetization, electron-spin resonance and charge transport [3].




The heat capacity was analyzed by original procedure, which takes into account along with electronic ($\gamma_0$ = 25 mJ/mol K$^2$) and phononic [$\omega_D$ = 20.9 meV] contributions additional Schottky component ($C_{Sh}$), caused by crystalline-electric-field effect, (see the main panel and the inset of Fig.1 and also [3]). It was established that Schottky anomaly emerges in paramagnetic state of $NdRh_2$ with the ground state of the multiplet $^4I_{9/2}$ ($Nd^{3+}$) as a $\Gamma_6$ doublet. The excited states were fixed according to the splitting scheme depicted in the inset of Fig.1. The Schottky component was corrected by introduction of additional term resulting from the presence of spin-fluctuations [$C_{sf} = f(\theta_{sf})$] in the system. The spin-fluctuation temperature was estimated as $\theta_{sf} \approx 28.5$ K. At low temperatures, where all above components may be neglected, a double-peak structure appears on experimental data, Fig.1. Among of them the first anomaly at $T_1$ = 6.3 K may be associated with the ferromagnetic transition of Nd magnetic subsystem. It was approximated by using mean-field theory ($C_{MFT}$), Fig.1. The satellite maximum at $T_2$ = 10.8 K also has magnetic nature. It was shown that in the range 8 – 50 K, magnetic properties of $NdRh_2$ are determined by the ferrimagnetic Nd-Rh interaction, resulting in magnetic inhomogeneity and spin fluctuations. Details about the analysis are presented in [3].

This study funded by the Russian Science Foundation grant No. 22-12-00008 (https://rscf.ru/project/22-12-00008/).

## References

1. Liu W. et al. // Appl. Mater. Today – 2022. – V. 29. – P. 101624.
2. Greidanus F., et al. // Physica B+C – 1983. – V. 119. – P. 228.
3. Krasnorussky V., et al. // J. Magn. Magn. Mat. – 2024. – V. 610. – P. 172480.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.46

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ AlN ПО ДАННЫМ МЕТОДА ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

**Мохов Е. Н.[1], Мясоедов А. В.[1], Аргунова Т. С.[1], Гуткин М. Ю.[2,3], Казарова О. П.[1], Нагалюк С. С.[1]**

[1]*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

[2]*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

[3]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия.*

argunova@mail.ioffe.ru

Для производства широкозонных приборов на основе нитридов металлов III группы необходимы собственные подложки с диаметром больше 2 дюймов. Монокристаллы нитрида алюминия (AlN) являются реальным источником получения таких подложек. Объемный AlN выращивают методом сублимации на подложках карбида кремния (SiC) в условиях сравнительно небольшого несоответствия параметров решеток: ~1%. Однако различие в коэффициентах теплового расширения AlN и SiC (~23%) приводит к растрескиванию при охлаждении структур AlN/SiC от 2000 до 20 °C.

На начальном этапе гетероэпитаксиальный рост AlN идет от многочисленных центров кристаллизации на поверхности затравки SiC, и в AlN формируются проникающие дислокаций (ПД). Контроль плотности ПД осуществляется путем увеличения длины слитка. Установлено, что после достижения толщины ~2–10 мм плотность ПД снижается от $10^8$ см$^{-2}$ вблизи интерфейса до $10^5$ см$^{-2}$ [1], а трещины зарастают. Поверхность кристалла толщиной ≥ 2 мм становится гладкой со слоевым рельефом. В настоящей работе исследованы процессы распространения и взаимодействия дислокаций в кристаллах AlN диаметром 54 мм и толщиной 2.5 мм, легированных примесями кремния, углерода и кислорода.

Описано зарождение ПД в процессе образования дислокаций несоответствия при достижении критической толщины растущего слоя AlN. Установлено, что ПД разных типов: ***a***–типа с вектором Бюргерса $\mathbf{b}_a = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$, ***c***–типа с $\mathbf{b}_c = \langle 0001\rangle$ и ***a+c***–типа с $\mathbf{b}_{a+c} = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3\rangle$ образуют границы в виде стенок между областями, свободными от дислокаций. Кроме того, предложен механизм формирования малоугловых границ. Далее, обнаружено и объяснено взаимодействие ПД с дислокациями, скользящими в базисной плоскости. В частности, дислокация ***a***–типа, скользящая в базисной плоскости, может закрепиться на массиве дислокаций, формирующих малоугловую границу. В результате взаимодействия, во-первых, ПД способна переползать в плоскость базиса, не распространяясь далее в растущий кристалл. Во-вторых, дислокации, скользящие в базисной плоскости, стремятся быть винтовыми.

Некоторые виды взаимодействия дислокаций наблюдались ранее в тонких эпитаксиальных пленках GaN/$Al_2O_3$; однако для AlN/SiC вышеописанные результаты были получены впервые благодаря высокому качеству двухдюймовых кристаллов AlN [2].

## Литература

1. Sumathi R.R., Barz R.U., Straubinger T., Gille P. // J. Cryst. Growth–2012.–V. 360.–P. 193-82.

2. Anisimov A.N., Breev I.D., Likhachev K.V., Kazarova O.P., Nagalyuk S.S., *et al*. // Semiconductors.–2022.–V. 56.–P. 281-287.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.47

# Влияние объемного эффекта кристаллизации на формирование структуры при распаде аморфной фазы

**Аронин А.С.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия, aronin@issp.ac.ru*

Плотность аморфной фазы отличается от плотности образующихся при кристаллизации фаз. В металлических сплавах объемный эффект превращения (при кристаллизации) может быть как положительным, так и отрицательным и составляет, как правило, несколько процентов. На фронте кристаллизации возникают упругие напряжения и, следовательно, деформации как аморфной, так и кристаллических фаз. Величины этих упругих напряжений и деформаций могут определять взаимное расположение фаз, их морфологию и структуру, а также последовательность образования. Способ компенсации объемного несоответствия при кристаллизации может определять морфологию выделений.

Если компенсация происходит путем диффузии носителей свободного объема к поверхности образцов, то разная удаленность стоков свободного объема от фронта реакции, приводит к формированию выделений разной структуры и морфологии. Такое различие в морфологии образующихся фаз в зависимости от толщины наблюдается в сплавах на основе железа, кобальта.

Компенсация объемного эффекта путем деформации образующихся фаз приводит к образованию дислокаций в нанокристаллах Ni(Mo) системы Ni-Mo-B, начиная с некоторого критического размера.

Одним из ярких примеров проявления влияния объемного эффекта кристаллизации на морфологию и структуру образующихся фаз является образование нанокристаллической структуры в сплаве $Al_{32}Ge_{68}$. При распаде сплава $Al_{32}Ge_{68}$ образуются фазы Al и Ge, причем Al является менее плотным, чем аморфная матрица, а Ge – более плотным. Методом изучения кристаллизации “in-situ” обнаружено, что на начальном этапе формируется нанокристаллическая структура с размером нанокристаллов ~10 нм. Образование нанокристаллической структуры, состоящей из зерен Al и Ge, вызвано необходимостью компенсации упругих напряжений на наноуровне на фронте кристаллизации для того, чтобы избежать нарушения сплошности материала.

Совокупное влияние имеющихся внутренних напряжений и дополнительных напряжений, возникающих вследствие компенсации объемного эффекта кристаллизации, влияет влияние на кинетику образования кристаллов при кристаллизации сплавов с неоднородным исходным распределение внутренних напряжений. На основании проведенных расчетов и сопоставления их с экспериментальными данными установлено, что частота зарождения кристаллов в приповерхностных областях (в которых присутствуют сжимающие напряжения) аморфных микропроводов на основе железа в 1,5 – 4 раза превышает скорость зарождения в лентах такого же состава. Получены образцы с градиентным распределением плотности расположения количества нанокристаллов по сечению.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.48

# НИЗКОРАЗМЕРНЫЙ МАГНЕТИЗМ НА ПРИМЕРЕ $BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$, $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$, $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$

**Астахов Н. В.[1], Бердоносов П.С. [1]**

*[1]Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*nickavit@yandex.ru*

В последнее время наблюдается повышенное внимание к соединениям, которые обладают магнитными подсистемами пониженной размерности. Благодаря экзотическому строению их кристаллической решетки, в таких материалах возникают корреляции ближнего порядка, с возможной реализацией состояния квантовой спиновой жидкости. Интерес к таким веществам в первую очередь фундаментальный, из-за их схожести с поведением сверххолодных газов, однако, есть предположения об их использовании в управляемых теплопроводах и применении в квантовых компьютерах. Примерами таких соединений могут выступать фазы состава $BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$ как нульмерный, $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ как одномерный и $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$ как двумерный магнетики. В случае первых двух соединений в литературе имеются данные о существовании изоформульных аналогов, для которых наблюдаются низкоразмерные магнитные свойства.

Целью данной работы является поиск и синтез чистых образцов $BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$, $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$, $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$, а также изучение их физических свойств.

В результате работы получены оптимальные условия для получения образцов в зависимости от состава. Подтверждается, что кристаллические структуры $BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$, $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ действительно принадлежат соответствующим изоформульным рядам соединений. Обнаруженная новая фаза $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$ не имеет структурных аналогов.

$BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$ и $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ охарактеризованы методами инфракрасной спектроскопии, термического анализа. Для $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$ и $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ построены зонные структуры методом DFT расчета, а также определена ширина запрещенной зоны из спектров диффузного отражения, которые коррелируют с результатами DFT расчетов.

$BaNi_2(SeO_3)_3 \cdot 3H_2O$, $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ и $SrCu(HSeO_3)_2Cl_2 \cdot 6H_2O$ проявляют поведение, характерное для низкоразмерных магнитных подсистем. На температурных зависимостях магнитной восприимчивости в данных образцах наблюдаются широкие максимумы, связанные с возникновением корреляций ближнего порядка. При температурах Нееля $T_N$=25.6 К, $T_N$=3 К и $T_N$=20 К, соответственно, фазы испытывают антиферромагнитное упорядочение.

Подтверждается, что в образце $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$ реализуется модель квазиодномерных цепочек с внутрицепочечным обменом $J/k_B$= -0,51 К и межцепочечным – $J/k_B$= -0,06 К.

В докладе проводится сравнение структурных параметров и магнитных свойств новых фаз и родственных им соединений, корреляции состав – структура - свойство.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.49

# ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В СОЕДИНЕНИИ $LaB_6$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

**Азаревич А. Н.[1], Богач А. В.[1], Хрыкина О. Н.[2], Болотина Н. Б.[2], Гридчина В. М.[2], Гаврилкин С. Ю.[3], Цветков А. Ю.[3], Габани С.[4], Флахбарт К.[4], Кузнецов А. В.[5], Случанко Н. Е.[1]**

[1]*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия, nes@lt.gpi.ru*
[2]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия, kvarkpower@gmail.com*
[3]*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия, gavrs@lebedev.ru*
[4]*Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия, gabani@saske.sk*
[5]*Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ), Москва, Россия, AVKuznetsov@mephi.ru*

Гексаборид лантана ($LaB_6$) известен, как один из наиболее эффективных материалов для термоэмиссионных катодов, применяемых в электронной микроскопии, при анализе поверхностей, метрологии и др. Также $LaB_6$ считается немагнитным реперным соединением для фундаментальных исследований сильно коррелированных электронных систем, включая топологический кондо-изолятор $SmB_6$, кондо-решетку $CeB_6$, зонный ферромагнетик $EuB_6$ и др. Одним из наиболее спорных вопросов, связанных с $LaB_6$, является наблюдение в нем сверхпроводимости (СП). Впервые неполная СП с $T_c$~5.7 К была обнаружена в $LaB_6$ в [1], однако в дальнейшем величина $T_c$ была скорректирована до 0.45 К [2], 0.122 К [3], а в [4] СП вообще не наблюдалась.

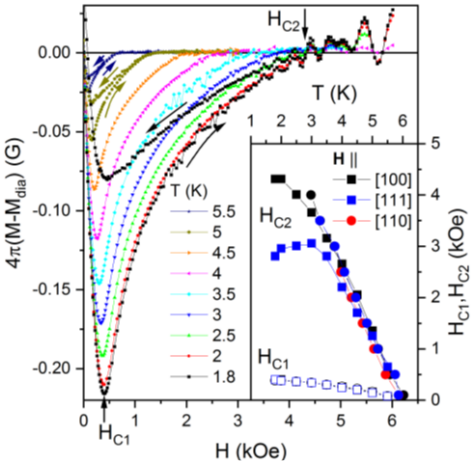



**Рис.1.** Полевые зависимости намагниченности $M(H, T_0)$. Стрелками показано направление изменения магнитного поля $H$. На вставке представлены кривые критических полей $H_{c1}$,$H_{c2}(T_c)$.

В настоящей работе выполнены исследования сопротивления, намагниченности, теплоемкости и теплопроводности восьми крупных (0.12÷1.7 г.) монокристаллических образцов, и обнаружена неполная СП (объем ~0.1%) с $T_c \approx 6$ К, отвечающая филаментарным каналам в матрице $LaB_6$. Исследования намагниченности (см., например, рис.1 и [5]) позволили определить критические поля (см. вставку на рис.1) и оценить длину когерентности $\xi$~240 Å, параметр Гинзбурга-Ландау $\kappa$~2 и константу электрон-фононного взаимодействия $\lambda_{ep}$~0.75 [5]. Выполненные нами прецизионные низкотемпературные исследования рентгеновской дифракции при $T$=30 К обнаружили трехмерные структуры динамических зарядовых страйпов в $LaB_6$. Обсуждается сценарий неоднородной сверхпроводимости в филаментарных каналах флуктуирующей электронной плотности (страйпы), пронизывающих матрицу гексаборида лантана.

## Литература

1. Matthias B. T., Geballe T. H., Andres K., et.al. // Science. – 1968. – V. 159. – P. 530.
2. Vanderberg J.M., Matthias B. T., et.al. // Mat. Res. Bull. – 1975. – V. 10. – P. 889-894.
3. Arko A. J., Grabtree G., et.al. // Int. J. Quant. Chem. Symp. – 1975. –V. 9. – P. 569-578.
4. Bat'ko I., Bat'kova M., et.al. // J. Alloys and Comp. – 1995. – V. 217. – P. L1-L3.
5. Azarevich A. N., Bogach A. V et al. // JETP Lett. – 2024. – V. 119. – P. 934-941.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.50

# ЭНЕРГИЯ УРБАХА И ПЛАЗМЕННАЯ ЧАСТОТА В МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ $TlFeS_2$ И $TlFeSe_2$

**Z.I. Badalova[1], Z.A. Jahangirli[1,2], Yu.A. Abdullayev[1], S.S. Ragimov[2,1], S.S. Osmanova[3], N.A. Abdullayev[1]**

[1] *Institute of Physics, Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaij*an

[2] *Baku State University, Baku, Azerbaijan*

[3]*Azerbaijan Technical University, Baku, Azerbaijan*

Для магнитных полупроводников характерна сильная взаимосвязь магнитных, электрических и оптических свойств, и магнитное взаимодействие осуществляется с участием электронов проводимости. Соединения $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ являются перспективными для использования в новой области электроники – спинтронике.

Ранее из эллипсометрических измерений, выполненных в диапазоне энергий 0.7-6.5 eV, нами были получены спектральные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической функции $\varepsilon$, коэффициентов экстинкции $k$ и поглощения $\alpha$, показателя преломления $n$ [1]. Воспользовавшись зависимостью коэффициента поглощения от энергии фотонов можно из соотношения $\alpha(h\nu)=\alpha_0 \exp(h\nu/E_u)$ (рис.1 a и b) получить значение энергии Урбаха ($E_u$), которая обусловлена структурными нарушениями и возможными несовершенствами: 0,38 eV ($TlFeS_2$) и 0.46 eV ($TlFeSe_2$).

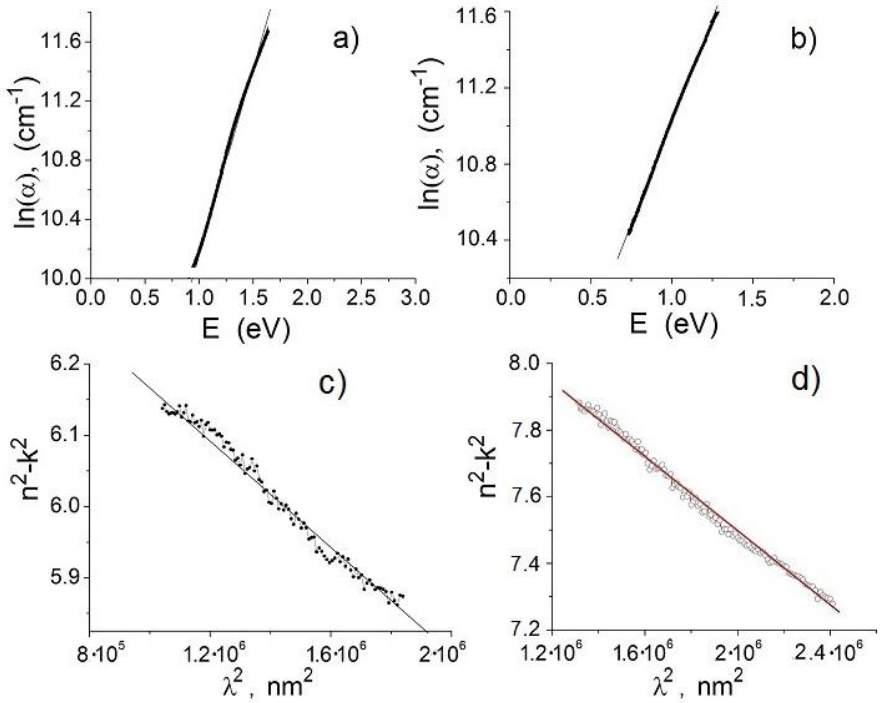



Рис. 1. Спектральные зависимости для определения энергии Урбаха ($E_u$) и плазменной частоты $\omega_p$ кристаллов $TlFeS_2$ (a, c) и $TlFeSe_2$ (b, d), соответственно.

При больших длинах волн ($n^2>>k^2$) действительная часть диэлектрической функции $\varepsilon_1=n^2-k^2$ описывается как: $\varepsilon_1=\varepsilon_\infty-\omega_p^2/\omega^2=\varepsilon_\infty-(\omega_p^2/4\pi^2c^2)\lambda^2$. Воспользовавшись этими соотношениями (рис.1 c и d) получим плазменную частоту $\omega_p$, равную $1.1\cdot10^{15}$ rad/s ($TlFeS_2$) и $1.5\cdot10^{15}$ rad/s ($TlFeSe_2$).

## Литература

1. Jahangirli Z.A., Veliyev R.G., Badalova Z.I., Seyidov R.G., Alizade E.H., Mammadov T.G., and Abdullayev N.A. // Phys. Wave Phenom. – 2023. - Vol. 3. - № 2. - P. 84-91.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.51

# Моделирование температурных зависимостей характеристик вакансий и частот скачков атомов в вольфраме

**Бобокамбарова М. А.[1], Назаров А. В.[1, 2]**
[1] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, РФ*
boboqambarovam@gmail.com
[2]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, РФ,* avn46@mail.ru

Вольфрам рассматривается как один из наиболее перспективных материалов для первой стенки термоядерных реакторов благодаря своим уникальным физическим свойствам: высокой температуре плавления, низкому выходу при распылении, высокой теплопроводности и низкому содержанию трития. Однако взаимодействие высокоэнергетичных нейтронов с материалом приводит к каскадам атомных столкновений и, как следствие, к образованию необратимых микроструктурных повреждений. Существенную роль в этих процессах играют точечные дефекты, в частности вакансии и связанные с ними атомные перемещения. Для прогнозирования изменений свойств материала необходимо знание характеристик этих дефектов, что зачастую затруднено экспериментальными методами.

В данной работе с использованием методов атомистического моделирования изучена температурная зависимость характеристик вакансий и частот атомных скачков в вольфраме. На первом этапе, с помощью модели естественного термостата [1], основанной на сочетании модифицированного метода молекулярной статики (МММС) [2] и молекулярной динамики (МД) изучено изменение атомной структуры в окрестности вакансии по мере повышения температуры. Взаимодействие между атомами рассчитывалось при этом с использованием EAM потенциала, разработанного М-С. Мариникой и др. Установлено, что начиная с 11-й координационной сферы изменение расстояния от дефекта до атомов более далеких координационных сфер, происходит пропорционально изменению параметра решетки с повышением температуры. На основе этих данных рассчитаны температурные зависимости энергии и объема образования вакансии [Рис.1].

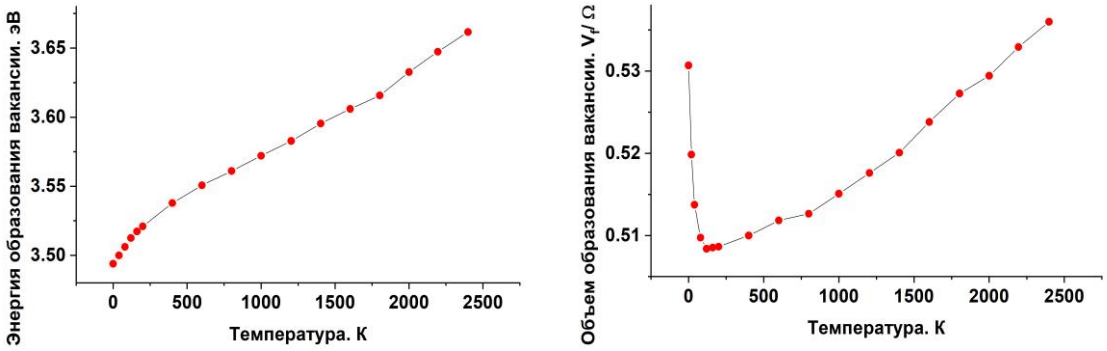



Рисунок 1. Температурная зависимость энергии и объема образовании вакансии.

На следующем этапе проводилось моделирование атомных скачков в вакансию и определена температурная зависимость коэффициента диффузии вакансии. Полученные результаты позволяют лучше понять поведение дефектов в экстремальных условиях.

## Литература

1. Boboqambarova M., Nazarov A.V. //MRS Advances. – 2022. С. – 689-694.
2. Valikova I., Nazarov A. // Phys. Met. Metallogr. – 2010. – С. 220-226.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.52

# Синтез фуллеренов $C_{60}$ и $C_{70}$

**Борисенко Д. Н.**[1]
[1] *Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН. г. Черноголовка, Россия,* bdn@issp.ac.ru

Фуллерены являются уникальным функциональным материалом для применений в электронике [1], оптике [2], машиностроении [3] и медицине [4]. Одним из ограничений роста производства является низкая эффективность способа конденсация углерода в потоке углеродно-гелиевой плазмы и высокая сложность и стоимость экстракции фуллеренов. Основными параметрами, определяющими свойства образующегося продукта и свойства электрической дуги, являются химический состав исходного материала электродов, природа и давление газа, электрический ток и напряжение, а также расстояние между электродами, при которых происходит разряд. Управление параметрами горения дуги в широких пределах позволяет получать различную структуру плазменных конденсатов: тонкодисперсную сажу, оседающую обычно на стенках реактора; нити и рыхлый конденсат на катоде, осадок на катоде в виде стержня, содержащего многостенные нанотрубки.

В работе исследовали синтез фуллеренов $C_{60}$ и $C_{70}$ в электрической дуге в атмосферах различных газов: аргона, гелия, криптона и водорода при давлениях в диапазоне 0,01-0,1 МПа. Показано более сильное влияние сил газодинамической природы [5] по сравнению с пинч-эффектом [6] на возможность получения катодного депозита и фуллерен-содержащей сажи при падающей вольт-амперной характеристике. Определены параметры электрической дуги, структура катодного депозита и возможность его получения в различных газах. Спектральный анализ проб газа после проведения опытов с использованием водорода не выявил наличие углеводородов в рабочей атмосфере реактора. Селективным осаждением на металлическую подложку под действием электрического поля высокого напряжения удалось разделить тонкодисперсную смесь фуллеренов $C_{60}$ и $C_{70}$, содержащихся в плазме дугового разряда. По результатам анализа было обнаружено, что фракционный состав смеси фуллеренов $C_{60}/C_{70}$ меняется в зависимости от величины потенциала подложки.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

## Литература

1. Марков В.Ф., Мухамедзянов Х.Н., Маскаева Л.Н. Материалы современной электроники: Уч. пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014. 272 с.
2. Лихоманова С.В., Каманина Н.В. // Письма в ЖТФ. - 2012. Т. 38. - Вып. 9. - С. 59-64.
3. Нуриахметова З.Ф., Торосян С.А., Гималова Ф.А., Мифтахов М.С. // Известия уфимского научного центра РАН. - 2019. - № 4. - С. 68-73.
4. Козлов В.С., Суясова М.В., Лебедев В.Т. // Журнал прикладной химии. - 2014. - Т. 87. - Вып. 2. - С. 137-143.
5. Янков В.В. // ЖТФ. - 1961. - Т. 31. - №11. - С.1324-1328.
6. Финкельнбург В., Меккер Г. Электрические дуги и термическая плазма / Пер. с нем. Левина В.Б. и др.; Под ред. д. ф.-м. н. Фабриканта В.А. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 370 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.53

# Компьютерное моделирование допируемости материалов для твердых электролитов в целях повышения ионной проводимости

**Чернышов Д. М.[1], Аксёнов Д. А.[2]**
[1]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия,*
*danyogi2000@gmail.com*
[1]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия, d.aksenov@skoltech.ru*

Аккумуляторы играют важную роль в современной мире. Они обеспечивают работу электротранспорта, используются в системах резервного питания, возобновляемой энергетики и портативных устройствах, делая технологии более мобильными и экологичными. Одной из наиболее перспективных технологий, способных значительно повысить энергоёмкость и безопасность аккумуляторов, являются твердотельные аккумуляторы с твердым электролитом и металлическим литием/натрием в качестве анода. Ключевым свойством твердых электролитов является высокая ионная проводимость, необходимая для достижения практически значимых скоростей заряда/разряда. Не менее важным свойством является стабильность границ раздела электролит/электрод, особенно на анодной стороне, где электролит контактирует с щелочным металлом.

Основываясь на данных фактах, нами были отобраны литий-содержащие соединения из базы данных Materials Project [1, 2], удовлетворяющие ключевым критериям: барьер перколяции менее 0.7 эВ и термодинамическая стабильность при контакте с металлическим литием. Далее полученный список соединений исследовался на возможность допирования данных соединений с образованием алиовалентных замещений в целях улучшения ионной проводимости за счет увеличения концентрации носителей заряда - вакансий щелочных металлов.

На основе правил Гольдшмита были определены потенциальные допанты для отобранных соединений. Критерии отбора включали: совместимость ионных радиусов (отклонение ≤25%), близкую электроотрицательность ($\Delta\chi \leq 0.4$ по Поллингу), валентность допанта на единицу выше, чем у замещаемого катиона в матрице.

Для моделирования эффекта допирования были построены суперячейки с алиовалентным замещением с образованием вакансии Li. Методами DFT вычислены энергии образования данных дефектов, а также вычислена конфигурационная энтропия и равновесная концентрация в приближении слабого раствора для разных температурных значений. Также была вычислена энергия связи комплекса допант-вакансия.

*Работа выполнена при поддержке РНФ, грант No 24-73-10204*

## Литература

1. Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G. et al. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. APL Materials 1, 011002 (2013).
2. Dembitskiy, A., Humonen, I., Eremin R., Aksyonov D., Fedotov S., Budennyy S., Benchmarking machine learning models for predicting lithium ion migration. NPJ computational materials, https://doi.org/10.1038/s41524-025-01571-z

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.54

# Распределение примесей переходных металлов в кристаллах $A^{II}B^{VI}$ при росте из расплава

**Денисенко Д.С.[1], Колесников Н.Н.[1]**
*[1]ИФТТ РАН, 142432, Черноголовка, РФ, dmitryavenicci@gmail.com*

Кристаллы $A^{II}B^{VI}$, легированные переходными металлами, продолжают активно изучаться. В том числе, как активные среды для лазеров ближнего и среднего ИК диапазона, благодаря высокой эффективности и настраиваемости параметров излучения [1] и перспективе масштабируемого получения методами роста из расплава. Ключевой проблемой роста из расплава остаётся неравномерное распределение легирующей добавки по длине кристалла [2].

В настоящей работе представлены результаты исследования распределения ионов $Fe^{2+}$ и $Cr^{2+}$ в кристаллах ZnSe, CdSe и ZnS, выращенных методом вертикальной зонной плавки под давлением аргона. Особое внимание уделено сравнению поведения примесей в разных матрицах, а также зависимости коэффициента распределения от исходной концентрации.

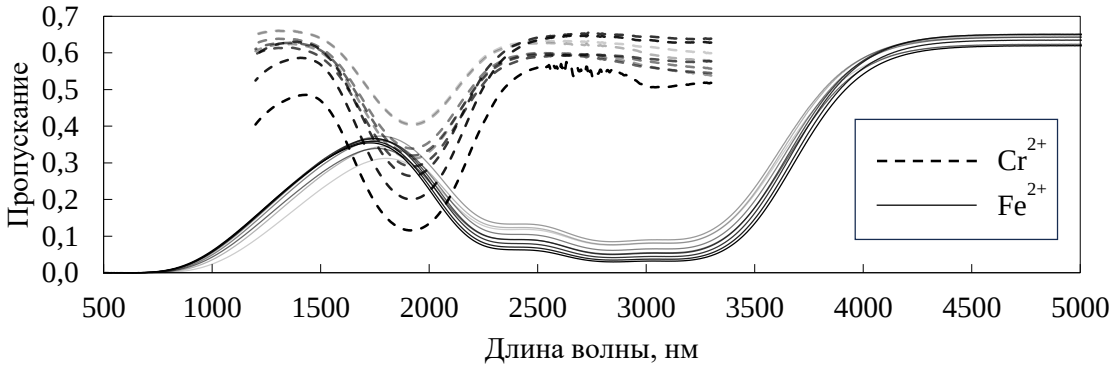



Рис.1. Спектры пропускания образцов CdSe легированных $Fe^{2+}$ и $Cr^{2+}$

Анализ выполнен на основе оптической спектроскопии в видимой и ИК-областях. Полученные данные позволили определить характер распределения примесей и выявить отличия между различными системами [3].

Результаты позволяют глубже понять механизмы легирования при росте из расплава и в дальнейшем могут быть использованы для оптимизации условий роста кристаллов с заданными оптическими свойствами.

## Литература

1. V. Levchenko, V. Yakimovich, L. Postnova, V. Konstantinov, V. Mikhailov, N. Kuleshov, Preparation and properties of bulk ZnSe:Cr single crystals, Journal of Crystal Growth 198-199 (1999) 980–983.
2. N. N. Kolesnikov, R. B. James, N. S. Berzigiarova, M. P. Kulakov, HPVB- and HPVZM-shaped growth of CdZnTe, CdSe, and ZnSe crystals, in: R. B. James, L. A. Franks, A. Burger, E. M. Westbrook, R. D. Durst, E. M. Westbrook, R. D. Durst (Eds.), X-Ray and Gamma-Ray Detectors and Applications IV, Vol. 4784, International Society for Optics and Photonics, SPIE, 2003, pp. 93 – 104.
3. D. Denisenko, A. Timonina, T. Fursova, N. Kolesnikov, $Cr^{2+}$ distribution in ZnSe crystals grown from melt, Journal of Crystal Growth 603 (2023) 127037.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.55

# Топологические переходы в физике конденсированного состояния на примере жидких кристаллов и кристаллических жидкостей

**Долганов П. В.**
*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия*, pauldol@issp.ac.ru

Связь топологии с физикой в последние годы является одним из наиболее актуальных и активно развивающихся направлений фундаментальных исследований конденсированного состояния [1,2]. В конденсированных средах со спонтанным нарушением симметрии существуют топологические дефекты, представляющие собой сингулярности в поле параметра порядка. Переходы, связанные с изменением топологии, могут приводить к кардинальной трансформации физических свойств системы.

В докладе приводятся экспериментальные данные о топологических дефектах различного типа, их характеристиках, роли топологических дефектов в фазовых переходах, процессах самоорганизации в анизотропных средах [3,4]. Экспериментальные данные получены для систем с ориентационным упорядочением, жидких кристаллов, кристаллических жидкостей, образованных пространственно упорядоченными топологическими дефектами. Приведены результаты по структурам с пониженной размерностью из топологических дефектов, коллективному поведению дефектов с аннигиляцией пар дефект-антидефект, эффектам, связанным с фрустрацией и ограниченной геометрией. Обсуждаются аналогии рассматриваемых систем с топологическими переходами в других системах физики конденсированного состояния.

Исследование поддержано грантом РНФ 23-12-00200.

## Литература

1. Kosterlitz J.M. // Rev. Mod. Phys. – 2017. – V. 89. – No. 4. – P. 040501.
2. Selinger J.V. Introduction to Topological Defects and Solitons in Liquid Crystals, Magnets, and Related Materials. // Springer Nature Switzerland, 2024.
3. Dolganov P.V., Cluzeau P., Dolganov V.K. // Liquid Crystals Reviews. – 2019. – V. 7. – No. 1. – P. 1-29.
4. Dolganov P.V. Spiridenko N.A., Dolganov V.K. // Phys. Rev. E. – 2024. – V. 110. – No. 2. – P. 024703.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.56

# Фотоиндуцированные трансформации фотонной структуры Голубых фаз жидких кристаллов

**Долганов П. В.[1], Максимов Е. А.[1], Баленко Н. В.[2]**
[1]*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия,* pauldol@issp.ac.ru
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия,* balenko.nik.msu@gmail.com

Голубые фазы (кристаллические жидкости) являются трехмерными жидкокристаллическими фотонными кристаллами с кубической структурой [1]. Одной из их уникальных особенностей является наличие пространственно упорядоченных топологических дефектов в элементарной ячейке. Эти фазы могут также рассматриваться как трехмерные структуры, образованные скирмионами [2]. Благодаря своим уникальным оптическим свойствам и восприимчивости к внешним воздействиям, Голубые фазы являются перспективными материалами для фотонных приложений.

В последние годы значительный интерес вызывает возможность управления фотонными характеристиками жидкокристаллических структур с помощью светового воздействия. Такие исследования нами проведены на смеси нехирального нематического жидкого кристалла, хиральной добавки CB15 и хирального фоточувствительного соединения MeAzoSorb [3]. Эти смеси образуют Голубую фазу BPI с объёмно-центрированной кубической структурой и Голубую фазу BPII с простой кубической структурой. Поведение хиральных фаз было изучено в плоских оптических ячейках с нанесенным на внутренние поверхности ориентирующим покрытием. Спектральные характеристики образцов исследованы с использованием ПЗС-спектрометра Avantes. Трансформация фотонных характеристик была реализована при освещении лазерными диодами. При воздействии светом ультрафиолетового диапазона (365 нм) молекулы MeAzoSorb претерпевают *транс-цис* конфигурационный переход, приводящий к уменьшению их закручивающей способности и к увеличению параметра элементарной ячейки. В свою очередь, освещение светом видимого диапазона (455 нм) инициирует обратный переход. Изменение параметра решетки приводит к смещению длин волн полос селективного отражения света. Кроме того, реализованы переходы между жидкокристаллическими фазами при освещении со скачкообразным изменением фотонных характеристик. Полученные результаты указывают на значительный потенциал хиральных фаз фоточувствительных жидких кристаллов для создания светоуправляемых фотонных устройств.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания ИФТТ РАН и Государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер АААА-А21-121011990022-4 (“Современные проблемы химии и физико-химии высокомолекулярных соединений”).

## Литература

1. Wright D.C., Mermin N.D. // Rev. Mod. Phys. – 1989. – V. 61. – P. 385.
2. Selinger J.V. Introduction to Topological Defects and Solitons in Liquid Crystals, Magnets, and Related Materials. // Springer Nature Switzerland, 2024.
3. Bobrovsky A., Ryabchun A., Cigl M., Hamplová V., Kašpar M., Hampl F., Shibaev V. // J. Mater. Chem. C. – 2014. – V. 2. – P. 8622.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.57

# Размещение молекулярного водорода в микро- и наносферах диоксида кремния

**В.С. Ефимченко[1)], М.А. Короткова[1)], К.П. Мелетов[1)], Н.С. Сухинина[1)], В.М. Масалов[1)], Г.А. Емельченко[1]**

[1] *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия,* efimchen@issp.ac.ru

Насыщенные водородом или его изотопами полые силикатные сферы, с внешним диаметром от 5 мкм до 2 мм, ранее предлагались в качестве одного из возможных способов хранения водорода, а также как топливные мишени в управляемом инерционном термоядерном синтезе. Основным препятствием для использования является невозможность достижения максимальной концентрации водорода в их полости из-за полного или частичное разрушения оболочки при воздействии давления в несколько десятков МПа [1].

В данной работе нами было проведено насыщение водородом опаловых матриц двух типов: состоящих из наносфер (диаметр 289 нм, толщина оболочки 25 нм) и из микросфер (диаметр 1020 нм, толщина оболочки 95 нм). Образцы насыщались водородом в камерах большого объема типа «Тороид» и «Чечевица» при давлениях 7.5 и 2.8 ГПа и температуре 413 К, с последующей закалкой до температуры 77 К и снижением давления до атмосферного.

После насыщения водородом при давлении 7.5 ГПа и температуре 413 К наносферы содержали X = 0.94 молей $H_2$ на моль $SiO_2$. Эта величина является максимальной растворимостью водорода в силикатах, достигнутой на сегодняшний день. После хранения в жидком азоте при нормальном давлении содержание водорода в образце в течение трех дней снизилось до X = 0.8 и в дальнейшем не изменялось. Сканирующая электронная микроскопия показала, что гидрирование при давлении 7.5 ГПа не изменило форму наносфер. Согласно данным Рамановской спектроскопии, молекулы водорода находились в виде газа в полостях сфер $SiO_2$ и образовывали твердый раствор в их оболочках. Оцененная по интенсивности вибронной моды $H_2$, плотность газообразного водорода внутри полостей $\rho$=0.016 г/см$^3$ в 52 раза больше его плотности при температуре 77 К и нормальном давлении.

Микросферы продемонстрировали столь же высокие сорбционные свойства, как и наносферы, несмотря на гидрирование при гораздо меньшем давлении 2.8 ГПа и значительную деформацию оболочек. Полученное в них значение растворимости водорода X=0.89, гораздо больше растворимости водорода X=0.30 полученное ранее в аморфном $SiO_2$ при этом же давлении [2]. Оценка плотности газообразного водорода в микросферах дала величину $\rho$=0.036 г/см$^3$, что более чем два раза больше плотности газообразного водорода в полостях наносфер.

Таким образом, данное исследование демонстрирует, что гидрирование при давлениях до 7.5 ГПа микронных и субмикронных полых сфер $SiO_2$ не приводит к их разрушению и позволяет достичь максимальной концентрации водорода в их полостях и оболочке.

## Литература

1. Duret B, Saudin A. // Int. J. Hydrogen. Energy. – 1994. – Т. 19. – С. 757-764.
2. Efimchenko V.S, Fedotov V.K, Kuzovnikov M.A, Zhuravlev A.S, Bulychev B.M.// J. Phys. Chem. B – 2013. – Т. 117. – С. 422-425.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.58

# Взаимосвязь напряжённого состояния аморфных микропроводов на основе Fe и их магнитной проницаемости, определяемой из измерений импеданса

**Фукс А.А.[1,2], Аксенов О.И.[2], Аронин А.С.[2]**

[1]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, Россия,* artemfux@yandex.ru

[2]*Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия*

С момента первых сообщений об обнаружении эффекта гигантского магнитоимпеданса (ГМИ) в аморфных микропроводах в конце 1994 года [1] основные усилия были направлены на изучение зависимости магнитной проницаемости магнитомягких материалов от магнитного поля и частоты пропускаемого тока. Эффект ГМИ в аморфных микропроводах – это изменение импеданса микропровода под действием статического магнитного поля. Зависимость проницаемости (в случае цилиндрического микропровода важна циркулярная компонента проницаемости) от внешнего поля изменяет глубину проникновения (скин-слоя) и, следовательно, изменяет поверхностный импеданс. Было показано, что эксперимент по измерению эффекта ГМИ аналогичен эксперименту по исследованию ферромагнитного резонанса (ФМР) [2. На высоких частотах ($f \geq 10$ МГц) и полях пик поглощенной мощности наблюдается в действительной части импеданса (амплитуда которой увеличивается с увеличением поля), в то время как мнимая часть пересекает ноль при резонансе [3]. С ростом частоты магнитная проницаемость ведёт себя аналогичным образом. При измерении частотных зависимостей импеданса $Z(\omega) = R + iX$, где $\omega = 2\pi f$– циклическая частота, из активной $R(\omega)$ и реактивной $X(\omega)$ компонент $Z(\omega)$ можно рассчитать действительную и мнимую части циркулярной компоненты магнитной проницаемости [4]:

$$\mu'_\phi = \frac{4\pi}{l}\left[\frac{\partial X}{\partial \omega} - \frac{X}{\omega} + \frac{2RX}{\omega R_{dc}}\right], \mu''_\phi = \frac{4\pi}{l}\left[\frac{\partial R}{\partial \omega} - \frac{R}{\omega} + \frac{R^2 - X^2}{\omega R_{dc}}\right].$$

Зависимость положения резонанса магнитной проницаемости от внешнего магнитного поля позволяет определить электронное гиромагнитное отношение и магнитный момент насыщения [5]. При измерениях импеданса использовались микропровода состава $Fe_{70}Si_{18}B_9Cu_1Nb_2$ с различным отношением *d/D* диаметра металлической сердцевины к полному диаметру микропровода, включая стеклянную оболочку. Таким образом, возможно проследить взаимосвязь указанных характеристик с напряженным состоянием аморфного микропровода, чему и посвящена данная работа.

## Литература

1. Panina L.V., Mohri K., Bushida K., Noda M. // J. Appl. Phys. – 1994. – V. 76. – № 10. – P. 6198-6203.
2. Yelon A., Ménard D., Britel M., Ciureanu P. // Appl. Phys. Lett. – 1996. – V. 69. – № 20. – P. 3084-3085.
3. Ménard D., Britel M., Ciureanu P., et. al // J. Appl. Phys. – 1997. – V. 81. – № 8. – P. 4032-4034.
4. Sossmeier K.D., Callegari G.L., Dorneles L.S., Carara M. // J. Magn. Magn. Mat. – 2008. – V. 320. – № 14. – P. e1-e3.
5. Britel M., Ménard D., Melo Y.G., et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77. – № 17. – P. 2737-2739.

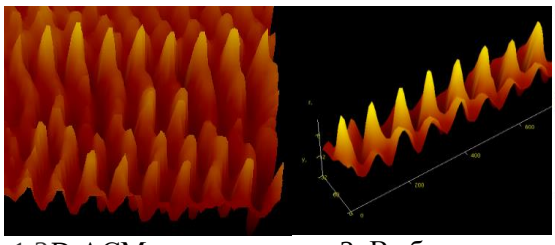
DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.59

# *1D* структуры топологического изолятора $Bi_2Te_3$<*Fe*>

**Кахраманов С.Ш., Абдуллаев Ю.А., Оруджова Х.В., Гасанова Р, Абдуллаев Н.А.**

*Институт физики МНО Азербайджана, Баку, пр. Г.Джавида, 131*
*e-mail: samir.gahramanov@gmail.com*

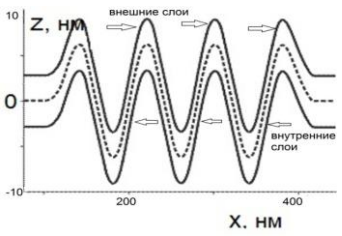
В топологических изоляторах (ТИ) контакт с магнитными материалами, в данном случае с железом, нарушает симметрию обращения времени и открывает поверхностную щель, что имеет практическое применение в виде использования спинового тока квантового аномального эффекта Холла в магнитных ТИ. Исследование распределения магнитных примесей в матрице слоистых кристаллов $Bi_2Te_3$<*Fe*>; влияния температурной волны и градиента на поведение фронта кристаллизации выявили условия формирования различных складок, гофрированных и островковых структур. Были созданы контролируемые структуры складок, которые уменьшают теплопроводность кристалла, увеличивая термоэлектрическую добротность материала, а также могут использоваться как проводящие каналы в ТИ. Соединение $Bi_2Te_3$<*Fe*> получали методом вертикальной направленной кристаллизации при $950^0$К и градиенте температуры $\Delta T=100^0$ и скорости кристаллизации менее 1см/час. Полученные данные показывают, что атомы *Fe* располагаются не только в матрице кристалла, но и в ван-дер-ваальсовой щели. Рентген-дифрактометрические исследования показали наличие на поверхности скола как свободного, так и химически связанного железа *FeTe*. Поверхность (0001) $Bi_2Te_3$<*Fe*> составлена из ряда видов наноостровков, их высоты колеблются в пределах 3-7 нм.



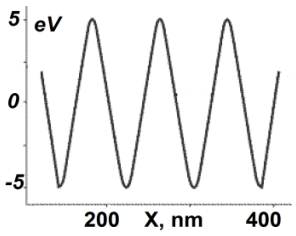
1.3*D*-АСМ поверхности $Bi_2Te_3$<*Fe*>



2. Выбранная область




3.Поперечное сечение выбранной области




4.Рельеф периодического потенциала

Известно, что энергия поверхностного состояния на гребнях полос смещается выше на ~10мэВ, по сравнению с таковыми во впадинах полос. Периодические выпуклости, представленные полосами, приводят к плавно изменяющемуся периодическому потенциалу, который ответственен за захват носителей в одномерные потенциальные ямы и смещению зон объемного и поверхностного состояний. Эти структуры интересны как практическая реализация *1D*-квантовой нити. В гофрированных структурах упругие деформации вызывают сдвиги краев зон и приводят к появлению системы потенциальных ям. При периодах гофрировки меньше 100 нм электронные состояния локализованы в отдельных ямах. При уменьшении периода наноструктура может рассматриваться как система туннельно связанных квантовых точек. Длина волны складки и ее высота в очень малом диапазоне коррелируют с температурой фронта кристаллизации. Термоэлектрические параметры в купе с механической прочностью имели пик в середине процентного состава примеси *Fe*, увеличение ее количества приводило к резкому снижению обоих параметров. Лучшие показатели термоэлектрической добротности наиболее эффективных образцов имели место за счет 12% снижения теплопроводности, из-за рассеяния фононов на границах наночастиц, и увеличения межслоевого расстояния дефектных полостей.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.60

# Широкополосный диэлектрический отклик и структурные особенности лабораторных аналогов межзвездных и околозвездных льдов

**А. А. Гавдуш[1], B. M. Giuliano[3], К И. Зайцев[1], М. К. Матвейшина[2], B. Müller[3], F. Kruczkiewicz[3], Г. А. Командин[1], А. В. Ивлев[3], P. Caselli[3]**

[1]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Россия, Москва 119991, ул. Вавилова, д. 38*

[2]*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Россия, Москва, 105005, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1*

[3]*Институт внеземной физики общества Макса Планка, Германия, Гархинг, 85748*

*E-mail: arsenii.a.gavdush@gmail.com

Решение многих задач современной астрофизики требует знаний о физических свойствах межзвездных и околозвездных льдов. К этим задачам можно отнести как вопросы больших масштабов – эволюцию газопылевых облаков и возникновение звездных систем, так и более локальные задачи, связанные с механизмами образования новых молекулярных соединений в космосе и их распространенностью. Большая часть межзвездного вещества во вселенной представлена льдами разнообразного молекулярного состава [1], в том числе и органическими соединениями. Лед образует мантии на поверхности пылевых частиц, есть на поверхности спутников и астероидов, в составе комет. Без знания диэлектрических свойств льдов в различных диапазонах электромагнитного спектра невозможно идентифицировать вещества при анализе астрономических данных, а рассеивающие свойства и структурные особенности льдов необходимо учитывать при моделировании процессов переноса излучения в газопылевых облаках. Возможность детектирования собственного излучения астрономических объектов в терагерцовом (ТГц) и дальнем инфракрасном (ИК) диапазонах электромагнитного спектра привели к созданию новых исследовательских инструментов и появлению соответствующих экспериментальных данных. Проведение лабораторной спектроскопии аналогов льдов в ТГц и ИК диапазонах, а также создание методов для анализа полученных результатов – важная задача, подходы к решению которой рассматриваются в работах научной группы [2, 3].

В представленном исследовании создан экспериментальный стенд для спектроскопии лабораторных аналогов межзвездных и околозвездных льдов в ТГц и ИК диапазоне. Для обработки экспериментальных данных созданы и адаптированы методы, характерные для ТГц импульсной спектроскопии и ИК-фурье спектроскопии, получен диэлектрический отклик ряда астрофизически значимых льдов (CO, $CO_2$, $N_2$, $H_2O$). Результаты спектроскопии интерпретированы с использованием классических моделей комплексной диэлектрической проницаемости. Исследовано рассеяние излучения и связанные с ним структурные особенности льдов. Предложенные подходы к исследованию лабораторных аналогов межзвездных и околозвездных льдов востребованы и обладают широкими перспективами применения в лабораторной астрофизике.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект № 25–79–30006.

*[1] A. C. A. Boogert et al., Ann. Rev. of A&A 53, 541-581 (2015).*
*[2] B.M. Giuliano et al., A&A, 629 A112 (2019).*
*[3] A.A. Gavdush et al., A&A, 667 A49 (2022).*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.61

# Изучение квантово-стохастического соответствия на примере спиновой системы

**Глазкова Е.В.[1], Сеидов С.С.[1,2]**
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, Россия, eglazkowa@ya.ru*
[2]*НИУ ВШЭ, Москва, Россия, alikseidov@yandex.ru*

В работе была изучена стохастическая интерпретация квантовой механики [1]. Суть квантово-стохастического соответствия заключается в представлении квантовой динамики, как немарковского стохастического процесса. Используя оператор эволюции, представляется возможным составить унистохастическую матрицу переходов немарковских процессов

$$\Gamma_{ij} = U_{ij}^2 \equiv p(i,t|j,0), \quad (1)$$

каждый элемент которой описывает вероятность перехода из одного состояния в другое. Здесь $U = e^{-iHt}$ – оператор эволюции; $p(i,t|j,0)$ – вероятность нахождения системы в $i$-й конфигурации в момент времени $t$, учитывая, что система находится в начальный момент времени 0 в $j$-й конфигурации. Такая интерпретация позволяет потенциально решить проблему квантовых измерений, избегая традиционных парадоксов: коллапс волновой функции, проблема наблюдателя и т. д.

Стохастическая интерпретация квантовой механики изучалась на примере системы, состоящей из одиночного спина, соединенного с цепочкой спинов. Её гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \omega_0 \sigma_z + \sum_{i=1}^{N} \left(\omega \sigma_z^i + \Delta \sigma_x^i\right) + \gamma \sigma_z \sum_{i=1}^{N} \sigma_z^i + \lambda \sum_{i,j} \sigma_z^i \sigma_z^j . \quad (2)$$

Была найдена стохастическая матрица $\Gamma$ и проведена симуляция соответствующего немарковского стохастического процесса. В результате получена зависящая от времени матрица плотности и построена зависимость от времени $\langle \sigma_z \rangle$ – средней проекции спина на ось $z$.

## Литература

1. J.A. Barandes The Stochastic-Quantum Correspondence, https://arxiv.org/abs/2302.10778 (2023).

Работа выполнена в рамках гранта № К1-2022-027 по теме «Цифровые двойники для квантовых технологий: Управление сложными системами для задач квантовых технологий и поиска новых материалов», стратегического проекта Квантовый интернет.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.62

# Мультитерминальные джозефсоновские SNS структуры в условиях неравновесной квазичастичной инжекции.

**Голикова Т. Е.[1], Нажесткин И. А.[2], Егоров С.В.[1], Батов И.Е.[1], Рязанов В.В.[1,2]**
[1]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,* golt2@list.ru
[2] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, Россия*

Изготовлены и исследованы мультитерминальные джозефсоновские наноструктуры SNS типа на основе Al (S) и Cu (N) с разными схемами инжекции неравновесных квазичастиц. В первом случае исследования проводились на структурах, где инжекция казичастиц осуществлялась в один из сверхпроводящих берегов джозефсоновского контакта [1,2], а N-инжекторы были расположены на расстояниях порядка нескольких $\xi_S$ (длина когерентности в S) в отличие от наших предыдущих работ, как показано на Рис. 1. В работе были исследованы два варианта инжекции на одной мультитерминальной структуре: из левого N-электрода, расположенного на расстоянии порядка $\xi_S$=200 нм от SNS контакта, и из правого N-электрода, расположенного на расстоянии приблизительно 2.5 $\xi_S$. В первом варианте экспериментально был обнаружен переход из 0 в π состояние при токе инжекции 26 μA. При этом в обоих случаях наблюдалось общее подавление критического сверхпроводящего тока $I_c$ с ростом $I_{inj}$. Также для уточнения экспериментальных результатов были изготовлены SNS структуры в виде креста по аналогии с пионерскими работами по этой тематике [3,4,5], где пропускание инжекционного тока осуществлялось уже непосредственно в слабую связь джозефсоновского контакта. В работе приводится качественное сравнение исследуемых способов инжекции.

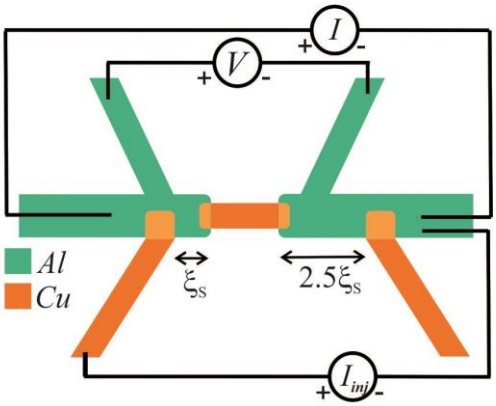



Рис. 1 Схематическое изображение исследуемой SNS структуры и схема подключения инжекционного тока.

## Литература

1. Golikova T.E., Wolf M.J., Beckmann D. et al // Phys. Rev. B – 2014. V 89. 104507
2. Лакунов И.С., Егоров С.В., Муханова и др. // Письма в ЖЭТФ. – 2023. – Т. 118. – № 9. – С. 656-663.
3. Baselmans J.J.A., Morpurgo A.F., van Wees B.J., and Klapwijk T.M. // Nature (London). - 1999. V. 397. 43.
4. Crosser M.S., Virtanen P., Heikkila T.T., and Birge N.O.// Phys. Rev. Lett. - 2006. V. 96. 167004
5. Morpurgo A.F., Klapwijk T.M., and van Wees B.J. // Appl. Phys. Lett. - 1998 V. 72, 966

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.63

# СВЯЗЬ МЕЖДУ РЕЛАКСАЦИЕЙ ДЕФЕКТНОЙ ПОДСИСТЕМЫ И МОДУЛЕМ СДВИГА В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

**Гончарова Е. В., Макаров А. С., Кончаков Р. А., Хоник В. А.**

*Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж, Россия,*
goncharova.evg@mail.ru

Около десяти лет назад было обнаружено, что высокоэнтропийные сплавы (сплавы с энтропией смешения равной $S_{mix} \geq 1.5R$, где $R$ - универсальная газовая постоянная) могут затвердевать в некристаллическом состоянии, образуя высокоэнтропийные металлические стекла (ВЭМС) [1]. Было высказано предположение, что ВЭМС сочетают в себе свойства как металлических стекол, так и высокоэнтропийных кристаллических сплавов [2]. Поэтому важно иметь понимание их фундаментальных физических свойств.

Металлические стекла склонны к спонтанным термоактивированным изменениям своих свойств, называемым структурной релаксацией. Это явление часто интерпретируется как результат изменений в системе дефектов – локальных областей с низкой точечной симметрией [3]. Эти дефекты рассматриваются с самых разных точек зрения (например, [3]), и структурная релаксация чаще всего интерпретируется в терминах изменения их концентрации.

Связь между системой дефектов, модулями сдвига стекла и его материнским кристаллом можно интерпретировать в рамках Межузельной теории (МТ), которая обеспечивает количественное понимание различных явлений релаксации в металлических стеклах (обзор МТ и ее интерпретация экспериментальных данных дан в работе [4]).

В настоящей работе проверяются предсказания МТ в отношении связи концентрации дефектов с модулями сдвига стекла и материнского кристалла, а также справедливость основного уравнения МТ [4]. С этой целью проведены измерения высокочастотного модуля сдвига и калориметрические измерения на трёх высокоэнтропийных металлических стеклах ($Zr_{31.6}Cu_{37.8}Hf_{13.4}Al_{8.7}Ag_{8.4}$, $Zr_{31}Ti_{27}Be_{26}Cu_{10}Ni_6$ и $(Ti_{37.31}Zr_{22.75}Be_{26.39}Al_{4.59}Cu_9)_{94}Co_6$) в исходном, релаксированном и кристаллическом состояниях. В рамках МТ показано, что модуль сдвига ВЭМС неразрывно связан с концентрацией дефектов, ответственных за структурную релаксацию. При отсутствии структурной релаксации температурный коэффициент модуля сдвига стекла равен температурному коэффициенту модулю сдвига материнского кристалла.

## Литература

1. Takeuchi A., Chen N., Wada T., Yokoyama Y., Kato H., Inoue A., Yeh J.W. // Intermetallics. – 2021. – Vol.19. – PP.1546-1554.
2. Chen Yu, Dai Z.-W., Jiang J.-Z. // Journal of Alloys and Compounds. - 2021. – Vol.866. – P. 158852.
3. Cheng Y.Q., Ma E. // Progress in Materials Science. – 2011. – Vol.56. – PP. 379-473.
4. Kobelev N.P., Khonik V.A. // Physics–Uspekhi. – 2023. - Vol.66. - PP. 673-690.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.64

# Фазовые превращения в сплавах АМг6М, 1163АМ И В95, вызванные термообработкой материалов

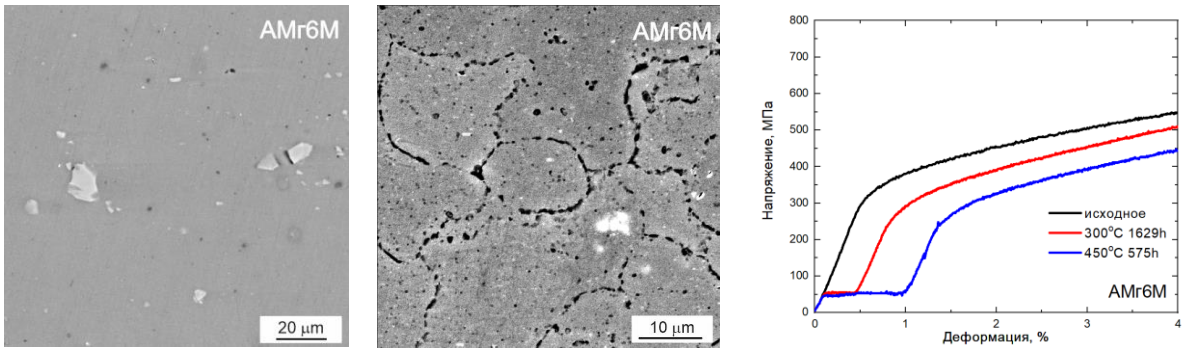
**Горнакова А.С., Хорошева М.А., Страумал Б.Б., Храпова Н.Н., Давдян Г.С., Дружинин А.В., Афоникова Н.С.**

*ИФТТ РАН, Россия, г. Черноголовка,* alenahas@issp.ac.ru

В работе исследовалось влияние термообработки на образование и долю интерметаллидных фаз в промышленных сплавах на основе алюминия.

Были исследованы три промышленных сплава Al-6вес.%Mg (АМг6М), Al-2.6вес.%Mg-1.6вес.%Cu-6.3вес.%Zn (В95) и Al-1.5вес.%Mg-4.2вес.%Cu (1163АМ), в состоянии после прокатки до толщины 2 мм. Листы сплавов были нарезаны на полосы и отжигались в печах на воздухе при температурах 300 и 450°С, в течение 1629 и 575 часов, соответственно. Микроструктура сплавов была исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) (Рис. 1а,б). Фазовый состав, объемные доли фаз и параметры решеток были рассчитаны из спектров, полученных на дифрактометре Rigaku SmartLab при излучении $CuK_{\alpha 1+\alpha 2}$ с длиной волны 0.15419 нм.

Микротвердость образцов была измерена с помощью прибора ITV1-AM. Средние значения микротвердости были основаны на измерениях 10 отпечатков индентора при нагрузке 100 г. Испытания на трехточечный изгиб проводились на испытательной машине для конструкционных материалов UTS 111.2-50 при комнатной температуре. Образцы для испытаний на трехточечный изгиб имели размеры 10/2/0.9 мм (длина/ширина/толщина), по три образца на каждый вид обработки (Рис. в).




а б в

Рисунок 1 – СЭМ изображения поверхности сплава АМг6М (а) после полировки и (б) после химического травления. Зависимости напряжения от деформации для трех исследованных состояний сплава АМг6М (в).

В работе было показано, что термообработка влияет на образование фаз, на их сочетание и долю. А также на механические характеристики, такие как: значение модуля упругости при изгибе, условный предел текучести и предел прочности. Значения микротвердости сплава АМг6М не изменяются в трех изученных состояниях, в то время сплавы В95 и 1163АМ демонстрируют повышение твердости при температуре обработки 450°С.

Работа выполнена при поддержке:
соглашение № 075-15-2024-652, грант № 13.2251.21.0252

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.65

# Биосовместимость и механические свойства сплавов Ti-Mo

**Горнакова А.С. [1], Корнева А.В. [2], Новрузов К.М. [3], Шайсултанов Д.Г. [4], Афоникова Н.С. [1], Анисимова Н.Ю. [3], Страумал Б.Б. [1], Тюрин А.И. [5], Давдян Г.С. [1]**

*[1]ИФТТ РАН, Россия, Черноголовка*
*[2]ИММ им. А. Крупковского ПАН, Польша, Краков*
*[3]НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина РАМН, Россия, Москва*
*[4]НИУ «БелГУ», Россия, Белгород*
*[5]НИИ «Нанотехнологии и Наноматериалов», Россия, Тамбов*
alenahas@issp.ac.ru

Сплавы на основе титана стали одними из наиболее привлекательных материалов для имплантатов благодаря их небольшому весу, высокой стойкости к биокоррозии, биосовместимости и механическим свойствам, в том числе низкий модуль упругости.

Были проведены исследования двух сплавов на основе титана: Ti-10вес.%Mo и Ti-15вес.%Mo. Образцы сплавов были исследованы в трех состояниях: в исходном (после изготовления), после отжига при 1000°C и после кручения под высоким давлением (КВД). Была исследована микроструктура сплавов с помощью сканирующий электронной микроскопии (СЭМ) и был проведен рентгенофазовый анализ образцов (РФА). Были получены данные по биосовместимости (Рис. 1а) и цитотоксичности, а также измерены значения микротвердости, значения модуля Юнга (Рис. 1б) и нанотвердости сплавов, полученные при наноиндентирование. Была проведена оценка влияние доли второй компоненты, а также влияние вида обработки на биосовместимость и цитотоксичность материалов.

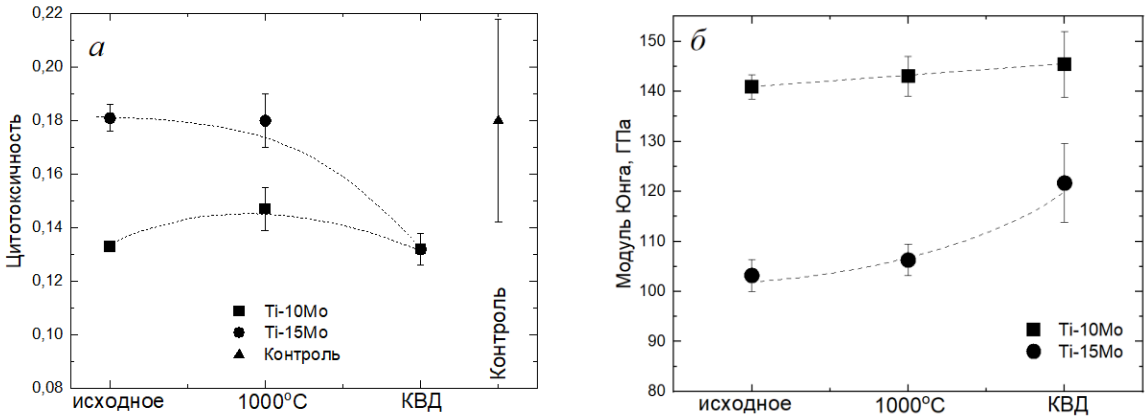



Рисунок 1 - Зависимости цитотоксичности и модуля Юнга сплавов Ti–10Mo (квадраты) и Ti–15Mo (круги) от вида обработки: исходное состояние, после отжига 1000°C и после КВД обработки.

Наши исследования показали, что наилучшая клеточная адгезия и цитотоксичность, а также низкие значения нанотвердости (4,4 ГПа) и модуля Юнга (106 ГПа) наблюдаются у отожжённого образца сплава Ti-15вес.%Mo.

«Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда
№ 24-22-00222, https://rscf.ru/project/24-22-00222/»

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.66

# Новый механизм отрицательного магнитосопротивления в антиферромагнитных металлах из-за обменного расщепления

**П.Д. Григорьев[1], Н.С. Павлов[2], И.А. Некрасов[2], И.Р. Шеин[3], А.В. Садаков[4], О.А. Соболевский[4], Е. Мальцев[5], В. М. Пудалов[4]**

[1]*Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН, Черноголовка, Россия,* grigorev@itp.ac.ru
[2]*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия,* pavlovns@gmail.com
[3]*Институт химии твёрдого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия,*
[4]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Россия,*
[5]*Leibniz Institute for Solid State and Materials Research, Dresden, Germany*

Слоистые топологически нетривиальные и тривиальные полуметаллы с антиферромагнитным (АФМ) упорядочением магнитной подрешетки обладают отрицательным магнитосопротивлением, которое хорошо коррелирует с изменением АФМ намагниченности в магнитном поле. Об этом эффекте сообщалось в ряде экспериментальных исследований с $EuFe_2As_2$ [1], $EuSn_2As_2$ [2], $EuSn_2P_2$ [3], $EuIn_2As_2$ [4] и др., где сопротивление квадратично уменьшается с увеличением поля на величину около 4−6% вплоть до поля спин-флип. Несмотря на то, что этот эффект хорошо документирован экспериментально, его теоретическое объяснение до сих пор отсутствует. Мы предлагаем [5] новый теоретический механизм, описывающий наблюдаемое магнитосопротивление и не предполагающий ни его топологического происхождения, ни шероховатости поверхности, ни их потенциальной дефектной структуры, ни электрон-магнонного рассеяния. Этот новый механизм связан с нарушением симметрии между АФМ подрешетками и соответствующим изменением координатной зависимости волновых функций электронов проводимости для спиновых подзон, которая сжимает волновые функции и усиливает рассеяние электронов на точечных дефектах. Проведенные численные расчеты методом функционала плотности подтверждают это сжатие. Предложенный механизм магнитосопротивления применим к широкому классу слоистых АФМ-упорядоченных полуметаллов. Мы также провели детальное экспериментальное исследование этого эффекта в $EuSn_2As_2$ [5,6] и сравнили его с нашими теоретическими предсказаниями. Рассчитанное магнитосопротивление хорошо согласуется с экспериментальными данными для кристаллов различного состава.

## Литература

1. J.J. Sanchez, G. Fabbris, Y. Choi et al., Phys. Rev. B 104, 104413 (2021).
2. Huijie Li, Wenshuai Gao, Zheng Chen et al., Phys. Rev. B 104, 054435 (2021).
3. Xin Gui, Ivo Pletikosic, Huibo Cao, et al., ACS Centr. Sci. 5(5), 900 (2019).
4. F. H. Yu, H. M. Mu, W. Z. Zhuo, et al. Phys. Rev. B 102, 180404(R) (2020).
5. P. D. Grigoriev, N. S. Pavlov, I. A. Nekrasov et al., arXiv:2405.18046
6. K. S. Pervakov, A. V. Sadakov, O. A. Sobolevskiy et al., arXiv:2411.03971

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.67

# Особенности кинетики образования сегрегаций точечных дефектов в упругом поле краевой дислокации в ОЦК железе.

**Гусев А. А.[1], Назаров А.В.[2]**
[1]*ИФВД РАН, Москва, Россия,* alexey-gsv@mail.ru
[2]*НИЯУ МИФИ, Москва, Россия,* avn46@mail.ru

Мы изучаем перераспределение точечных дефектов в окрестности дислокации, применяя теоретический подход развитый ранее и учитывающий влияние деформаций создаваемых дислокациями на диффузионные потоки. [1] Многомасштабное моделирование предполагает несколько этапов.

Первый этап - это изучение атомной структуры ядра краевой дислокации и её окрестности с использованием модифицированного метода молекулярной статики (МММС), который учитывает анизотропию упругого поля вокруг основной расчетной ячейки. Ранее это было сделано в работе [2].

Второй этап - расчет коэффициентов, определяющих влияние компонентов тензора деформации на потоки дефектов в ОЦК решетке, и расчет диффузионных характеристик точечных дефектов. Поэтому для этой задачи также применен МММС. Указанные коэффициенты и диффузионные характеристики получены для вакансий ранее в работе [3].

Третий этап — моделирование диффузии точечного дефекта в кристалле ОЦК железа при различных температурах методом молекулярной динамики с использованием модели естественного термостата. Проведение этого расчета позволяет получить значение энергии миграции и предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса.

В рамках четвертого этапа диффузионное уравнение получено путем подстановки выражений для потоков в уравнение непрерывности. В нём использованы характеристики и коэффициенты полученные на предыдущих этапах. В этом уравнении коэффициенты диффузии зависят от компонент тензора деформации нелинейным образом. Далее проведено численное решение уравнения диффузии. Полученное распределение концентраций определяет кинетику перераспределения точечных дефектов в окрестности ядра краевой дислокации.

Расчеты показывают, что распределения вакансий вблизи дислокаций имеют довольно сложный характер. При больших временах их форма мало меняется, в отличие от начала процесса. Распределения при высоких и низких температурах существенно различны. Следует отметить, что эти распределения качественно отличны от формы сегрегаций атомов углерода полученных ранее для окрестностей таких же дислокаций.

## Литература

1. A.V. Nazarov, A.A. Mikheev // J. Phys.: Condens. Matter 20 485203 (2008)
2. A.A. Gusev, A.V. Nazarov // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 1005 012027 (2020)
3. M.A. Boboqambarova, A.V. Nazarov. // MRS Advances 7, 2022. – Pp. 689-694

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.68

# LIGHT ABSORPTION IN A QUANTUM CONSTRICTION IN A LONGITUDINAL MAGNETIC FIELD

**Ibaeva R.Z., Ibragimov G.B.**

*Institute of Physics of Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan*

raidaibaeva@gmail.com
guseyn_gb@mail.ru

Modern semiconductor technologies enable the creation of exotic semiconductor structures such as quantum cylinders, disks, rings, spherical shells, pseudosphere surfaces, and microconstrictions. Changes in the shape and size of nanostructures significantly affect their spectral properties. Studying the influence of the magnetic field and the geometric features of nanostructures on optical and transport properties is one of the current directions in nanoelectronics.

In this work, we study the optical properties of a quantum constriction (QC) in a longitudinal magnetic field. As a confinement potential model, we choose the "soft wall" potential:

$$V(x,y,z) = m^*(\omega_0^2 x^2 + \omega_0^2 y^2 \text{-} \omega_z^2 z^2)/2$$

where $m^* -$ is the effective electron mass; z is the coordinate along the QC axis; the frequency $\omega_z$ −is determined by the effective length of the QC $\omega_z = \sqrt{\hbar/(m^* L_z^2)}$ ; $\omega_0 -$ is the characteristic frequency of a two-dimensional harmonic oscillator, whose potential models the QC potential in the plane perpendicular to the QC axis. The vector potential of a uniform magnetic field A is directed along the QC axis.

We examine the dependence of the light absorption coefficient in the QC on the magnitude of the external magnetic field. The limiting transition from "microconstriction to quantum wire" is also considered.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.69

# Поляризационные процессы в пленках йодида серебра, легированных медью

**Ильинский А.В.[1], Кастро Р.А.[2], Кононов А.А.[2], Тимофеева И.О.[2], Шадрин Е.Б.[1]**

*[1]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт Петербург, Россия*
*[2]Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт Петербург, Россия*

Твердотельные ионные проводники типа йодид серебра AgI широко используются в устройствах консервации энергии, сверхмощных системах хранения информации и др. [1,2]. При этом, большой интерес представляет изучение модификации механизмов фазового перехода (ФП) полупроводник – суперионник [3] при легировании исходной системы AgI различными примесями. Целью данной работы явилось выявление методом диэлектрической спектроскопии (ДС) особенностей низкочастотных поляризационных процессов в нанокристаллических пленках йодида серебра, легированных медью.

Пленки AgI:Cu (4 об. %) были синтезированы на слюдяной подложке двухстадийным методом, формирующим плёнки с характерным размером кристаллитов около 1 μm. ДС спектры измерялись на установке Concept-81 (Novocontrol Technologies) в диапазоне частот $f=10^{-2}$ …$10^{7}$ Hz в области температур $T$=343 …453 К.

В процессе исследований обнаружено уменьшение с ростом частоты численного значения диэлектрической проницаемости $\varepsilon'$ и немонотонное изменение данного значения с увеличением температуры. Выявлено существование максимума функции частотной зависимости диэлектрических потерь $\varepsilon''(\omega)$, который с ростом температуры смещается в высокочастотную область. Показано, что частотная зависимость удельной проводимости материала характеризуется степенной дисперсионой зависимостью вида $\sigma\sim\omega^{s}$ $(\omega=2\pi f)$, что соответствует существованию в нанокристаллической системе набора релаксаторов, характеризующихся различными временами релаксации. Изменение с температурой $T$ значения показателя степени $s$ выявляет существование прыжкового механизма проводимости, при котором носители заряда совершают термически активированные прыжки через потенциальные барьеры, разделяющие примеси, с последующей трансформацией процесса проводимости в сторону термически активированного квантово-механического туннелирования.

Существование температуры, при которой меняется механизм переноса заряда ($T\approx$433 К), а также наличие резко различающихся по характеру участков на температурной зависимости диэлектрической проницаемости указывают на совершение в системе фазового перехода полупроводник-суперионник аналогично тому, как это происходит в нелегированных пленках AgI при более высоких, чем в случае легирования, температурах [4]. В работе обсуждаются возможные механизмы фазового перехода, а также проведен расчет релаксационных и энергетических параметров системы **AgI:Cu**.

## Литература

1. Fokina S.V., Borisov E.N., Tomaev V., Tumkin I. / Solid State ionics – 2016 – V. 297. P. 64-67.
2. Sidorov A.I., Nashchekin A.V., Castro R.A., Anfimova I.N., Antropova T.V. // Physica B: Physics of Condensed Matter. – 2021. V. 603P. P. 412764.
3. Johan M.R., Leng T.S., Hawari N.L., Suan S. // Int. J. Electrochem. Sci. – 2011. – V. 6. P. 6235 – 6243.
4. Ilinskiy, A. V., Shadrin, E. B., Castro Arata, R. A., Popova, I. O. Physics of Complex Systems. – 2022. – № 3 (4). С. 202–213.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.70

# Магнитосопротивление бислойных мостиков PdFe-Nb

**Ионин А.С.[1,2], Больгинов В.В.[1,*], Карелина Л.Н.[1], Шуравин Н.С.[1]**
[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*
[2]*ООО "СП "Квант", Москва, Россия*
[*] bolg@issp.ac.ru

Доклад посвящён изучению слоистых структур сверхпроводник-ферромагнетик, привлекающих большой интерес с фундаментальной и прикладной точек зрения. Например, возникновение пространственно-неоднородных сверхпроводящих состояний в окрестности SF-границы позволяет реализовать контакты Джозефсона сверхпроводник-ферромагнетик-сверхпроводник (SFS) с отрицательным знаком ток-фазового соотношения (пи-контакты) [1]. Для создания таких элементов перспективными являются разбавленные сплавы на основе Pt и Pd с концентрацией магнитных атомов (Fe, Ni, Co) несколько процентов и менее. Малая энергия обменного взаимодействия обеспечивает большие пространственные масштабы затухания и осцилляций сверхпроводящего параметра порядка [2]. Использование сплава $Pd_{0.99}Fe_{0.01}$ позволило реализовать контакты Джозефсона с эффектом магнитной памяти [3], актуальные для создания сверхпроводниковых вычислительных систем [4]. Дальнейшие эксперименты [5-6] показали, что эффект магнитной памяти может наблюдаться и в мостиковых структурах PdFe-Nb-PdFe в виде зависимости сопротивления от магнитной предыстории. Актуальность таких элементов определяется возможностями их миниатюризации до субмикронных размеров в отличие от джозефсоновских запоминающих элементов [3], чувствительных к потоку вектора намагниченности джозефсоновского барьера.

Представленное исследование посвящено конкретизации механизма магниторезистивного эффекта в мостиковых элементах памяти на основе PdFe. Мы показали, что данный эффект связан именно с влиянием магнитного упорядочения в PdFe-слое на величину сверхпроводящего параметра порядка. Это подтверждается обратным знаком магниторезистивного эффекта в мостиках, не содержащих сверхпроводника. Однако наличие двух слоёв PdFe в мостиковом элементе памяти не является необходимым: использование SF-структур вместо FSF позволяет добиться аналогичного эффекта. Полученные результаты открывают новые возможности для разработки масштабируемых элементов джозефсоновской магнитной памяти.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-72-00053.

## Литература

1. Golubov A.A., Kupriyanov, M.Y., Il'Ichev E. // Reviews of modern physics. – 2004. – Vol. 76. – № 2. – P. 411-469.
2. Kupriyanov, M.Y., Golubov A.A., Siegel M. // Proc. SPIE. – 2006. – Vol. 6260. – P. 62600S.
3. Larkin T.I., Bol'ginov V.V., Stolyarov V.S., et.al. // Applied Physics Letters. – 2012. – Vol. 100. – P. 222601.
4. Holmes D.S., Ripple A.L., Manheimer M.A. // IEEE Trans. Appl. Supercond. – 2013. – Vol. 23. – P. 1701610.
5. Karelina L.N., Bolginov V.V., Erkenov Sh.A., et.al. // JETP Letters – 2020. – Vol. 112. – P. 705-709.
6. Karelina, L.N., Shuravin, N.S., Bolginov V.V., et.al. // JETP Letters – 2022. – Vol. 116. – P. 110-116.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.71

# Применение программы 3D-MLSI для проектирования сверхпроводниковых нейронов

**Ионин А.С.[1,2], Разорёнов Ф.А.[1], Жардецкий Е.Н.[1], Больгинов В.В.[1], Тарасова И.Е.[1], Карелина Л.Н.[1], Шуравин Н.С.[1,*], Хапаев М.М.[3]**

[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,* E-mail

[2]*ООО "СП "Квант", Москва, Россия*

[3]*МГУ, Москва, Россия*

[*] shuravin@issp.ac.ru

Доклад посвящён возможностям программы 3D-MLSI [1], предназначенной для численного моделирования многослойных сверхпроводящих структур, состоящих из большого количества сверхпроводников произвольной формы. Исследование мотивировано задачей создания джозефсоновских интерферометров для реализации нейронных сетей на основе сверхпроводниковых технологий. Ранее были предложены конструкции искуственных нейронов, обладающих необходимыми свойствами, в частности, сигмоидальной или гауссовой формой передаточной функции (ПФ) [2]. Однако необходимый вид ПФ реализуется только при определённых индуктивностях элементов нейронов, что актуализирует вопрос о выборе инструмента для численного моделирования конструкций проектируемых образцов.

Наиболее удобным объектом для тестирования возможностей программы является двухконтактный интерферометр, сформированный над толстым сверхпроводящим экраном, что является типичным решением для устройств быстрой одноквантовой логики (БОК, RSFQ). Все конструкции предполагали использование трёх сверхпроводящих слоёв, разделенных слоями изоляции. Нижний слой выступал в качестве сверхпроводящего экрана, тогда как два других предназначались для создания петли интерферометра, индуктивно связанной с контрольной линией. Возможности программы проверялись путём расчёта матриц индуктивностей для двухконтактных интерферометров с различной геометрией как петли интерферометра, так и его индуктивной связи с контрольной линией. Хорошее совпадение экспериментальных и расчётных результатов подтвердило высокий потенциал программы 3D-MLSI для проектирования элементов цифровой сверхпроводящей электроники.

Работа проводилась при поддержке гранта РНФ № 23-72-00053. Изготовление образцов выполнено с использованием уникальной научной установки «Криоинтеграл» (УНУ № 352529) Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН.

## Литература

1. Khapaev M.M., Kidiyarova-Shevchenko A.Y., Magnelind P., Kupriyanov M.Yu. // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. – 2001. – Vol. 11. – № 1. – P. 1090-1093.
2. Schegolev A.E., Klenov N.V., Soloviev I.I., et al. // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2016. – Vol. 7. – P. 1397-1403.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.72

# СТАБИЛИЗАЦИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ЦКЭХ В ДВУХСЛОЙНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ В ШИРОКИХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ GaAs В НАКЛОННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**Капустин А. А.[1], Дорожкин С. И.[1]**
[1]*Институт Физики Твердого Тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,*
kapustin@issp.ac.ru

Нами обнаружено, что при наклоне магнитного поля к плоскости широкой квантовой ямы GaAs, содержащей квазидвумерную двухслойную электронную систему (ДсЭС), в ней наблюдаются особенности целочисленного квантового эффекта Холла (ЦКЭХ), т.е. минимумы продольного сопротивления $\rho_{xx}$ и связанные с ними плато холловского сопротивления $R_{xy}$, на всех целочисленных факторах заполнения $3 \le \nu \le 10$ ($\nu$ – полный фактор заполнения, соответствующий суммарной концентрации электронов в обоих слоях). Часть из этих особенностей ослабляется или полностью исчезает при повороте образца в перпендикулярное магнитное поле (Рис.1). Таким образом, наклонное магнитное поле стабилизирует режим ЦКЭХ в ДсЭС, приводя к более глубоким минимумам $\rho_{xx}(H_\perp)$ и более выраженным плато $R_{xy}(H_\perp)$. Благодаря одновременному измерению $\rho_{xx}(H_\perp)$, $R_{xy}(H_\perp)$ и магнетоёмкостей между ДсЭС и двумя затворами, расположенными по разные стороны от неё, удалось показать, что стабилизация режима ЦКЭХ происходит благодаря сильному перераспределению электронов между слоями ДсЭС в наклонном магнитном поле. Качественно, мы объясняем это тем, что компонента магнитного поля, параллельная плоскости ДсЭС, влияет на туннельную связь между слоями [1], что облегчает перераспределение электронов между ними.

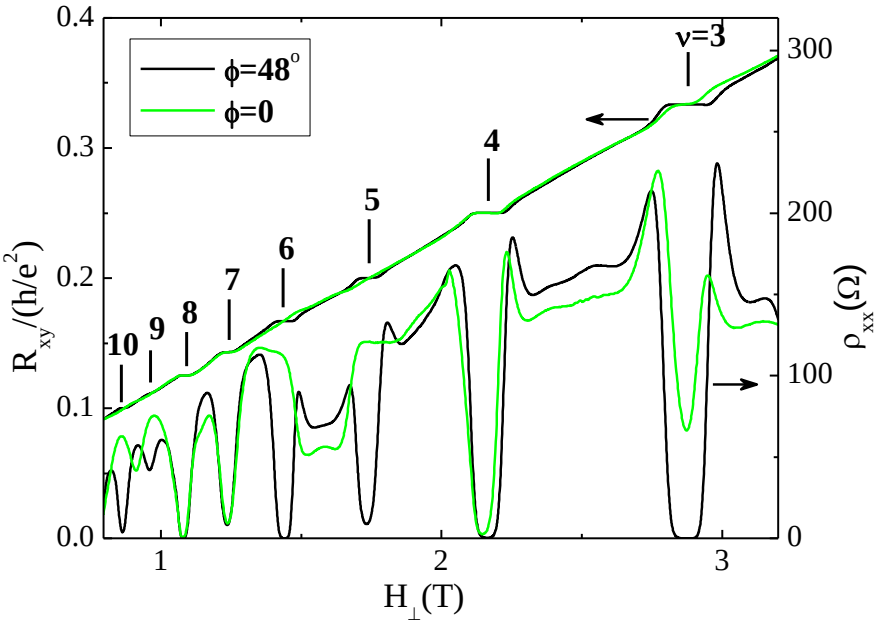



**Рис. 1** Две компоненты тензора магнетосопротивления, измеренного в двухслойной электронной системе в квантовой яме GaAs шириной 60 нм при T=0.5K и при двух углах наклона образца по отношению к магнитному полю: φ=48° и φ=0. Вертикальные линии с цифрами отмечают положения целочисленных факторов заполнения в режиме ЦКЭХ. Измерения выполнены при напряжениях на затворах $V_{FG}$=-0.2В, $V_{BG}$=0.8В, при которых в нулевом магнитном поле электронами заполнены оба слоя. $H_\perp = H\cdot\cos\varphi$ – компонента магнитного поля, перпендикулярная плоскости образца.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-22-00312.

**Литература**

1. Hu J. , MacDonald A.H. // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – № 19. – P. 12554-1 – 12559-6.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.73

# Получение ультратонких β-W нанопроволок лазерной абляцией в сверхтекучем гелии

**Карабулин А. В.[1,2], Матюшенко В. И.[2,3], Болтнев Р. Е.[1,3], Крушинская И. Н.[3], Пельменёв А. А.[3], Ходос И. И.[4]**

[1]*Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия,* E-mail: avkarabulin@gmail.com

[2]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*

[3]*Филиал федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Черноголовка, Россия*

[4]*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

При нормальных условиях вольфрам имеет две кристаллические структуры: стабильную (α-W) и метастабильную (β-W). В сравнении со стабильной фазой β-W более хрупок, и обладает худшей электропроводностью. Однако, более высокая температура сверхпроводящего перехода $T_c$ ~ 1–4 K в нанопленках из β-W по сравнению с $T_c$ = 0,01 K для α-W, а также гигантский спиновый эффект Холла делает его интересным объектом для исследований. β-W в настоящий момент получают в виде наноплёнок. Получение квазиодномерных объектов из вольфрама затруднено из-за его крайне высокой температуры плавления. Метод абляции различных металлов в сверхтекучем гелии [1] позволяет получать металлические нанопроволоки со свободной поверхностью толщиной менее 10 нм.

В настоящей работе методом лазерной абляции W-мишени, погруженной в сверхтекучий гелий, нами были получены сети из вольфрамовых нанопроволок диаметром 2-5 нм (рис. 1а). С помощью просвечивающей электронной микроскопии были исследованы структура и строение образующихся объектов. Электронная дифракция показала (рис. 1б), что вольфрамовые нанопроволоки находятся в β-форме, которую они сохраняют при хранении в атмосфере воздуха в течение нескольких месяцев. Отжиг образцов в вакууме при температуре 350°C также не приводит к изменению их структуры и морфологии.

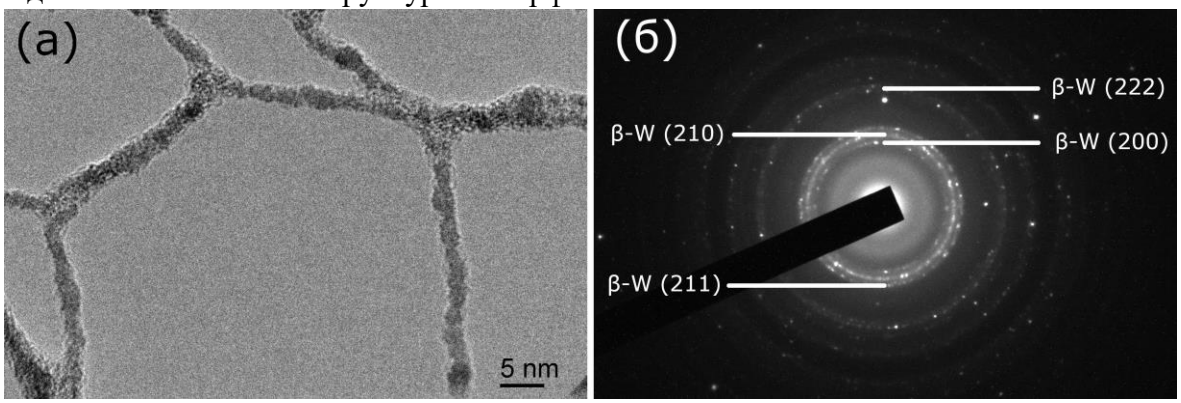



Рисунок 1. ПЭМ-изображение (а) и электронограмма (б) вольфрамовых нанопроволок.

## Литература

1. Gordon E. B., Karabulin A. V., Matyushenko V. I., Sizov V. D., Khodos I. I. // JETP. — 2011. – V. 112. – P. 1061-1070.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.74

# Сверхпроводящий переход в нанопроволоках аморфного галлия

**Карабулин А. В.[1,2], Болтнев Р. Е.[1,3], Крушинская И. Н.[3], Матюшенко В. И.[2,3], Пельменёв А. А.[3], Ходос И. И.[4]**

[1]*Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия,* E-mail: avkarabulin@gmail.com
[2]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*
[3]*Филиал федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Черноголовка, Россия*
[4]*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

Метод абляции различных металлов в сверхтекучем гелии (He II) позволяет получать металлические нанопроволоки диаметром менее 10 нм [1]. При абляции галлиевой мишени, погруженной в сверхтекучий гелий при T=1.3 K, были получены трёхмерные (3D) сеточные структуры из нанопроволок галлия. С помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) были исследованы структура и строение полученных нанообъектов. Электронная дифракция показала, что при низкотемпературном синтезе образуется аморфная модификация галлия, которая сохраняется при разогреве до 300 K и хранении в атмосфере воздуха в течение нескольких месяцев. Обнаружено, что температура сверхпроводящего перехода, $T_c$, полученной аморфной модификации галлия равна приблизительно 8.35 K и хорошо совпадает с литературными данными для плёнок аморфного галлия - $T_c$ = 8.4 K [2]. Во время разогрева при этой температуре наблюдается периодическое изменение сопротивления полученного образца. Измерения проводились с использованием схемы с несколькими электродами [3], на которых образовывалась 3D-сетка Ga-нанопроволок в процессе абляции. Предложена модель, объясняющая такое поведение сопротивления при повышении температуры.

## Литература

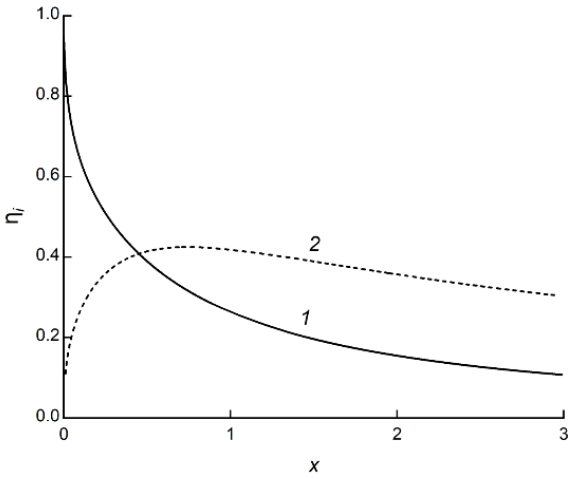
1. Gordon E. B., Karabulin A. V., Matyushenko V. I., Sizov V. D., Khodos I. I. // JETP. — 2011. – V. 112. – P. 1061-1070.
2. Tsuei C. C. Amorphous Superconductors. In “Superconductor Materials Science: Metallurgy, Fabrication, and Applications”. Editors: S. Foner and B. B. Schwartz. Springer, New York, NY– 1981. – P. 735-756.
3. Boltnev R. E., Karabulin A. V., Krushinskaya I. N., Matyushenko V. I., Pelmenev A. A., Khodos I. I. // Materials Letters. – 2025. – V. 380. – P. 137746.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.75

# Особенности спин-флуктуационного взаимодействия в железосодержащих сверхпроводниках

**А. Е. Каракозов, М. В. Магницкая**
*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия*
chkara@rambler.ru

Исследование свойств железосодержащих сверхпроводников (далее ферропниктиды, ФП) в принципе позволяет определить величину корреляционных эффектов в них, прямо связанных со спин-флуктуационным взаимодействием (СФВ) электронов дырочных (h) карманов вокруг точки Γ и электронных (e) карманов вокруг точек X = (π, 0) и Y = (0, π). В «минимальной» модели ФП межзонное e-h СФВ полагают $\alpha^2(\mathbf{k}_e,\mathbf{k}_h') \approx G_S$, а внутризонное e-e СФВ $\alpha^2(\mathbf{k}_e,\mathbf{k}_e') \approx U(1\pm d\cos2\varphi_{X/Y})(1\pm d\cos2\varphi'_{X/Y})$, где коэффициент анизотропии $d=(2G_D/U)^{1/2}$, $G_{S,D}$ – спиновая и орбитальная компоненты СФВ, U – внутризонное электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ). При этом предполагается, что анизотропия η e-щели $\Delta_e(\mathbf{k}) = \Delta_e(1+\eta\cos2\varphi)$ совпадает с анизотропией СФВ d и при $G_D/U>>1$ e-щель имеет симметрию d-волны с узлами φ= π/4, 3π/4…[1]. Отношение $G_S/U=x$ в ФП имеет смысл меры близости к АФМ переходу или допинговой зависимости, а отношению $G_D/G_S=d^2/2x$ - параметр корреляции спиновой и орбитальной компонент СФВ. В настоящее время не существует надежных способов расчета СФВ и более того однозначно не известен даже знак СФВ (см., например, [2]).




Обращение многозонных уравнений Элиашберга с несколькими (4 и более) спектральными функциями $\alpha^2_{ij}(\omega)F_{ij}(\omega)$ и экспериментальной туннельной плотностью состояний $N(\omega)$ также вряд ли возможно. Параметры СФВ в ФП могут быть найдены из эксперимента обращением системы уравнений БКШ с поправками сильной связи и экспериментальными данными в качестве параметров [3]. Проведенный анализ решений уравнений сверхпроводимости в сопоставлении с экспериментальными данными ФП показал, что в отличие от [1] анизотропия СФВ d вследствие межзонного e-h взаимодействия меньше 1 ($d \le 1$), при этом анизотропия e-щели η не совпадает с анизотропией СФВ d ($\eta < d$), т.е. и СФВ и e-щель не имеют узлов. На рисунке показана рассчитанная зависимость коэффициента анизотропии e-щели η от межзонного СФВ ($x = G_S/U$) в ФП $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ в модели делокализованных электронов – слабо коррелированных волн спиновой и зарядовой плотности $d(x) \approx 1$ (кривая *1*) и орбитальной модели – с сильной корреляцией спиновой и орбитальной/зарядовой степеней свободы $d^2(x)=2x$ (кривая *2*). Сравнение рисунка с экспериментальной зависимостью η(x) [4] показывает предпочтительность делокализованной модели для СФВ в ФП.

## Литература

1. Maier T.A., Graser S., Scalapino D.J. et al. // Phys. Rev. B. – 2009. – Т. 79. – № 22. – С. 224510.
2. Fernandes R.M., Chubukov A.V., Schmalian J. // Nature Phys. – 2014. – Т. 10. – С. 97-104.
3. Karakozov A.E., Magnitskaya M.V. // J. Surf. Invest. – 2024. – Т. 18. – Suppl. 1. – С. S231-S238.
4. Karakozov A.E., Magnitskaya M.V. et al. // Phys. Rev. B. – 2019. – Т. 99. – № 5. – С. 054504.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.76

# Влияние низкотемпературного отжига на кристаллическую структуру низкоразмерного органического проводника к-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl_2$

**Хасанова Э. И.*, Кузьмин А. В., Хасанов С.С.**
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук (ИФТТ РАН)*
*e-mail: hasanova.leo@issp.ac.ru*

Среди представителей широкого класса ET-проводников соль к-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl_2$ (или сокращенно к-Cl) выделяется своими нетривиальными физико-химическими свойствами. Соединение может быть получено в двух фазовых состояниях: Моттовского диэлектрика и т.н. к′-Cl фазы, которая является металлом при нормальных условиях и переходит в сверхпроводящее состояние при $T_c = 11.5$ K [1]. Существует ряд работ, в которых высказывается предположение о связи проводимости кристаллов соли к-Cl со структурным беспорядком в этиленовых группах молекул ET [2].

Считается, что данный тип беспорядка имеет термоактивационную природу, при этом механизм «переключений» ориентаций терминальных хвостов ET молекул до сих пор изучен слабо. В данной работе методом низкотемпературного отжига и закалки были получены оценки некоторых кинетических параметров процесса упорядочения концевых этиленовых групп.

В частности, сравнение кристаллических структур, полученных в ходе меленного охлаждения (с отрелаксированной решеткой) и шоковой заморозки при 110 K, показало, как ведет себя заселенность минорной позиции хвостов при закалке монокристаллов к-Cl. Для того, чтобы выяснить, как параметры кристаллической решетки реагируют на длительный отжиг монокристаллов, была проведена серия монокристалльных рентген-дифракционных экспериментов, при длительной (около 130 часов) выдержке образца при температуре 180K – т.е. до температурного интервала обнаруженной ранее особенности в поведении объема элементарной ячейки [3]. Тщательный сравнительный анализ собранных дифракционных данных позволил, впервые, получить оценку характерного времени стабилизации термоактивационных процессов в структуре к-Cl – около 90 часов.

**Литература**

1. *Yagubskii E.B., Kushch N.D., Kazakova A.V., Buravov L.I., Zverev V.N. Manakov A.I., Khasanov S.S., Shibaeva R.P.* Superconductivity at Normal Pressure in к-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Cl_2$ Crystals // JETP Letter. 2005. V. 82, № 2. P. 93-95.
2. *Huang Y., Hu Y., Ren S.* Low-power anisotropic molecular electronic memristors // Applied Materials Today. 2022. V. 29. P. 101569.
3. *Кузьмин, А.В., Хасанова, Э.И., Мелетов, К.П., Зверев, В.Н., Хасанов, С.С.* Квазидвумерный органический проводник к-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Cl. Конформационный беспорядок и зарядовая структура проводящих слоев // ЖЭТФ. 2024. V. 166(12). P. 795–812.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.77

# ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ МУАРОВОГО ГРАФЕНА С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПОДЛОЖКИ

**Хазанова С.В.[1], Савельев В.В.[1]**
[1] *ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 603950, Нижний Новгород, Россия,*
khazanova@phys.unn.ru, savelevvladv@mail.ru

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются миниатюризация, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база современных устройств все чаще основывается на двумерных или Ван-дер-Ваальсовых материалах с высокой подвижностью носителей заряда. В частности, графен - материал, обладающий рядом уникальных электрофизических свойств. В настоящее время ведутся как теоретические, так и экспериментальные поиски состояний графена, или конструкций на его основе, в составе которых он становится узкощелевым полупроводником. Одна из таких структур - нескольких слоев, развёрнутых относительно друг друга, открывает новый раздел электроники – твистронику [1]. Дальнейшая модификация свойств возможна при чередовании графена с другими материалами или использовании подложки. Также, графеновые фотодетекторы демонстрируют высокую пропускную способность и возможность интеграции с кремниевой фотоникой, что является многообещающим фактором для устройств оптической связи. При этом возможность управления параметрами муаровой графеновой сверхрешётки открывает путь для применения его в качестве сенсора [2].

В двуслойном графене с различным углом разориентации появляются периодично расположенные области (т.н. AA- и AB- упаковки), при этом свойства графена также периодически меняются и возникает узор, напоминающий муаровый. Сверхпериод проявляется как в геометрии данных слоев, так и в энергетической структуре, а его значение порядка 10 нм зависит от угла разориентации. При этом AA-упакованные области имеют полуметаллические свойства и обеспечивают конфайнмент электронов, в то время как AB-упакованные имеют полупроводниковые свойства. Учитывая, что фаза графена с AA-упаковкой метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает широкие возможности для создания устройств на их основе. Кроме того, с ростом угла разориентации может происходить уменьшение скорости Ферми [1]

В данной работе в качестве исследуемых структур рассматривается двуслойный графен со слоями, смещенными друг относительно друга на некоторый угол. Численно, методом матрицы переноса с учетом влияния подложки [3] рассчитываются коэффициенты прохождения и отражения для структур с различным значением сверхпериода муара. Присутствие дефекта в данных графеновых структурах приводит к появлению дополнительной моды в запрещённой зоне, что позволяет использовать его в области сенсорики. Также исследуется влияние силы межслойного взаимодействия двуслойном графене на транспортные и энергетические характеристики структуры. Определены значения углов, начиная с которых зависимость транспортных характеристик двуслойного муарового графена от энергии становится немонотонной.

## Литература

1. A.V. Rozhkov et al // Physics Reports. – 2016. – Vol. 648. PP. 1–104.
2. Qinci Wu et al // Nature Communications. – 2024. – Vol. 15. P. 368.
3. Majérus B. et al // PRB. – 2023. – Vol. 107. P. 045429.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.78

# СВЯЗЬ МЕЖДУ РЕЛАКСАЦИЯМИ МОДУЛЯ СДВИГА И ОБЪЕМА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

**Хмыров Р. С. [1], Макаров А. С.[2], Кобелев Н. П.[3], Хоник В. А.[1]**

[1]*Московский государственный университет «Станкин», Москва, Россия*
[2]*Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия,* v.a.khonik@yandex.ru
[3]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*

Проведены параллельные измерения высокочастотного модуля сдвига $G$ и относительного изменения объема $\Delta V/V$ при нагреве высокоэнтропийных стекол $Ti_{20}Zr_{20}Hf_{20}Be_{20}Cu_{20}$ и $Ti_{20}Zr_{20}Hf_{20}Be_{20}Ni_{20}$ вплоть до температуры полной кристаллизации. Выделены релаксационные изменения этих свойств. Показано, что эти изменения могут быть хорошо описаны в рамках межузельной теории. Установлено, что кинетика релаксации в полном диапазоне температур может быть описана единственным безразмерным температурно-независимым параметром $K = dnG/dlnV$, который равен -44 и -53 для указанных стекол соответственно. Такие величины $K$ указывают на дефекты типа межузельных гантелей как источник релаксации.

Установлено также, что релаксация $V$ линейно зависит от концентрации этих дефектов (см. рис.). Это может быть описано другим безразмерным температурно-независимым параметром, связанным с релаксационным объемом дефектов. Показано, что полученные результаты приводят к разумным оценкам изменений плотности стекла при кристаллизации.

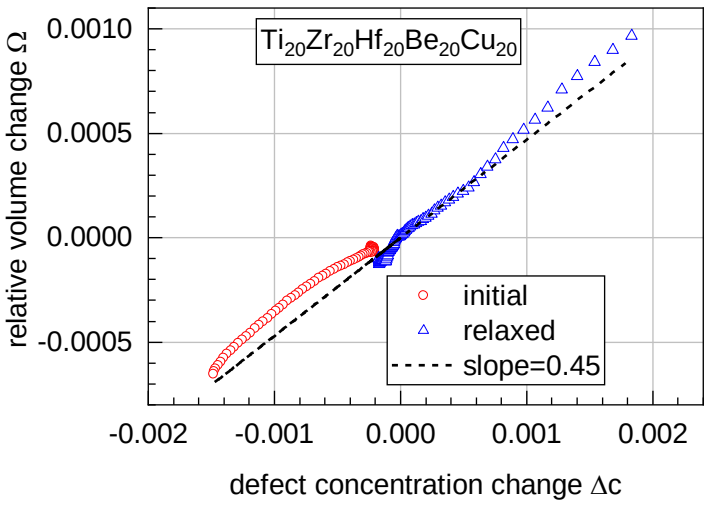



Рис. Относительное изменение объема в зависимости от изменения концентрации дефектов, рассчитанной из релаксации модуля сдвига для стекла $Ti_{20}Zr_{20}Hf_{20}Be_{20}Cu_{20}$. Красные символы соответствуют исходному состоянию, синие – после релаксации путем нагрева в область переохлажденной жидкости. Наклон $d\Omega/d\Delta c = 0.45$ соответствует релаксационному объему дефекта $r = 1.45$. Такая величина $r$ характерна для релаксаций, за которые ответственны межузельные гантели.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-12-00162.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.79

# Сверхбыстрые сцинтилляции в кластерно – полимерных композициях «неорганика – органика»

**Классен Н. В., Цебрук И.С., Кедров В.В,, Киселев А.П., Орлов А.Д.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия а,*
klassen@issp.ac.ru

Нанокомпозиции из неорганических сцинтилляторов и органических люминофоров позволяют значительно улучшить чувствительность радиационных детекторов за счет сочетания больших сечений поглощения гамма квантов и радиационной прочности тяжелых неорганических атомов с высокими квантовым выходом и быстродействием светоизлучения органики [1]. В наших экспериментах по рентгенолюминесценции активированного полистирола с наполнителями из бромида лантана, йодида и сульфата цезия установлено, что при дальнейшем измельчении неорганических и органических компонентов до кластерно – молекулярных масштабов проявляются качественно новые процессы преобразования поглощенной энергии радиации в сцинтилляционные сигналы. Это выражается в виде быстрых вспышек света с длительностью порядка наносекунды и необычно высокой интенсивностью, основная причина которых – сильное перекрытие электронных и колебательных состояний органики и неорганики. В нанокомпозициях с размерами зерен порядка сотни нанометров импульсы отдачи от быстрых электронов, выбрасываемых тяжелыми атомами неорганики при поглощении ими гамма – квантов, оставляют там относительно небольшую часть своей кинетической энергии и возбуждение сцинтилляций начинается только при столкновениях этих электронов с органическими молекулами. Но в кластерно – полимерных композициях импульсы отдачи фотоэлектронов, выбрасываемых атомами неорганики, сразу же ощутимо встряхивают электронно – атомную систему органики, которая за счет своей гораздо меньшей массы забирает у электрона заметную часть энергии отдачи. Эта энергия переводится в электронно – колебательные возбуждения базовых полимерных цепочек и молекул – активаторов люминесценции (виброны [2]), которые быстро преобразуют ее в световые вспышки. Короткодействующие взаимодействия полимерных цепочек с неорганическими катионами и анионами могут для понижения электростатической энергии формировать сверхструктуры из параллельных друг другу стержневидных агломератов неорганика – органика, где становится возможным коллективно стимулированное излучение света вдоль их осей - сверхлюминесценция [3]. Это – дополнительный фактор ускорения и усиления сцинтилляций в кластерно - полимерных композициях «неорганика – органика».

## Литература

1. С.З. Шмурак, В.В. Кедров, Н.В. Классен, О.А. Шахрай, Импульсная рентгенолюминесценция из неорганических частиц и органических люминофоров// Письма в ЖТФ, том 38, № 15, с. 10 – 17, (2012)
2. E.Kukk, R.Puttner, M.Simon, Recoil lineshapes in hard X-Ray photoelectron spectra of large molecules – free and anchored –on-surface 10-aminodecane-1-thiol., Phys.- Chem.Phys., 24. 10465 (2022)
3. В.В. Левичев, Электронные и фотонные устройства: принцип работы, технологии изготовления. – СПб: Университет ИТМО, 2015. – 65 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.80

# Упругие поля и энергии квантовых дисков и осесимметричных квантовых точек в нанопроволоках

**Колесникова А. Л.[1,2], Nguyen Van Tuyen[1,3], Гуткин М. Ю.[1,2], Романов А. Е.[1,4]**

[1] *Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия*
[3] *Sao Do University, Chi Linh city, Hai Duong, Viet Nam*
[4] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

m.y.gutkin@gmail.com

В настоящее время повышенное внимание исследователей привлекают кристаллические нанопроволоки (НП). Обладая уникальными физико-механическими свойствами [1], они находят применение во многих современных приборах и устройствах с принципиально новыми функциональными характеристиками [2], которые недостижимы при использовании объёмных материалов. Особый интерес представляют гибридные полупроводниковые НП, в состав которых входят квантовые диски (КД), занимающие все поперечное сечение НП, и квантовые точки (КТ), со всех сторон окруженные материалом НП. Из-за разницы в кристаллических решетках таких включений и НП в гибридных НП возникают упругие деформации и напряжения несоответствия, которые ведут к существенному изменению физических свойств НП. При определенных условиях эти деформации и напряжения могут релаксировать за счет образования дефектов несоответствия, появление которых ведет к деградации функциональных характеристик гибридных НП. Для изучения и теоретического описания напряжений несоответствия и механизмов их релаксации требуется построение корректных упругих моделей КД и КТ в составе гибридных НП.

В докладе излагается общий подход к расчету упругих полей КД и осесимметричных КТ в гибридных НП, кратко описанный в [3]. В качестве базисного элемента для построения решений для КД и КТ разной формы использован бесконечно тонкий дилатационный диск в упругом цилиндре, для которого найдены аналитические выражения для упругих полей и энергии. На их основе построены упругие модели КД и КТ в виде цилиндра конечной длины, конуса и усеченного шара. Исследовано упругое взаимодействие между двумя КД, и обнаружен неизвестный ранее эффект притяжения КД с дилатацией одного знака. Показано, что величина этого эффекта определяется отношением толщины взаимодействующих КД к радиусу НП. Подробно рассмотрены упругие поля и энергия цилиндрической КТ [4]. Показано, в каких случаях свободная поверхность НП оказывает сильное экранирующее воздействие на упругие поля и энергии КД и КТ, а в каких это воздействие не столь существенно.

Полученные результаты открывают путь к теоретическому исследованию различных релаксационных процессов в гибридных НП, например, за счет перераспределения и сегрегации примесей или за счет образования дислокаций несоответствия.

## Литература

1. Dubrovskii V.G. Nucleation and growth of nanostructures (Springer, Berlin, 2014).
2. Quan L.N., Kang J., Ning C.-Zh., Yang P. // Chem. Rev. – 2019. – Vol. 119. – P. 9153-9169.
3. Kolesnikova A.L., Nguyen V.T., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. // Tech. Phys. Lett. – 2024. – Vol. 50. – No. 3. – P. 68-72.
4. Kolesnikova A.L., Nguyen V.T., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. // Intern. J. Eng. Sci. – 2025. – Vol. 206. – No. 1. – Art. No. 104169.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.81

# Широкополосная ТГц-ИК спектроскопия проводящих и диэлектрических плёнок.

**Командин Г.А., Гавдуш А.А.**

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской Академии Наук, Москва, Российская Федерация, gakomandin64@gmail.com*

Тонкие пленки один из ключевых объектов в фундаментальных исследованиях разнообразных физических явлений. Спектроскопические подходы на протяжении многих десятилетий успешно применяются для определения оптических и электродинамических параметров тонкопленочных структур [1]. Методы широкополосной спектроскопии с использованием когерентного субмиллиметрового спектрометра, импульсного спектрометра с временным разрешением и инфракрасного Фурье спектрометра обеспечивают получение широкополосных спектров отражения–пропускания охватывающих диапазон оптических фононных мод, квазирелаксационных процессов в диэлектрических плёнках и отклик свободных носителей заряда в проводящих пленках [2]. Полученные экспериментальные данные анализируются в рамках классических моделей включая модель осциллятора для восстановления параметров колебательных полос поглощения и модели Друде для описания параметров проводников. Оптические характеристики тонких пленок восстановлены на основе выполненного моделирования.

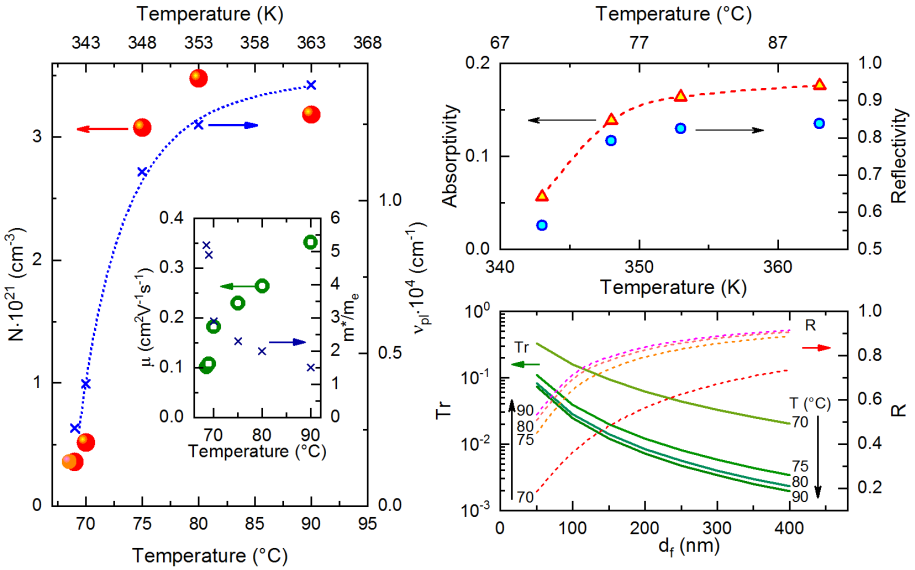



Рисунок 1. Рассчитанные параметры пленки $VO_2$ в проводящей фазе [3].

На рисунке показаны параметры пленки диоксида ванадия рассчитанные для проводящей фазы на основе данных широкополосных измерений спектров пропускания и отражения, а также восстановленные оптические характеристики – спектры пропускания и поглощательной способности пленки. Данный метод использован для определения оптических и характеристик диэлектрических пористых тонких пленок периодических мезопористых органосиликатов [3], плёнок с фазовым переходом металл – диэлектрик и тонких плёнок сегнетоэлектриков.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект N 25–79–30006

Литература:

1. J.F. Scott. Applications of Modern Ferroelectrics. Science 315, 954 (2007)
2. M.M. Quasilbash et al., Mott transition in VO2 revealed by infrared spectroscopy and nano-imaging. Science 318, 1750 (2007)
3. A.A. Gavdush et al., Insulator metal transition in $VO_2$ film on sapphire studied by broadband dielectic spectroscopy. Sci. Rep. 15:3500 (2025)
4. P. Van Der Voort, et al., Periodic Mesoporous Organosilicas, from simple to complex bridges; a comprehensive overview of functions, morphologies and applications. Chem. Soc. Rev. 42, 3913-3955 (2013)

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.82

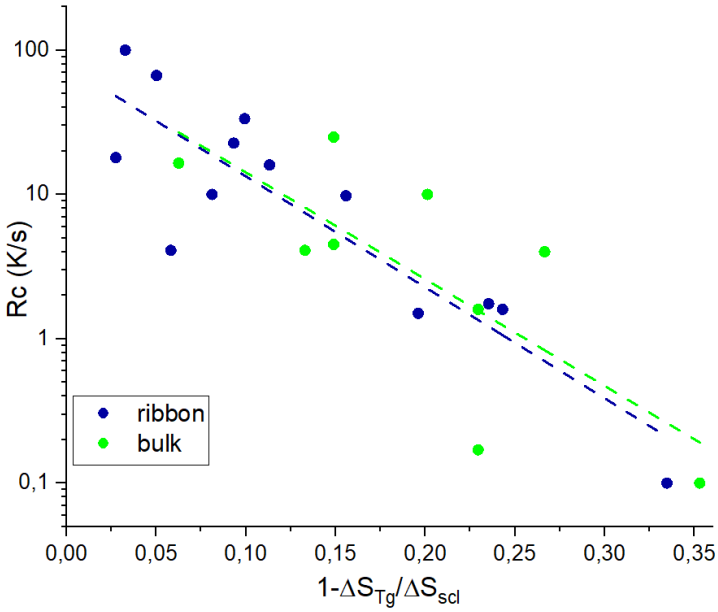
# КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ И ОТНОСИТЕЛЬНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ ЖИДКОСТИ

**Кончаков Р. А.[1], Афонин Г. В.[1], Макаров А. С.[1], Кобелев Н. П.[2], Хоник В. А.[1]**

[1] *Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж, РФ,* v.a.khonik@yandex.ru

[2] *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, РФ,* kobelev@issp.ac.ru

Критическая скорость охлаждения (КСО) - это минимальная скорость, при которой расплав переходит в аморфное состояние. Недавно было показано, что в качестве критерия стеклообразующей способности (СОС) можно использовать избыточную энтропию стекла по отношению к материнскому кристаллу в состоянии переохлажденной жидкости $\Delta S_{sql}$ [1]. Развивая этот подход, в работе [2] был предложен параметр структурного порядка $\xi(T) = 1 - \Delta S(T) / \Delta S_m$, где $\Delta S_m$ - рост энтропии от температуры солидус до температуры ликвидус. Было установлено, что рост $\xi(T)$ в области переохлажденной жидкости коррелирует с ростом КСО. Цель настоящей работы заключалась в установлении взаимосвязи между КСО и относительным изменением избыточной энтропии в области переохлажденной жидкости.




Методика эксперимента аналогична работам [1,2]. На рисунке для ряда стекол показана зависимость КСО $R_c$ от относительного изменения избыточной энтропии в области переохлажденной жидкости. Для ленточных и объемных образцов отсутствует значимая разница в наклонах интерполяционных прямых. Таким образом, можно сделать вывод о ключевой роли термодинамической неупорядоченности в подавлении кристаллизации. Предложенный подход может позволить упростить прогнозирование СОС.

Рисунок. Зависимость КСО от относительного изменения избыточной энтропии в интервале переохлажденной жидкости. Синим показаны данные для образцов в ленточной форме (ribbon), зеленым - для объемных образцов (bulk).

Работа поддержана Российским научным фондом в рамках проекта № 23-12-00162.

## Литература

1. Makarov A.S., Konchakov R.A., Afonin G.V., Qiao J.C., Kobelev N.P., Khonik V.A. // JETP Letters. – 2024. – V. 120. – P. 759–765.

2. Makarov A.S., Afonin G.V., Konchakov R.A., Khonik V.A., Qiao J.C., Vasiliev A.N., Kobelev N.P. // Scr. Mater. – 2024. – V. 239. – P. 115783.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.83

# Синтез композита детонационные наноалмазы / кварцевое стекло

**Короткова М.А.[1], Ефимченко В.С.[1], Терещенко А.Н.[1], Мазилкин А.А.[1]**
[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия,* korotkova@issp.ac.ru

Проблему агрегации детонационных наноалмазов (ДНА), содержащих азотно-вакансионные (NV) люминесцентные центры для использования в области квантово-оптических приложений [1] и биотехнологий [2], можно решить включением одиночных ДНА в твёрдое вещество, прозрачное в оптическом диапазоне. Однако при этом остаётся неизвестной возможность сохранения люминесценции ДНА после воздействия давлений и температур, необходимых для формирования такого композита.

Целью настоящей работы было получение плотного массивного композита из кварцевого стекла с одиночными ДНА, равномерно распределёнными в объёме матрицы, и проверка сохранения у этих ДНА фотолюминесценции $NV^-$ центров.

Для получения композита были использованы аэрогели на основе $SiO_2$, содержащие 1 и 6 вес.% ДНА, ранее синтезированные в ИФАВ РАН методом сверхкритической сушки [3]. Для удаления воды и гидроксильных групп аэрогели были отожжены в атмосфере аргона при атмосферном давлении и температуре 550 °C в течение 4 часов, а затем уплотнены при давлении 7.5 ГПа и температуре 250 °C в массивные диски ДНА/$SiO_2$ диаметром 3–5 мм и толщиной 1–1.5 мм. Диск с 1 вес.% ДНА разрушился через три дня после извлечения из ячейки высокого давления; диск с 6 вес.% ДНА расслоился на три диска толщиной 0.6/0.6/0.3 мм в течение нескольких часов.

Рентгенодифракционное исследование полученных плотных образцов $SiO_2$/ДНА показало, что после обработки при высоком давлении и температуре матрица из $SiO_2$ перешла в более плотное аморфное состояние. В спектрах комбинационного рассеяния света плотных образцов $SiO_2$/ДНА при комнатной температуре наблюдалась только люминесценция от матрицы из кварцевого стекла и нейтральных $NV^0$ центров ДНА. ПЭМ-изображения образцов выглядели практически одинаково и свидетельствовали об однородном распределении одиночных наноалмазов в твёрдой матрице $SiO_2$. Спектр фотолюминесценции, измеренный для уплотнённого образца $SiO_2$/ДНА с 1 вес.% ДНА при температуре 300 K, показал наличие слабого пика на длине волны 646 нм. Интенсивность этого пика значительно увеличилась при охлаждении образца до температуры 15 K. Длина волны и изменение интенсивности пика при охлаждении соответствовали $NV^-$ центру в ДНА.

Таким образом, уплотнение аэрогеля $SiO_2$/ДНА при давлении 7.5 ГПа и температуре 250 °C превращает его в массивный композит из плотного и химически инертного кварцевого стекла с одиночными наноалмазами, равномерно распределёнными в объёме матрицы и сохранившими люминесцентные свойства $NV^-$ центров.

## Литература

1. Hammons J.A. // J. Phys. Chem. Lett. – 2021. – 12. – C. 5286-5293.
2. Nunn N. // Curr. Opin. Solid State Mater. Sci. – 2017. – 21. – C. 1-9.
3. Fomina I.G. // Chem. Nano. Mat. – 2024. – 10. – C. 202400172.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.84

# Теплопроводность модифицированного одно- и двуслойного графена

**Ковалева Н. А.[1], Ковалева М. А.[1,2], Смирнов В.В.[1]**

[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физикиим. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия, natkov@chph.ras.ru*

[2]*Факультет Физики Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия makovaleva@hse.ru*

С момента открытия, графен широко исследовался в различных областях физики, химии и материаловедения. Благодаря его уникальным свойствам, он используется для формирования наноструктур, материалов и поверхностей. Одним из важных аспектов применения графена является его влияние на теплопроводность структур и материалов. Хотя теплопроводящие свойства графена широко исследовались как теоретически, так и экспериментально, влияние модификаций поверхности графена на способность передавать и рассеивать тепло остается не до конца изученным.

В настоящей работе методами молекулярной динамики исследовано влияние модификации одно и двуслойного графена углеродными наноструктурами на теплопроводящие свойства.

Проведен расчет теплопроводности листов графена с различного вида рассеивателями, в частности в виде углеродных коннекторов между графеновыми листами, а также рассеивателями в виде фуллеренов с различным способом прикрепления к графену (Рис. 1). Расчет теплопроводности проводился методом равновесной динамики Грина-Кубо. Сходимость метода зависит от выбора эффективного времени релаксации фононов в системе [Wang2017]

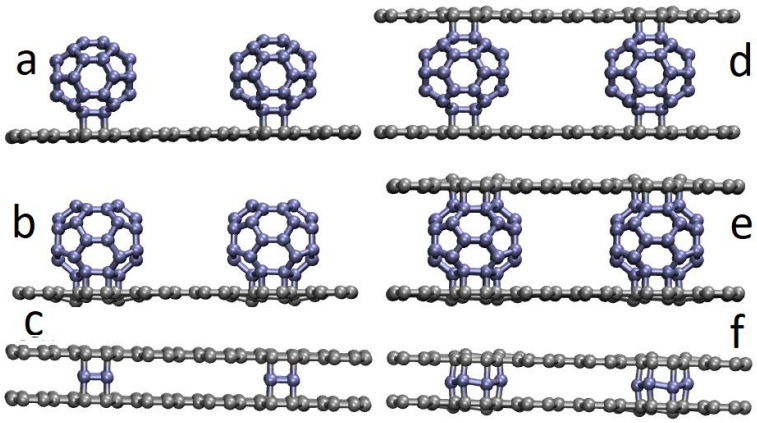



Рисунок. 1. Графен с рассеивателями в виде фуллеренов с двумя (a) и шестью (b) связями между графеном и фуллереном; Два листа графена с линками в виде фуллеренов с двумя (d) и шестью (e) связями между графеном и фуллереном; Два листа графена с двумя (c) и шестью (f) линками между листами.

Исследование выполнено с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ [2].

## Литература

1. Wang, Z., Safarkhani, S., Lin, G., & Ruan, X. //International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2017. – Т. 112. – С. 267-278.
2. Kostenetskiy P.S., Chulkevich R.A., Kozyrev V.I. HPC Resources of the Higher School of Economics // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – Vol. 1740. – No. 1. – P. 012050. DOI: https://doi.org/10.1088/1742-6596/1740/1/012050

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.85

# ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА ЭНЕРГИЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ ПОДСИСТЕМ

**Кузенко Д. В.**
*ФГБНУ «НИИ «Реактивэлектрон», Донецк, Россия,* danil.kuzenko.84@yandex.ru

При исследовании температурной зависимости диэлектрической проницаемости для сегнетоэлектрика $Pb(Zr,Ti)O_3$ установлено наличие критической температуры ниже температуры Кюри, в которой происходит распад доменной структуры [1], что в дальнейшем позволило определить энергии активации дефектов в $Pb(Zr,Ti)O_3$ методом температурной активации–релаксации диэлектрической проницаемости [2]. Анализ температурных зависимостей теплоемкости сегнетоэлектрика $BaTiO_3$ и мультиферроика $YMnO_3$ [3] в окрестности фазового перехода позволил определить скачок теплоемкости $\Delta C$, обусловленный фазовым переходом. Это показало наличие критической температуры $T_{crit.}$, которая ниже температуры Кюри и температуры Нееля соответственно: $T_{crit.} < T_C$, $T_{crit.} < T_N$ (Рис. 1). На трех выделенных участках зависимость $\Delta C(T)$ можно аппроксимировать экспоненциальным уравнением:

$$\Delta C_p(T) = C_0 \cdot \exp(\pm U / kT), \qquad (1)$$

что свидетельствует об активационной природе процессов. Это позволило определить энергии активации $U$ и энтальпии $\Delta H$ этих процессов. Для $BaTiO_3$: $U_1$ = 0,99 эВ, $U_2$ = 2,46 эВ, $U_3$ = 2,87 эВ, $\Delta H_1$ = 82 Дж/моль, $\Delta H_2$ = 60 Дж/моль, $\Delta H_3$ = 108 Дж/моль. Для $YMnO_3$: $U_1$ = 0,018 эВ, $U_2$ = 0,042 эВ, $U_3$ = 0,052 эВ, $\Delta H_1$ = 72 Дж/моль, $\Delta H_2$ = 62 Дж/моль, $\Delta H_3$ = 74 Дж/моль. Физические механизмы активационных процессов обусловлены типом фазового перехода в указанном диапазоне температур (Рис. 1): сегнетоэлектрический типа смещения для $BaTiO_3$ и антиферромагнитный для $YMnO_3$, которые, в свою очередь, вызваны возбуждением электронной и спиновой подсистем. Это позволяет рассматривать исследование фазовых переходов как метод определения спектра температурного возбуждения электронной и спиновой подсистем сегнетоэлектриков, магнетиков и мультиферроиков.

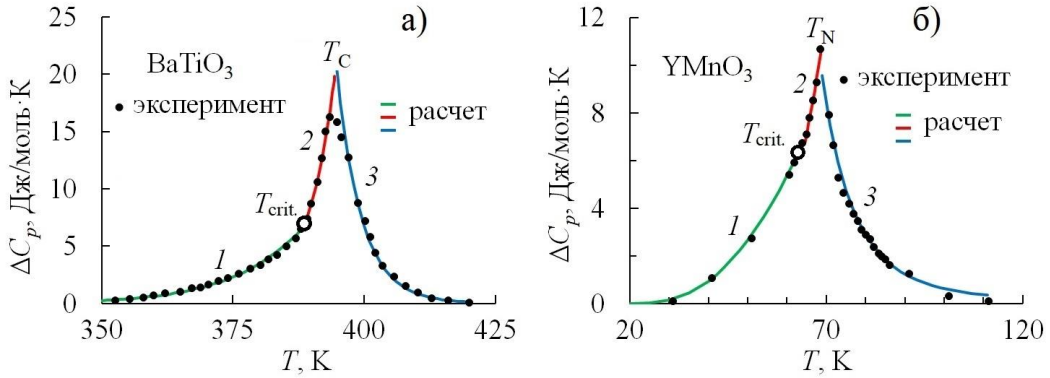



Рис. 1 Температурные зависимости скачка теплоемкости, обусловленного фазовым переходом для $BaTiO_3$ (а) и $YMnO_3$ (б). *1-3* – участки получены из уравнения (1).

## Литература

1. Kuzenko D.V. // J. Adv. Dielectr. – 2021. – Vol. 11. – No. 1. – Art. No. 2150006.
2. Кузенко Д.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2024. – № 5. – С. 29-34.
3. Fan C., Zhao Z.Y., Song J.D., Wu J.C., Zhang F.B., Sun X.F //J. Cryst. Growth. – 2014. – Vol. 388 – P. 54–60.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.86

# Кристаллическая структура и морфология $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$ (Ch=S, Se, Te)

**Кузнецова А. Ю.[1], Меренцов А. И.[1], Корх Ю. В.[1], Таркаева Е. В.[2], Титов А. Н.[1]**
[1]*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия,*
cuznecova89634485295@mail.ru
[2]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

Морфология кристаллов твердых растворов замещения $Me_xTi_{1-x}Ch_2$ (Me = V, Cr, Zr; Ch = S, Se) представляет собой интерес благодаря формированию структурных фрагментов в пределах одного монокристалла при сохранении однофазности материала [1,2]. В работе [3] показано, что в системе $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ происходит перенос заряда между структурными фрагментами. Стабильность материала достигается благодаря кулоновскому взаимодействию между структурными фрагментами.

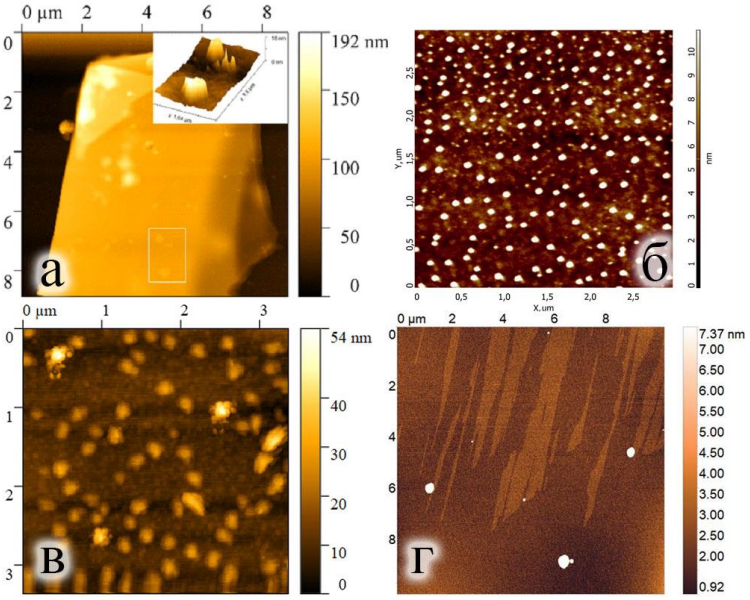



Рис. 1. Топография монокристалла $Zr_{0.25}Ti_{0.5}S_2$ (а), $Zr_{0.34}Ti_{0.66}Se_2$ (б), $Zr_{0.5}Ti_{0.5}Te_2$ (в), $Zr_{0.95}Ti_{0.05}Se_2$ (г).

Методом твердофазного ампульного синтеза из исходных матриц $TiCh_2$ и $ZrCh_2$ (Ch=S, Se, Te) впервые получены системы твердых растворов $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$. Синтез выполнен при T = 1000 ºC в течение 72 часов для $Zr_xTi_{1-x}S_2$, при T = 900 ºC в течение 48 часов для $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$ (Ch= Se, Te). Поликристаллические образцы аттестованы методом рентгеноструктурного анализа. Методом газотранспортной реакции выращены монокристаллы $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$. Морфология и химический состав монокристаллов изучены с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Элементный анализ, а также уточнение атомных позиций показывает наличие самоинтеркалированного титана во всех исследованных образцах. Методом сканирующей зондовой микроскопии получена топография монокристаллов $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$ (рис.1). На поверхности наблюдаются дендриды вне зависимости от типа халькогена, но при этом, имеются отличия в геометрических характеристиках (форма и высота) образований. В $Zr_xTi_{1-x}S_2$ были обнаружены включения высотой 5 нм и диаметром от 10 до 100 нм (рис.1а). В $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ наблюдается уменьшение количества включений в зависимости от содержания циркония (рис. 1 б, г). При этом происходит увеличение высот включений с 20 до 100 нм при увеличении замещенного циркония. Для $Zr_xTi_{1-x}Te_2$ была изучена морфология поверхности при x=0.5. Наблюдаются на поверхности образования высотой 6-15 нм, при этом ширина достигает 200 нм.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект РНФ № 24-23-20136, соглашение 9-24-МГ).

## Литература

1. A.I. Merentsov et al., J. Phys. Chem. Solids., 2022, 160, 110309.
2. A.S. Shkvarin et al., J. Phys. Chem. C, 2022, 126, 7076.
3. A.I. Merentsov et al., J. Chem. Phys., 2025, 162, 044704.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.87

# ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА МЕХАНИЗМ ПРОВОДИМОСТИ И СПЕКТРЫ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В КРИСТАЛЛАХ БРОМИДА ТАЛЛИЯ

**М.С. Кузнецов, К.С. Зараменских, С.М. Пилюшко, И.С. Лисицкий, А.Р. Корнеева**

*АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, Москва, Россия*, MSeKuznetsov@rosatom.ru

Широкозонные полупроводниковые соединения традиционно представляют интерес, так как на их основе можно создавать детекторы ионизирующего излучения, обладающие малыми размерами, не требующие охлаждения и обеспечивающие высокую эффективность регистрации высокоэнергетического излучения. Кристаллы бромида таллия (TlBr) являются одним из таких материалов благодаря своим уникальным свойствам. Они имеют высокие атомные номера составляющих (Tl— 81, Br — 35), большую плотность (7,56 г/см³) и отличную поглощающую способность к ионизирующему излучению. Кроме того, материал обладает радиационной стойкостью, а детекторы на его основе могут работать с высокой разрешающей способностью при близкой к комнатной температуре. [1-3].

В данной работе исследованы электрические характеристики, спектры глубоких ловушек, спектры микрокатодолюминесценции (МКЛ) нелегированных и легированных донорами (Pb, Ca) кристаллов TlBr и изучено влияние на эти характеристики условий выращивания (противодавление брома, противодавление аргона, выращивание на воздухе). Показано, что в исследованном интервале температур (85—320 К) проводимость кристаллов определяется концентрацией электронов и дырок в разрешенных зонах, а не ионной проводимостью. В процессах рекомбинации неравновесных носителей основную роль играют центры с энергией активации 1,0—1,2 эВ, на которых закреплен уровень Ферми в легированных донорами кристаллах. В нелегированных кристаллах уровень Ферми закреплен на центрах с уровнем около Ev+0,8 эВ, которые также участвуют в рекомбинации и ответственны за полосу МКЛ с энергией 1,85 эВ. В температурных зависимостях фототока нелегированных кристаллов большую роль играет прилипание электронов на мелких электронных ловушках с энергией 0,1—0,2 эВ и на более глубоких электронных ловушках. В спектрах глубоких центров обнаружены ловушки с энергиями 0,36, 0,45 и 0,6 эВ, концентрация которых растет при легировании донорами. Легирование Pb или Ca позволяет на порядок повысить удельное сопротивление материала, но легирование Pb приводит к большей концентрации глубоких ловушек, что неблагоприятно для использования материала в радиационных детекторах.

Коллектив авторов выражает благодарность Н.Б. Смирнову, Е.А. Кожуховой, А.В. Говоркову, А.Я. Полякову за вклад в работу.

## Литература

1. Kim H. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. - 2011. - V. 629. P. 192—196
2. Du M.-H. // Appl. Phys. Lett. - 2013. - V. 102. - P. 082102.
3. Lordi V. // J. Cryst. Growth. - 2013. - V. 379. - P. 84—92.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.88

# НАНОЧАСТИЦЫ АЛЮМИНИЯ И ПЛАТИНЫ ДЛЯ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ПЛАЗМОН-УСИЛЕННОЙ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

**Лизунова А.А., Мало Д., Новоселов А.К., Санатулина А.Ф., Иванов В.В.**

*Московский физико-технический институт (национальный университет), г.Долгопрудный, Россия,* lizunova.aa@mipt.ru

Локализация электро-магнитных полей на металлических наноструктурах в виде поверхностного плазмонного резонанса привлекает исследователей со всего мира с целью практического применения для создания химических и биологических сенсоров, повышения эффективности солнечных батарей и фотодиодов [1]. Оптические свойства наночастиц благородных металлов, таких как золото и серебро, характеризуются пиком резонансного поглощения в видимой и инфракрасной области спектра, зависят от размеров и формы частиц, подробно изучены и активно внедряются в электронику и биомедицину. В ультрафиолетовой области перспективными материалами для исследований металл-усиленной люминесценции являются наночастицы платины и алюминия, обладающие пиком плазмонного резонанса в диапазоне 200-350 нм [2]. Дешевый, экологичный и широко распространённый алюминий в наноразмерном состоянии используется для увеличения квантовой эффективности ультрафиолетовых светодиодов и фотокатализа [3].

В данной работе представлены результаты оптимизации методов сухой аэрозольной и микроплоттерной печати для создания плазмонных пленочных структур на основе частиц алюминия и платины, синтезированных в газовом разряде путем эрозии электродов соответствующих материалов. Исследованы зависимости интенсивности фотолюминесценции полупроводниковых наночастиц оксида цинка в ультрафиолетовой области на длине волны 377 нм, эффекты тушения и усиления сигнала в присутствии металлических наночастиц в зависимости от материала и размера частиц, морфологии и плотности упаковки частиц на поверхности, дизайна и способа изготовления структур. Для характеризации размерных и спектрально-люминесцентных свойств наночастиц и плазмонных структур использованы методы растровой и провечивающей электронной микроскопии, профилометрии, спектрофотометрии и флуориметрии. Выполнены расчеты по теории Ми с учетом радиационной и нерадиационной составляющей фактора усиления люминесценции ZnO на полидисперсных частицах алюминия и платины с распределеним частиц по размерам, аналогичным полученным в газовом разряде. Экспериментально и теоретически показано, что для достижения максимальных показателей металл-усиленной люминесценции ZnO в ультрафиолетовой области, наночастицы алюминия с размером 50-80 нм являются предпочтительным материалом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00311, https://rscf.ru/project/22-19-00311/.

## Литература

1. Klimov, V. Surface plasmons. In Nanoplasmonics; Jenny Stanford Publishing: Singapore, 2014; pp. 79–106.
2. Gérard, D.; Gray, S.K. J. Phys. D Appl. Phys. 2014, 48, 184001.
3. Wang, J.; Yang, G.; Zhang, Q.; Gao, S.; Zhang, R.; Zheng, Y. Plasmonics 2017, 12, 843–848.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.89

# ИЗБЫТОЧНАЯ ЭНТАЛЬПИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ И СТЁКОЛ

**Макаров А. С.[1], Кончаков Р.А.[1], Кобелев Н. П.[2], Хоник В. А.[1]**
[1]*Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия,*
a.s.makarov.vrn@gmail.com
[2]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*

В литературе широко распространён термодинамический метод определения разности энтальпий между расплавом (Р) и твердой кристаллической фазой $\Delta H_{L-X}(T)$ путём интегрирования разницы удельных теплоемкостей жидкой $C_P^L(T)$ и кристаллической $C_P^X(T)$ фаз в интервале температур от температуры стеклования $T_g$ до температуры солидус $T_S$: $\Delta H_{L-X}(T) = \Delta H_f - \int_{T_g}^{T_S} \Delta C_P^{L-X}(T)dT$, где $\Delta H_f$ – энтальпия плавления, $\Delta C_P^{L-X}(T) = C_P^L(T) - C_P^X(T)$ [1].

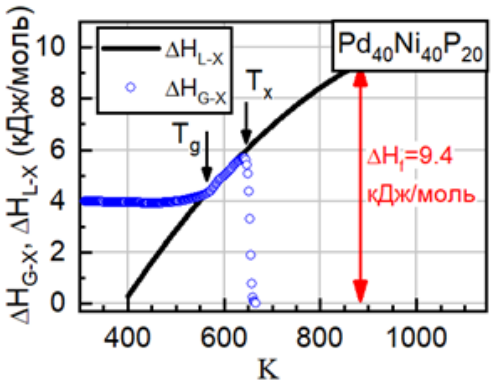



Рис. Температурные зависимости избыточной энтальпии Р $\Delta H_{L-X}(T)$ и МС $\Delta H_{G-X}(T)$. Показаны температуры стеклования $T_g$, начала кристаллизации $T_g$ и энтальпия плавления $\Delta H_f$.

В работах [2–3] предложен метод определения избыточных термодинамических потенциалов металлических стёкол (МС) относительно кристаллических аналогов. Уравнение для избыточной энтальпии МС $\Delta H_{G-X}(T)$ имеет вид: $\Delta H_{G-X}(T) = \frac{1}{\dot{T}} \int_T^{T_{cr}} \Delta W_{G-X}(T)dT$, где $\dot{T}$ – скорость нагрева, $\Delta W_{G-X}(T) = W_G(T) - W_X(T)$ – разность молярных тепловых потоков, исходящих от стекла $W_G(T)$ и того же образца после полной кристаллизации $W_X(T)$, реализующейся в результате нагрева МС до температуры полной кристаллизации $T_{cr}$. Поскольку расчеты избыточной энтальпии переохлажденных Р (литературный подход [1]) и МС (подход, развиваемый авторами настоящей работы) имеют общий температурный диапазон, можно провести сравнительный анализ этих подходов. Из рис. видно, что зависимость избыточной энтальпии $\Delta H_{G-X}(T)$ релаксированного МС $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ в интервале переохлажденной жидкости (т.е. интервал температур $T_g \le T \le T_x$) полностью совпадает с зависимостью избыточной энтальпии расплава $\Delta H_{L-X}(T)$, взятой из работы [1].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-12-00162.

## Литература

1. Wilde G., Gorler G.P., Willnecker R., Dietz G. // Appl. Phys. Lett. – 1994. – V. 65. P. – 397–399.
2. Makarov A.S., Afonin G.V., Qiao J.C., Glezer A.M., Kobelev N.P., Khonik V.A. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2021. – V. 33. – P. 435701.
3. Макаров А.С., Кончаков Р.А., Афонин Г.В., Цзиао Ц.Ч., Кобелев Н.П., Хоник В.А. // Письма в ЖЭТФ. – 2024. – Т. 120. В. 10. – С. 794–801.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.90

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ $CuInS_2$

**Mamedova I.A.[1], Qasimoglu I.Q.[1], Jahangirli Z.A.[1,2], Ragimov S.S.[2,1], Mammadov T.G.[1], Abdullayev N.A.[1,2*]**
[1]*Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*
[2]*Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*
*e-mail: irada_mamedova@yahoo.com

Соединения I-III-$VI_2$ являются тройными аналогами известных соединений ZnS и CdS. $CuInS_2$, кристаллизуются в тетрагональную, халькопиритную структуру с пространственной группой $I\bar{4}2d$. Элементарная ячейка $CuInS_2$ содержит 8 атомов. С одной стороны, кристаллы $CuInS_2$ привлекают внимание исследователей в связи с высоким двулучепреломлением и потому они потенциально интересны как нелинейные оптические материалы. С другой стороны, величина ширины запрещенной зоны $CuInS_2$ позволяет использовать эти кристаллы в качестве элементов эффективных солнечных фотоэлектрических преобразователей.

В настоящей работе оптические свойства кристаллов $CuInS_2$ исследованы экспериментально методом спектральной эллипсометрии, а также теоретически из первых принципов с использованием теории функционала плотности (DFT). Из эллипсометрических исследований в интервале энергий 0.7−6.5 eV определены действительные и мнимые части диэлектрической функции (рис.1, кривые 3), дисперсия коэффициентов преломления, экстинкции и поглощения. Проектированные на атомы парциальные плотности состояний (PDOS), электронная зонная структура, происхождение энергетических состояний, оптические функции при поляризациях падающего света вдоль и перпендикулярно оптической оси кристалла (рис.1, кривые 1 и 2) определены расчётами из первых принципов.

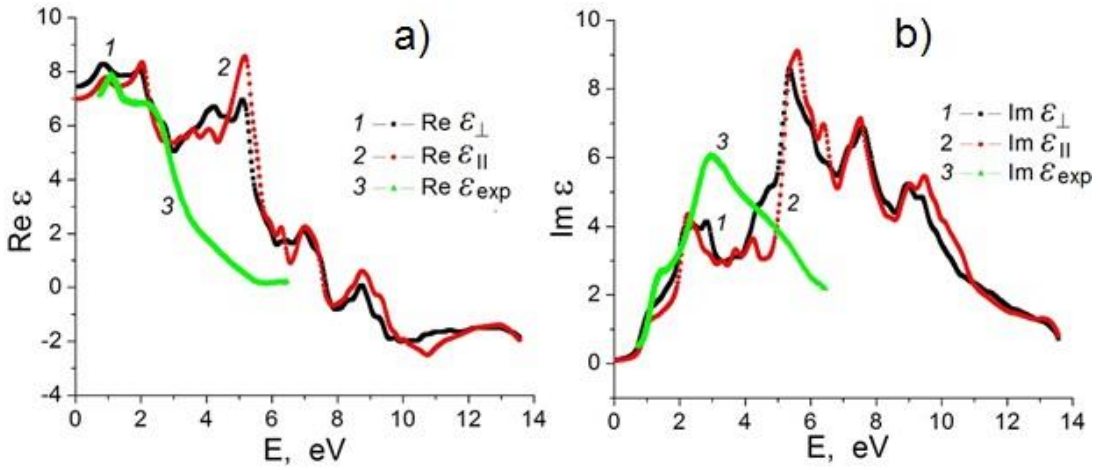



Рис. 1. Действительные (Re ε) (a) и мнимые (Im ε) (b) части диэлектрической функции $CuInS_2$ (1, 2 - теория; 1 - перпендикулярно тетрагональной оси *c* (⊥), 2 - вдоль тетрагональной оси *c* (II), 3 - эксперимент).

Проведено сравнение результатов, теоретически рассчитанных из первых принципов, с экспериментальными данными настоящей работы, полученными методом спектральной эллипсометрии.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.91

# Белый пигмент на основе полых кремнезёмных частиц: влияние геометрических параметров частиц на колориметрические характеристики их дисперсий

**Масалов В. М., Сухинина Н. С., Емельченко Г. А.**
*ИФТТ РАН, г. Черноголовка, Россия*, masalov@issp.ac.ru

Полые кремнезёмные частицы с непроницаемыми для жидкости оболочками обладают способностью эффективно рассеивать свет в жидких средах вследствие существенной разницы показателей преломления жидкостей и воздуха внутри частиц. Это позволяет использовать полые сферические частицы субмикронного размера в качестве **белого пигмента** для создания композиций с высокой непрозрачностью и укрывистостью (кроющей способностью) при относительно небольших массовых концентрациях.

В данной работе представлены результаты исследования влияния геометрических параметров и концентрации полых сферических кремнезёмных частиц субмикронных размеров на колориметрические характеристики их дисперсий в растворе глицерин-вода.

Было обнаружено, что с ростом концентрации частиц от $1 \cdot 10^{11}$ до $5 \cdot 10^{11}$ см$^{-3}$ светлота суспензий L* быстро нарастает до значений 80-90 после чего наблюдается незначительное увеличение светлоты с ростом концентрации частиц (рис. 1а). Исследование влияния толщины кремнезёмных оболочек в диапазоне значений (20-100 нм) на светлоту суспензии показало, что при одинаковой величине диаметра внутренней воздушной полости (~300 нм) и одинаковой концентрации частиц дисперсии толстостенных полых частиц обладают более высокой светлотой (рис. 1б).

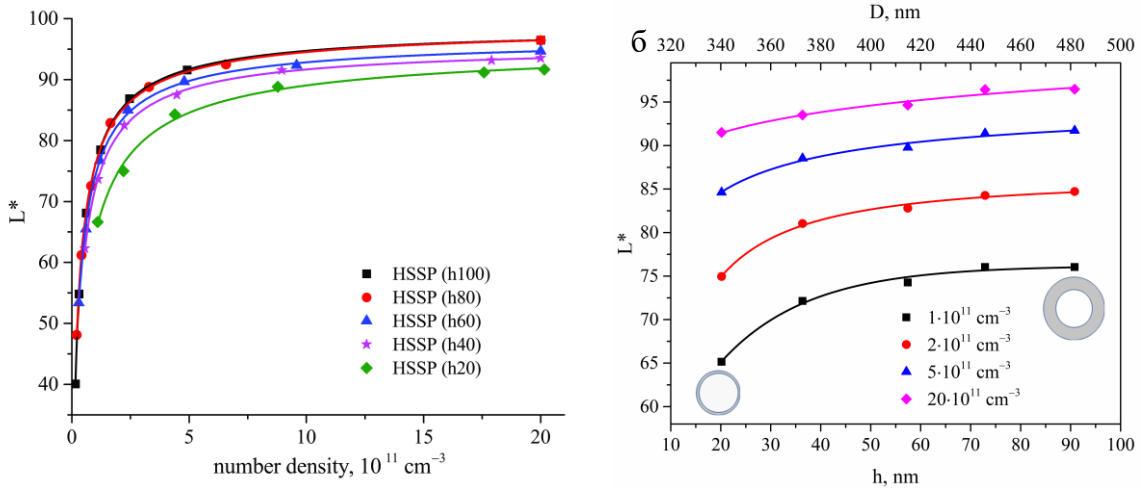



Рис. 1. Зависимости светлоты дисперсий полых кремнезёмных частиц в растворе глицерин-вода (1:1) от концентрации частиц (а) и от толщины оболочек (внешних диаметров) частиц при одинаковой их концентрации (б).

Величины цветности всех дисперсий полученных образцов составили менее 2,5, что указывает на ахроматическую цветность суспензий, что в сочетании с высокими показателями светлоты (85-95) свидетельствует об их белизне.

Проведённые исследования показали перспективность использования полых субмикронных частиц аморфного диоксида кремния в качестве белого пигмента в жидких средах для замены диоксида титана.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-23-00347).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.92

# Модель формирования субмикронных частиц диоксида кремния в процессе гидролиза алкоксидов

**Масалов В. М., Сухинина Н. С., Емельченко Г. А.**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки*
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук,*
*г. Черноголовка, Россия*, masalov@issp.ac.ru

Монодисперсные сферические частицы из аморфного кремнезёма ($SiO_2$) нанометровых, субмикронных и микронных размеров широко используются в различных областях техники, биологии и медицины.

Существуют две основные модели роста частиц диоксида кремния по реакции гомогенного гидролиза алкоксидов в щелочных условиях: модель присоединения мономера и агрегационная модель.

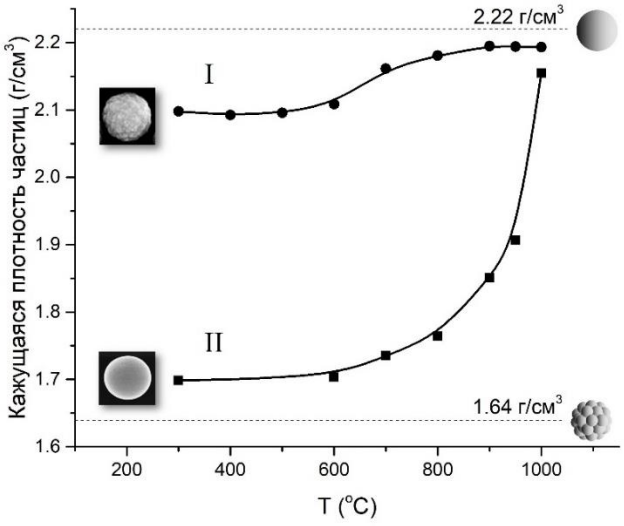



Рис. 1. Зависимости кажущейся плотности частиц диоксида кремния, синтезированных гетерогенным (кривая I) и гомогенным (кривая II) гидролизом тетраэтоксисилана, от температуры их термообработки (24 ч).

Согласно первой модели образующиеся в результате гидролиза алкоксидов кремния мономеры диоксида кремния формируют зародыши, которые в дальнейшем растут за счёт присоединения мономеров к их поверхности – «механизм присоединения мономера» [1]. Согласно второй модели в ходе реакции гидролиза из мономеров непрерывно формируются первичные субчастицы размером менее 5 нм, а рост частиц происходит за счёт их агрегации или присоединения к ранее образовавшимся агрегатам («агрегационный механизм») [2].

В данной работе на основе результатов исследования плотности частиц диоксида кремния, синтезированных в условиях гомогенного и гетерогенного гидролиза тетраэтоксисилана, предложена единая модель формирования частиц за счёт присоединения силикатных единиц различного масштаба (от мономеров диоксида кремния до сформированных первичных частиц диаметром ~5 нм).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-23-00347).

## Литература

1. Matsoukas T., Gulari E. // J. Colloid Interface Sci. – 1989. – v. 132. – № 1. – P. 13−21.
2. Bogush G.H., Zukoski C.F. // J. Colloid Interface Sci. – 1991. – v. 142. – P. 19–34.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.93

# Электронные состояния, возникающие на доменных стенках на поверхности магнитных полупроводников с топологическими особенностями зонной структуры

**Меньшов В. Н.[1], Русинов И. П.[2], Чулков Е. В.[3]**
[1]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия,*
v.menshov@lebedev.ru
[2]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия,*
i.rusinov@lebedev.ru
[3]*Санкт-Петербургский государственный университет, С.-Петербург, Россия,*
evg.chulkov@gmail.com

Зонная топология материалов с сильной спин-орбитальной связью в комбинации с различными типами магнитного упорядочения формирует богатую платформу для исследования необычных квантовых явлений, таких как квантовый аномальный эффект Холла. В настоящей работе мы демонстрируем, что электронные состояния, возникающие на магнитных доменных стенках на поверхности примесных или собственных магнитных топологических изоляторов, а также полупроводников с расщеплением Рашба, служат маркером нетривиальной кривизны Берри волновой функции таких материалов.

Задача о рассеянии квазирелятивистского электрона на жёсткой доменной стенке допускает аналитическое описание. В случае магнитного топологического изолятора показано, что помимо модуляции поверхностной обменной щели и смещения двумерного дираковского конуса в импульсном пространстве на стенке появляется связанное одномерное состояние с линейным спектром. Скорость, спиновая поляризация и пространственная локализация этого состояния зависят от взаимной ориентации намагниченностей в доменах. Примечательно, что на поверхности с сильным эффектом Рашба доменная стенка индуцирует возникновение одномерного резонансного состояния, характеристики которого близки характеристикам связанного состояния для случая топологического изолятора, главное отличие -- небольшое спектральное уширение.

Изучение модификации поверхностной электронной структуры под влиянием намагниченности со сложной пространственной и векторной текстурой проводилось численными методами. Описаны одномерные состояния электронов, индуцированные изинговскими, блоховскими и неелевскими доменными стенками. Показано, что в случае магнитного топологического изолятора кроме топологически защищённого состояния с линейной дисперсией могут присутствовать щелевые состояния типа Волкова-Панкратова, число и характеристики которых зависят от типа и ширины доменной стенки. Аналогично, в случае поверхности с сильным эффектом Рашба на доменных стенках в дополнение к бесщелевым резонансным состояниям могут появиться состояния со щелью.

Мы качественно оцениваем вклад связанных и резонансных состояний электронов на доменных стенках в аномальный эффект Холла для собственного антиферромагнитного топологического изолятора $MnBi_2Te_4$ и для разбавленного магнитного полупроводника с гигантским расщеплением Рашба $Bi_{1-x}(V,Mn)_xTeI$, соответственно. Реализация устойчивых спин-поляризованных электронных состояний, связанных с доменными стенками различной конфигурации, открывает новый подход к созданию устройств хранения, записи и считывания информации на базе материалов с топологическими особенностями зонной структуры.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.94

# Андреевский ток при наличии спинового рассеяния в гетероструктуре сверхпроводник-ферромагнетик

**Милютин Д. П.[1], Пугач Н. Г.[1]**
[1]*Национальный Исследовательский Институт Высшая Школа Экономики, Москва, Россия*, dpmilytuin@edu.hse.ru

Сверхпроводниковый эффект близости представляет особый интерес для изучения из-за возможности широкого применения в квантовых технологиях. Гетероструктура сверхпроводник-изолятор-нормальный металл (NIS) стала популярной для изучения сверхнизких температур, благодаря эффекту, схожем с эффектом Пельтье [1]. Теоретически было показано, что возможно достичь температуры 50 мК, стартуя с 300 мК [2]. Однако, эффективному охлаждению мешает подщелевой ток, возникающий в результате, андреевского отражения. Лучший способ для его подавления – использование тонкого ферромагнитного слоя [2, 4]. Мы изучили влияние спинового рассеяния на примесях и обменного взаимодействия, возникающих в данной структуре в результате добавления ферромагнитного слоя.

Магнитное рассеяние описывалось параметрами, усредненными по толщине слоя. Уравнения Узаделя описывают данную гетероструктуру [5]

$$\left(\omega - \frac{D_F}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \pm ih_{ex} + \tau_z^{-1} + 2\tau_x^{-1}\right) F_{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow),\,\omega}(x) + \\ + (\tau_{so}^{-1} - \tau_x^{-1})\left(F_{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow),\,\omega}(x) - F_{\downarrow\uparrow(\uparrow\downarrow),\,\omega}(x)\right) = 0,$$

где $\omega -$ мацубаровские частоты; $T$ – температура; $D_F -$ постоянная диффузии; $\tau_x, \tau_z, \tau_{so}$ $-$ характерные времена перпендикулярного, параллельного полю спин-флип и спин-орбитального рассеяния, соответственно; $h_{ex} -$ энергия обменного взаимодействия.

Было получено следующее выражение для тока частиц, с энергией меньше щели, т.е. андреевского тока

$$I_A = -\frac{1}{2eR_T}\sum_{\sigma}\int_0^{\Delta}\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + E^2}}\mathrm{Im}\big(F_\sigma(0)\big)\left(\tanh\frac{E+eV}{2T_N} - \tanh\frac{E-eV}{2T_N}\right)dE\,, \quad \sigma = \pm$$

где $e$ − заряд электрона, $\Delta$ − щель в энергетическом спектре, $R_T$ − туннельное сопротивление, $E$ − энергия, $V$ − напряжение, $T_N$ − температура нормального металла, $\sigma = \pm$ − проекции спина на ось намагниченности ферромагнетика.

Мы получили, что параметры $\tau_z, \tau_{so}$ эффективно подавляют величину андреевского тока, в то время как $\tau_x$ может способствовать его восстановлению.

**Благодарности**

Работа выполнена в рамках студенческого проекта №1607 “Спиновое рассеяние в гетероструктурах сверхпроводник-ферромагнетик” МИЭМ НИУ ВШЭ. Авторы благодарят за финансовую поддержку НУГ Квазиклассической динамики НИУ ВШЭ, проект №24-00-038.

## Литература

1. M. Nahum, T. M. Eiles, and J. M. Martinis, Appl. Phys. Lett. 65, 3123 (1994).
2. A.V. Gordeeva, et al. Record electron self-cooling in cold-electron bolometers with a hybrid superconductor-ferromagnetic nanoabsorber and traps. Sci. Rep. 1(8), 21961 (2020).
3. Pimanov D. A. et al. Response of a cold-electron bolometer in a coplanar antenna system //Superconductor Science and Technology. – 2024.
4. Buzdin A. I. Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures //Reviews of modern physics. – 2005. – Т. 77. – №. 3. – С. 935-976.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.95

# Температура замерзания разогретого расплава при высоких давлениях

**Молодец А. М.**
*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия,* molodets@icp.ac.ru

Рассмотрена объёмная зависимость температуры замерзания расплава на основе теплофизических свойств сжатого расплава. Критерий замерзания сформулирован в виде явной функции безразмерной температуры замерзания $\tau$ от безразмерного удельного объёма $\upsilon$ расплава в виде

$$\tau = \frac{(1-\upsilon)^4}{\upsilon^{2/3}}, \qquad (1)$$

где $\upsilon = V_l/\upsilon_{0l}$, $\tau = T_{ls}/T_{l0}$. Нормирующие величины $\upsilon_{0l}$ и $T_{l0}$ определяются удельным объёмом $V_{0l}$ и коэффициентом Грюнайзена $\gamma_{0l}$ конкретного расплава при температуре плавления $T_{0m}$ и атмосферном давлении посредством соотношений $\upsilon_{0l} = V_{0l}(1+2/(\gamma_{0l}-2/3))$ и $T_{l0} = T_{0m}(V_{0l}/\upsilon_{0l})^{2/3}(\upsilon_{0l}/(/\upsilon_{0l}-V_{0l}))^4$. График (1) показан на Рис.1.

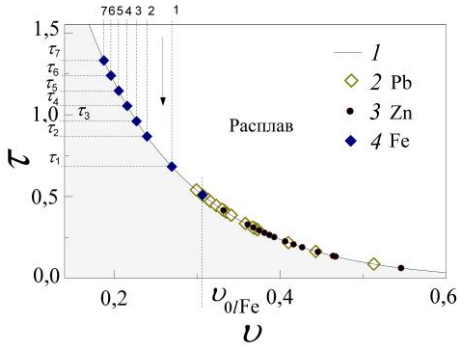



Рис.1 Критерий замерзания расплава. *1* – график (1); *2* и *3* –литературные данные по плавлению Pb из [1] и Zn при высоких давлениях; 1÷7 изохоры в области расплава железа при $\upsilon < \upsilon_{0lFe}$; $\tau_{1\text{-}7}$ – безразмерные температуры замерзания расплава на изохорах; *4* – прогностические точки замерзания на изохорах в области сжатого расплава Fe.

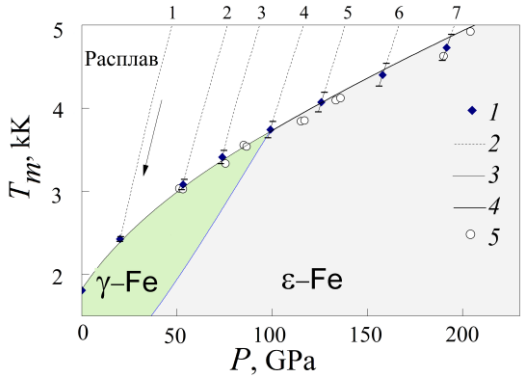



Рис.2 Кривая замерзания расплава железа. *1* – точки замерзания расплава железа, определённые на Рис.1; *2* – изохоры остывания расплава железа; *3* и *4* – кривые плавления Симона соответственно для γ–Fe и для ε–Fe; *5* – экспериментальные температуры быстрой кристаллизации расплава железа; (данные *3–5* взяты из [2]).

В сочетании с индивидуальным уравнением состояния расплава представлена кривая замерзания свинцового расплава, граничащего с полиморфными модификациями свинца *fcc*-Pb *hcp*-Pb, *bcc*-Pb при температурах до 4000 K и давлений до 75 ГПа, а также кривая замерзания железного расплава, граничащего с полиморфными модификациями железа *fcc*-Fe и *hcp*-Fe. Модельные значения температуры замерзания сжатого расплава железа сопоставлены на Рис.2 с экспериментальными значениями при температурах до 5000 K и давлениях до 200 ГПа. В целом Рис.1 и Рис.2 иллюстрируют согласие модельной кривой замерзания (1) с экспериментальными температурами превращения кристалл↔расплав цинка, свинца и железа при температурах до 5000 K и при давлениях до 200 ГПа.

Работа выполнена в рамках Госзадания №124020600049-8.

## Литература

1. Dewaele A., Mezouar M., Guignot N., Loubeyre P., PRB. – 2007.-V.76, 144106
2. Anzellini S., Dewaele A., Mezouar M., Loubeyre P., Morard G. // Science. – 2013. – V. 340. – P. 464-466.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.96

# Насыщение электросопротивления ванадия при высоких давлениях

**Молодец А. М., Голышев А.А.**
*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия,* molodets@icp.ac.ru

Представлены экспериментально-расчётные результаты исследования объёмно-температурной зависимости удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях и повышенных температурах. Экспериментальная часть работы содержит измерения электросопротивления ударно-сжатых образцов ванадия в диапазоне давлений до 70 ГПа и температур до 750 К. Проведены расчёты истории термодинамического состояния ударно-сжимаемого ванадия. Анализ экспериментальных результатов показал, что эффект насыщения удельного электросопротивления ванадия, имеющий место при атмосферном давлении в виде *s*-образной кривой *1* (см. Рис.1), сохраняется и при гигапаскальных давлениях в виде *s*-образных графиков *2*.

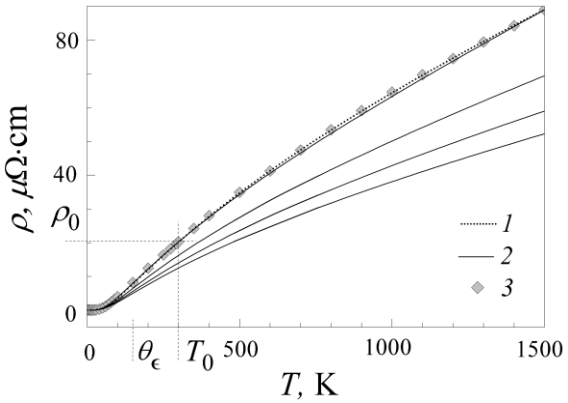



Рис.1 Высокотемпературные изобары удельного электросопротивления $\rho=\rho(V,T)$ ванадия. *1* – аппроксимация литературной экспериментальной атмосферной изобары $\rho=\rho(V_0,T)$, *2* – модельные изобары $\rho=\rho(V,T)$ ванадия при различных давлениях (сверху вниз) 0.0 ГПа, 20.0 ГПа, 40 ГПа и 60.0 ГПа, *3* – литературные [1] экспериментальные данные для атмосферной изобары.

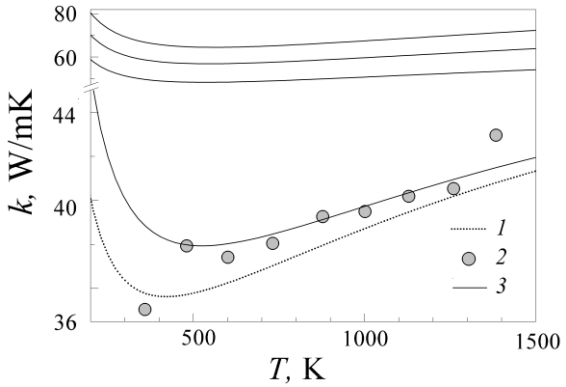



Рис.2 Высокотемпературные изобары суммарной (электронной $k_e$ и решёточной $k_l$) теплопроводности $k=k(V,T)$ ванадия. *1*– модельная изобара электронной составляющей теплопроводности $k_e$, *2* – литературные экспериментальные данные [2], *3* – модельные изобары $k=k(V,T)$ ванадия при различных давлениях (снизу вверх) 0.0 ГПа, 20.0 ГПа, 40 ГПа и 60.0 ГПа.

Обсуждается полуэмпирическая трактовка закономерностей объёмно-температурной зависимости электросопротивления и теплопроводности ванадия в протяжённой области давлений и температур.

Объёмно-температурная зависимость насыщения электросопротивления ванадия реконструирована в диапазоне давлений 20–60 ГПа.

Количественный прогноз температурно-барической зависимости коэффициента теплопроводности ванадия показан графиками *3* на Рис.2 в диапазонах давлений 0-60 ГПа и температур 500-1300 К

Работа выполнена в рамках Госзадания №124020600049-8.

## Литература

1. Desai P. D., James H. M., Ho C. Y. // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1984. – V.13. – P.1097–1130.
2. Воронин Л. К., Меркульев А. Н., Неймарк Б. Е. // ТВТ. – 1970. Т. 8, выпуск 4, С. 780-783.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.97

# РОЛЬ СОЛЬВАТАЦИИ И НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВАХ БИКАЛУТАМИДА В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

**Мололина А.А., Соборнова В.В., Белов К.В., Крестьянинов М.А., Ходов И.А.**

*Институт химии растворов им Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*

*E-mail: maa@isc-ras.ru*

Структура и упаковка молекул в элементарной ячейке кристалла играют важную роль в формировании твердых форм лекарственных соединений, поэтому исследование конформационных равновесий малых молекул активных фармацевтических ингредиентов представляет особый интерес для физической и фармацевтической химии. Выявление взаимосвязи конформационной лабильности малых молекул, а также особенностей сольватации с характеристиками процессов нуклеации открывает новые возможности для модификации существующих и разработки новых твердых форм лекарственных соединений с улучшенными свойствами. В настоящей работе выявлено влияние невалентных взаимодействий на распределение долей групп конформеров бикалутамида – лекарственного антиандрогенного соединения, используемого в комплексной терапии рака предстательной железы.

При помощи методов спектроскопии ядерного магнитного резонанса и данных квантово-химических расчетов установлено, что среда растворителя оказывает влияние на конформационную динамику исследуемого соединения. Данные, полученные из одно- ($^{1}$H, $^{13}$C) и двумерных ($^{1}$H-$^{13}$C HSQC, $^{1}$H-$^{13}$C HMBC) спектров, послужили надежной основой для интерпретации результатов спектроскопии ядерного эффекта Оверхаузера ($^{1}$H-$^{1}$H NOESY) – основного инструмента для количественной оценки долей групп конформеров. Проведен комплексный анализ конформационного состояния молекул бикалутамида в дейтерированных растворах различной полярности: бензоле ($C_6D_6$), хлороформе ($CDCl_3$), ацетонитриле ($CD_3CN$) и диметилсульфоксиде (ДМСО-д$_6$). Результаты исследования показали, что в ряду растворителей $C_6D_6$ – $CD_3CN$ – ДМСО-д$_6$ – $CDCl_3$ доля «закрытых» конформеров составляет 15.3 %, 60.4 %, 80.5 % и 94.8 % соответственно, тогда как доля «открытых» конформеров – 84.7 %, 39.6 %, 19.5 % и 5.2 % [1]. Дополнительные квантово-химические расчеты, выполненные с использованием методики QTAIM, подтвердили, что стабилизация «закрытых» и «открытых» конформеров бикалутамида обусловлена множественными невалентными взаимодействиями, которые претерпевают существенные изменения в присутствии молекул бензола, что приводит к «раскрытию» структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ № 24-23-00318).

## Список используемой литературы

[1] A.A. Mololina, I.A. Khodov Role of non-covalent interactions in the conformational stability of bicalutamide in different solvent environments: Insights from quantum-chemical calculations and NMR spectroscopy // *Journal of Molecular Liquids*, 2025, 423, 126921

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.98

# О ДИФФУЗИОННОМ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИИ УГЛЕРОДА В СТАЛИ ПРИ И ПОСЛЕ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ

**Нечаев Ю. С.[1], Шурыгина Н. А.[1], Черетаева А. О.[2], Александрова Н. М.[1], Филиппова В. П.[1]**

[1]*ЦНИИчермет им. И.П. Бардина, Москва, Россия,*

E-mail: yuri1939@inbox.ru

[2]*Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия*

Как показывает анализ [1, 2] данных ТАЗТ-ПИМ [3] (в т.ч. показанных на рис. 3 в [2]) для мартенситной стали, содержащей 0.85 ат.% С, при мартенситном превращении (МП) имеет место инициированное МП (аномально быстрое) диффузионное перераспределение атомов углерода из решетки мартенсита к образующимся дислокациям с плотностью $\rho \approx 3 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$, т.е. на расстояние порядка $\rho^{-1/2} \approx 10$ нм.

При этом время диффузии, очевидно, близко (по порядку величины) к времени МП ($\tau_{_МП}$), которое можно оценить как

$$\tau_{_МП} \approx (L_g/\vartheta_s) \quad (1)$$

где $L_g$ – размер исходных аустенитных зерен, $\vartheta_s$ – скорость звука в металле.

Отсюда получаем значение $\tau_{_МП} \approx 10^{-8}$–$10^{-9}$ с.

Скорость МП-деформации можно оценить как

$$\dot{\varepsilon}_{_МП} \approx (\delta/L_g \cdot \tau_{_МП}), \quad (2)$$

где $\delta \approx 10^{-1}$ нм – величина смещения атомов железа при МП.

Отсюда следует, что $\dot{\varepsilon}_{_МП} \approx 10^{3}$–$10^{4}$ с$^{-1}$.

Коэффициент аномально быстрой диффузии атомов углерода в мартенсите к дислокациям при МП можно оценить как

$$D_C^* \approx \left(\rho \cdot \tau_{_МП}\right)^{-1} \approx 10^{-3}\text{–}10^{-4}\ \text{см}^2\text{с}^{-1}, \quad (3)$$

что согласуется с известными экспериментальными данными об аномально быстрой диффузии при высокоскоростном (импульсном) деформировании металлов и может отвечать диффузионному механизму краудионного типа.

Можно показать [1, 2], анализируя данные ТАЗТ-ПИМ [3], что в последеформационной период (при комнатной температуре), т.е. после МП до установления равновесной концентрации углерода в напряженной решетке мартенсита по отношению к фазоподобным наносегрегациям на дислокациях [1–5] (см. рис. 3 в [2]), диффузионное перераспределение атомов углерода в мартенсите происходит с нормальным коэффициентом диффузии ($D_C \approx 10^{-17}$ см$^2$с$^{-1}$), отличающимся от отмеченной выше величины $D_C^*$ на 12–13 порядков.

## Список литературы

1. Нечаев Ю.С. // УФН. 2008. Т. 178. № 7. С. 709–726.
2. Нечаев Ю.С. // УФН. 2011. Т. 181. № 5. С. 483–490.
3. Wilde J., Cerezo A., Smith G.D.W. // Scripta Materialia. 2000. V. 43. #1. P. 39–45.
4. Нечаев Ю.С. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 12. С. 90–100.
5. Нечаев Ю.С. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2025. № 5 (в печати).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.99

# Туннельная спектроскопия пниктидов Na(Fe,Co)As и $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии

**Никитченков И.А.[1,2], Кузьмичев С.А.[1,2], Перваков К.С.[2], Власенко В.А.[2], Морозов И.В. [4], Шилов А.И.[2], Рахманов Е.О[4,2], Ильина А.Д.[2,3], Кузьмичева Т.Е.[2]**

*[1]МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

*[3]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

*[4]Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

Соединения $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ (семейство 122) и Na(Fe,Co)As (семейство 111) относятся к классу железосодержащих ВТСП. В стехиометрическом составе оба соединения имеют дальний антиферромагнитный порядок. При электронном допировании возникает сверхпроводящая фаза с максимальной критической температурой $T_c \approx 21$ К и 22 К для $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ и Na(Fe,Co)As соответственно [1, 6]. На поверхности Ферми обоих соединений присутствуют дырочные зоны около Г-точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около М-точки.

Мы исследовали монокристаллы $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ недо- и передопированных составов с $x = 0.06–0.14$ и $T_c$ в диапазоне 12–21 К, а также монокристаллы номинального недодопированного состава $NaFe_{0.979}Co_{0.021}As$ с $T_c \approx 22$ К. В образцах при $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [2] создавались контакты на микротрещине типа сверхпроводник-барьер-сверхпроводник (ScS) с режимом пролета квазичастиц, близком к баллистическому.

На полученных ВАХ и dI(V)/dV наблюдалась не относящаяся к эффекту некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE) [3] нелинейность, проявляющаяся как в СП, так и в нормальном состоянии. Положения особенностей и форма нелинейности dI(V)/dV-спектров практически не зависят от температуры в диапазоне 4.3–50 К. При движении вдоль фазовой диаграммы энергетические положения особенностей нелинейности на dI(V)/dV меняются с содержанием Ni. Ожидается исчезновение данных особенностей и линеаризация dI(V)/dV-спектра в сильно передопированном несверхпроводящем составе при $x \approx 0.22$ [4].

На dI(V)/dV-спектрах нормального состояния в $NaFe_{0.979}Co_{0.021}As$ обнаружены минимумы при смещении $V_1^* \approx 26.6$ мВ, $V_2^* \approx 21.2$ мВ. В отличии от $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$, нелинейность в 111-пниктиде содержит пик dI(V)/dV при малых смещениях eV. Для Na(Fe,Co)As передопированного состава нелинейность спектров не наблюдалась.

Нелинейная форма dI(V)/dV-спектров воспроизводится и не может быть вызвана перегревом контактной области, геометрическими резонансами или структурой конкретного монокристалла, а имеет, напротив, объемную природу, связанную с внутренними свойствами материала [4].

Наблюдаемый эффект может быть обусловлен [5] особенностями плотности электронных состояний $N(E_F) \neq \text{const}$ вблизи уровня Ферми.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 22-72-10082.

## Литература

1. Xingye Lu. Phase Diagram and Magnetic Excitations of $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$: A Neutron Scattering Study.— Springer Theses, 2017.
2. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // ФНТ. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
3. Kuemmel R. [et al.] // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 3992.
4. Никитченков И.А., Кузьмичев С.А., Ильина А.Д. [et al.] // ЖЭТФ. 2024. Т. 166. С. 834
5. Giaever I., Megerle K. // Phys. Rev. 1961. Vol. 112. P. 1101.
6. Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А. // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114, С. 685.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.100

# Динамика волны зарядовой плотности при воздействии ПАВ

**Никитин М.В., Покровский В.Я., Зыбцев С.Г., Салтыкова Д.Ю., Кай Д.А., Кашин В.В., Колесов В.В.**

*ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия,* nikitin@cplire.ru

Механические свойства квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности (ВЗП) отражают уникальную природу этого коллективного электронного состояния [1]. В электрических полях выше порогового ВЗП может скользить, перенося ток, что проявляется в резком росте проводимости. Кроме того, ВЗП можно рассматривать как электронный кристалл внутри образца, способный деформироваться в электрическом поле. При этом деформируется и сам образец. С другой стороны, деформация образца может передаваться ВЗП и влиять на её свойства [1]. Ранее в квазиодномерном проводнике $TaS_3$ наблюдалось влияние механических вибраций, возбуждаемых с помощью пьезоактюаторов, на динамику ВЗП [2]. Обнаружена синхронизации ВЗП с механическими вибрациями на частотах до 1 МГц: на ВАХ наблюдались ступеньки Шапиро (СШ).

В данной работе для синхронизации ВЗП мы использовали поверхностные акустические волны (ПАВ), возбуждаемые в кристаллах ниобата лития. Нитевидный образец $TaS_3$ фиксировался на поверхности кристалла. Нанесенная на ниобат лития система встречно-штыревых преобразователей (ВШП) позволила возбуждать резонансные моды ПАВ частотой ~1–20 МГц с длиной волны ~3 мм, сравнимой с длиной образца (700 мкм). Измерения ВАХ проводились при температуре 120 К.

Были обнаружены особенности на ВАХ при подаче напряжений на ВШП на частотах резонансных мод пластины ниобата лития: наблюдалось подавление порогового поля $V_t$ и возникновение СШ. В отличие от «обычных», электрических, СШ, наблюдавшихся при тех же токах ВЗП, они были заметно шире, на них можно было различить несколько пиков. Аналогичное отличие механических СШ от электрических наблюдалось нами ранее в [2]. Более того, амплитудные зависимости $V_t$ при подаче напряжения на образец и на ВШП качественно отличаются друг от друга: если при подаче напряжения на образец наблюдается тенденция к осцилляциям $V_t$, характерным для ВЗП с высокой когерентностью, с ростом напряжения на ВШП $V_t$ спадает плавно, с тенденцией к насыщению. Согласно [3,4], именно так должны отличаться зависимости при механическом и электрическом воздействии на ВЗП.

Таким образом, нами впервые наблюдалось воздействие акустического поля ПАВ на динамику ВЗП. Вместе с тем, для окончательного прояснения вопроса требуются дальнейшие исследования.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 25-29-00876.

## Литература

1. Покровский В.Я., Зыбцев С.Г., Никитин М.В., Горлова И.Г., Насретдинова В.Ф., Зайцев-Зотов С.В. // УФН. – 2013 – Т. 183 – С. 33-54.
2. Nikitin M.V., Zybtsev S.G., Pokrovskii V.Ya. and Loginov B.A.// Appl. Phys. Lett. – 2021. – V. 118 – P. 223105.
3. Никитин М.В., Покровский В. Я., Кай Д.А., Зыбцев С.Г. // Письма в ЖЭТФ. – 2023 - Т 118 - № 11. - С. 854-859.
4. Y. Funami, K. Aoyama. // Phys. Rev. B. - 2023. - V. 108 - №10 – P. L100508.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.101

# ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ОСНОВАНА НА САМООБМАНЕ.

**Никулов А.В.**

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия,* nikulov@iptm.ru

Теории сверхпроводимости [1,2] является выдающимся достижением теоретической физики двадцатого века. Благодаря постулату Ландау, теория Гинзбурга-Ландау [1] смогла объяснить многочисленные явления наблюдаемые в сверхпроводниках, несмотря на противоречие макроскопических квантовых явлений принципу соответствия [3]. К сожалению, эта теория основана на самообмане, который был спровоцирован всеобщей верой в термодинамику. Согласно этой вере, переход в сверхпроводящее состояние происходит когда свободная энергия сверхпроводящего состоянии $F_s$ становиться меньше чем в нормального $F_n$: $F_{s0} < F_{n0}$ при $T < T_c$, $H = 0$; $F_{sH} = F_{nH}$ при $T < T_c$, $H = H_c$. Эта вера спровоцировала ложное утверждение Гортера и Казимира [4], что работа источника мощности соленоида создает энергию $-HM/2$ намагниченности $M = B - \mu_0 H$, а не энергию магнитного поля $HB/2$.

Ложность утверждения Гортера и Казимира [4] настолько очевидна, что вызывает удивление, что оно было сделано физиками: не нужно совершать никакой работы, чтобы создать магнитное поле в объеме пустого соленоида, где $M = B - \mu_0 H = 0$. Но несмотря на очевидную ложность, авторы большинства книг по сверхпроводимости следовали Гортеру и Казимиру [4], так как равенство $F_{sH} = F_{nH}$ при $T < T_c$, $H = H_c$ можно получить из неравенства $F_{s0} < F_{n0}$ при $T < T_c$, $H = 0$ только с помощью их утверждения, согласно которому в магнитном поле увеличивается свободная энергия сверхпроводящего состояния $F_{sH} = F_{s0} + \mu_0 H^2/2$, а нормального состояния не изменяется $F_{nH} = F_{n0}$. Авторы только немногих книг, в основном будущие Нобелевские лауреаты [5-7], не последовали ложному утверждению Гортера и Казимира [4]. Но вера в термодинамику заставила даже этих выдающихся физиков заниматься самообманом. В.Л Гинзбург [5] и П. де Жен [6] должны были забыть, что при фазовом переходе свободная энергия изменяться не может. А.А. Абрикосов, который не забыл об этом, должен был использовать уловку, которая спровоцировала противоречие с законом сохранения энергии в его книге [7].

Самообман из-за веры в термодинамику спровоцировал регресс в понимании термодинамики из-за которого никто много лет не замечали, что теория сверхпроводимости [1,2] противоречит второму закону термодинамики [8,9]. В статьях [10] обращается внимание на продолжающийся регресс в понимании термодинамики среди теоретиков.

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-00295-25-00 .*

## Литература

1. Гинзбург В. Л., Ландау Л.Д. // ЖЭТФ - 1950 - Т. 20 - С. 1064.
2. Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J. R. // Phys. Rev. - 1957 – V. 106 – P. 162.
3. Nikulov A.V. // Chinese Journal of Physics – 2024 – V. 92 – P. 270283.
4. Gorter C.J., Casimer H. // Physica - 1934 - V. 1 - P. 306.
5. Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость - Издательство Академии наук СССР, Москва-Ленинград 1946.
6. П. де Жен, Сверхпроводимость металлов и сплавов - Мир М.1968
7. Абрикосов А.А. Основы теории металлов - Наука, М., 1987
8. Nikulov A.V. // Entropy – 2022 - V. 24 – P. 83.
9. Hirsch J.E. // Physica C – 2025 - V. 659 – P. 1354618
10. Nikulov A.V. // EPL - 2021 - V. 135 – P. 17002; Phys. Scr. - 2024 - V. 99 - P. 107002

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.102

# О ПРОТИВОРЕЧИЯХ В СОВРЕМЕННОЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.

**Никулов А.В.**

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия,* nikulov@iptm.ru

Современная теоретическая физика переживает период схоластики. Из-за ее грандиозных успехов в 20-го веке большинство теоретиков скорее верят чем понимают то, чему их учили в «школе», не замечая даже очевидных противоречий в успешных теориях. Они игнорируют противоречие квантовой механики с реализмом, не понимая, в отличие от Эйнштейна, что реализм это предпосылка любой разновидности физического мышления. В статье [1] на примере ошибок сделанных при выводе the GHZ theorem, один из авторов которой в 2022 году получил Нобелевскую премию, демонстрируется что отказа от реализма спровоцировал деградация физического мышления. Никто в течении многих лет не замечал противоречия общепризнанной теории сверхпроводимости второму закону термодинамики [2].

В данном докладе обращается внимание на не менее очевидные противоречия. Одно из этих противоречий я заметил в 2014 году благодаря Энтони Леггетт, который на вопрос соавтора статьи [3] «Почему в теории потокового кубита не учитывается энергия магнитного момента в магнитном поле?» ответил: "*But when we go over to the Hamiltonian formalism by the standard 'canonical' procedure, the total Hamiltonian* $(1/2m)(p\text{-}eA)^2$ *turns out to be just the kinetic energy* $mv^2/2$*! Where has the 'magnetic' energy gone? Perhaps our naive tendency to identify the Hamiltonian with the 'energy' is (as in some cases involving time-dependent forces) misleading?*" Вызывает удивление, что я не мог сам, без Нобелевского лауреата, понять, что из кинетической энергии можно вывести только кинетическую энергию.

Но еще большее удивление вызывает тот факт, что большинство теоретиков до сих пор не хотят этого понимать, хотя в статье [4] обращается внимание на то, что квантовая механика не может описать разные квантовые явления используя одно определения гамильтониана и что Дирак в 1930 году использовал неканоническое определение гамильтониана $p^2/2m= (mv + eA)^2/2m$ для описания эффекта Зеемана [5]. В качестве самообмана многие теоретики используют утверждение, что гамильтониан Дирака [5] отличается от канонического гамильтониана только знаком перед зарядом. Это утверждение является ложным. Дирак не мог не знать в 1930 году, что из первого члена канонического классического гамильтониана $(p\text{-}eA)^2/2m = mv^2/2$ можно вывести только кинетическую энергию. Иллюзия, что гамильтониан Дирака отличается только знаком стала возможной потому, что Дирак использовал в книге [5] неканоническое определение не только гамильтониана, но и оператора импульса: этому оператору соответствует $mv = p - eA$ согласно Дираку и $p = mv + eA$ согласно определению ставшему каноническим. В докладе будет обращено внимание также на другие противоречия теоретической физики спровоцированные верой в универсальное описание всех квантовых явлений.

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-00295-25-00 .*

## Литература

1. Nikulov A.V. // Found. Phys. – 2023 – V. 53 – P. 51.
2. Nikulov A.V. // Entropy – 2022 - V. 24 – P. 83.
3. Gurtovoi V.L., Nikulov A.V. // Physica C – 2015 – V. 516 – P. 50.
4. Nikulov A.V. // Quantum Stud.: Math Found. – 2016 - V. 3 – P. 41.
5. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики - Москва «Наука» 1979

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.103

# ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ НЕ ПРОТИВОРЕЧИТ РЕАЛИЗМУ

**Никулов А.В.**

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия,* nikulov@iptm.ru

Объясняя свое отрицательное отношение к квантовой механики Эйнштейн говорил: «Мне хотелось бы думать, что Луна существует когда я на нее не смотрю». Автор статья «Quantum mechanics: No moon there» [1] утверждал, что эксперименты с квантовыми битами на основе сверхпроводящих структур [2] доказали, что «The moon - a small moon, admittedly - is not there». Это абсурдное утверждение является следствием слепой веры в квантовую механику, отказа создателей квантовой механики от реализма и непонимания большинством современных физиков смысла реализма. Они, в отличии от Эйнштейна, не понимают, что реализм это регулятивный принцип нашего разума, без которого эмпирическое познание невозможно [3].

Этой ‘философии’ не понимают даже выдающиеся физики, такие как Энтони Леггетт, статья которого «Quantum mechanics versus macroscopic realism: Is the flux there when nobody looks?» [4], спровоцировала абсурдное утверждение автора [1]. Создатели квантовой механики отказались от реализма из-за невозможности описать некоторые явления, такие как эффект Штерна – Герлаха, как проявление реальности. Невозможность такого описания доказывает no-go theorem предложенной фон Нейманом в 1932 году. Джон Белл и другие, не совсем обоснованно решили, что «*The proof of von Neumann is not merely false but foolish!*» [5]. Белл считал теорему фон Неймана ложной [6] из-за отсутствия в ней требования локальности. Неравенства Белла, no-go theorem Белла [7], основана на требование локальности, которое позволяет отличить воздействия сознания наблюдателя, которое нелокально, от воздействия измерительного прибора, которое должно быть локальным.

Неравенства Леггетта — Гарга [4] выведены без требования локальности. Более того, макроскопические квантовые явления не могут противоречить реализму, так как, как справедлива заметил Ричард Фейнман в своих знаменитых лекций по физике, при их описании используется реалистическое понимание волновой функции, как описания реальной плотности, предложенное Шредингером. Коллапс волновой функции, согласно этому пониманию, невозможен, так как реальная плотность, в отличии от вероятности наблюдения, не может изменяться мгновенно и нелокально. Коллапс не является необходимым для описания не только макроскопических квантовых явлений, но и всех явлений наблюдаемых в физики конденсированных состояний. Так как идея квантового компьютера основана на противоречии реализму, кубиты на сверхпроводниках невозможны из-за отсутствия противоречия макроскопическому реализму [8].

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-00295-25-00 .*

**Литература**

1. Mooij J. E. // Nature Phys. – 2010 – V.6 – P. 401.
2. Palacios-Laloy A. et al. // Nature Phys. – 2010 – V.6 – P. 442.
3. Nikulov A.V. // Found. Phys. – 2023 – V. 53 – P. 51.
4. Leggett, A. J. , Garg, A. // Phys. Rev. Lett. - 1985 - V.54 – P. 857.
5. Mermin N. D. // Rev. Mod. Phys. – 1993 – V. 65 – P. 803.
6. Bell J.S. // Rev. Mod. Phys. – 1966 – V. 38 – P. 447.
7. Bell J.S. // Physics – 1964 – V. 1 – P. 195.
8. Аристов В.В., Никулов А.В. // Микроэлектроника – 2018 – Т. 170 – С. 56.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.104

# Оболочечная структура примесных нанокластеров, сформированных в холодной гелиевой струе, содержащей различные виды примесей

**Пельменёв А.А.[1], Болтнев Р.Е.[1,2], Быхало И.Б.[1], Крушинская И.И.[1], Хмеленко В. В.[3]**

[1]*Филиал федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Черноголовка, Россия*

E-mail pelmenevaa@gmail.com

[2]*Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

[3]*Техасский университет A&M, Колледж-Стейшен, США*

При конденсации струи газообразного гелия, содержащего различные примесные частицы (атомы более тяжёлых инертных газов, молекулы водорода, азота), в сверхтекучем гелии в струе наблюдается температурный градиент ≈ 50 К/см. При предварительном прохождении струи через зону электрического разряда примесные молекулы диссоциируются на атомы. По мере охлаждения струи происходит агрегация примесных частиц в кластеры, при этом в первую очередь агрегируют наиболее тяжёлые частицы, образующие ядра нанокластеров [1,2], на которые в дальнейшем захватываются более лёгкие частицы и уже в жидкости вокруг примесного кластера образуется оболочка твёрдого гелия. Характерные размеры получаемых таким образом нанокластеров составляют от 5 до 10 нм [2]. Стабилизация в нанкокластерах атомов водорода/дейтерия и азота в основном состоянии позволяет получать информацию об их окружении методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [3,4]. Образование в кластерах возбуждённых атомов и молекул азота в результате термо- либо фотостимулированной рекомбинации стабилизированных радикалов позволяет получать дополнительную информацию методом эмиссионной оптической спектроскопии [5,6].

В результате выполненных экспериментальных исследований было установлено, что атомы водорода/дейтерия и азота стабилизируются главным образом на поверхности самой лёгкой внешней оболочки кластера (до 80 % от общего количества стабилизированных атомов). При этом средние и локальные концентрации атомов азота достигают, соответственно $3 \cdot 10^{19}$ и $10^{21}$ см$^{-3}$ [4]. В зависимости от состава смеси внешней оболочкой может быть слой молекулярного водорода/дейтерия, неона, молекулярного азота, аргона либо криптона.

## Литература

1. Danylchenko O.G., Doronin Yu.S., Kovalenko S.I., Samovarov V.N. // JETP Lett. – 2006. – V. 84. – P. 324−328.
2. Kiryukhin V., Bernard E.P., Khmelenko V.V., Boltnev R.E., Krainyukova N.V., and Lee D.M. // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 98. – P. 195506.
3. Boltnev R.E., Bernard E.P., Jarvinen J., Krushinskaya I.N., Khmelenko V.V., Lee D.M. // J. Low Temp. Phys. – 2010. – V. 158. – P. 468–477.
4. Meraki A., McColgan P.T., Boltnev R.E., Lee D.M., and Khmelenko V.V. // J. Low Temp. Phys. – 2018. – V. 192. – P. 224–240.
5. Khmelenko V.V., Krushinskaya I.N., Boltnev R.E., Bykhalo I.B., Pelmenev A.A., and Lee D.M. // Low Temp. Phys. – 2012. – V. 38. – P. 688–699.
6. Krushinskaya I.N., Boltnev R.E., Bykhalo I.B., Pelmenev A.A., Khmelenko V.V., and Lee D.M. // Low Temp. Phys. – 2015. – V. 41. – P. 419–423.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.105

# Взаимодействие волнового и вихревого движения на поверхности сверхтекучего гелия

**Пельменёв А.А.[1,2] Левченко А.А.[2], Межов-Деглин Л.П.[2]**

*[1] Филиал Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Черноголовка, Россия*

*E-mail: pelmenevaa@gmail.com*

*[2]Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН*

В работах [1,2,3] экспериментально исследовались условия возникновения на свободной поверхности сверхтекучего He-II неустойчивости, порождаемой постоянным или переменным потоком тепла $Q$ в объеме. Квантовый аналог — неустойчивость Кельвина – Гельмгольца, которая сопровождается появлением низкочастотных осцилляций на поверхности, развивается, когда максимальная скорость противотока нормальной и сверхтекучей компонент под поверхностью достигает некоторого порогового значения.

В представляемых в докладе экспериментах изучается взаимодействие волнового и вихревого движения на поверхности и в объеме сверхтекучего гелия. Исследуются особенности взаимодействия (взаимного влияния) волновой неустойчивости Фарадея на поверхности жидкости и квантовой неустойчивости Кельвина – Гельмгольца, создаваемой противотоком в объеме нормальной и сверхтекучей компонент гелия.

Эксперименты в сверхтекучем гелии проведены при температурах 1.5 К - 2.1 К, при возбуждении фарадеевских волн на поверхности волн в гравитационно - капиллярном интервале. Исследованы закономерности возникновения неустойчивости в зависимости от мощности тепловых потоков и интенсивности вертикальных колебаний ячейки.

Зарегистрированы и изучены спектры низкочастотных колебаний поверхности сверхтекучего гелия, в условиях одновременного воздействия поверхностных волн и тепловыделений в объеме гелия (волновой неустойчивости Фарадея на поверхности жидкости и квантовой неустойчивости Кельвина – Гельмгольца).

На основании полученных результатов предложен механизм возникновения неустойчивости поверхности сверхтекучего He-II в условиях волновой неустойчивости Фарадея в присутствие противотока в объеме нормальной и сверхтекучей компонент гелия.

## Литература

1. I. A. Remizov, A. A. Levchenko, L. P. Mezhov-Deglin, J Low Temp Phys (2016) 185:324–338

2. Leonid Mezhov-Deglin, Alexander Pel’menev, Alexander Levchenko, Materials Letters 238 (2019) 226–228

3. Л. П. Межов-Деглин, А. А. Левченко, А. А. Пельменёв, И. А. Ремизов ЖЭТФ, 2019, том 156, вып. 4 (10), с. 671–688

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.106

# Кинетика растекания и пропитки Fe расплавами системы Ag-Cu: факторы, определяющие скорость движения расплава по внешней поверхности и внутри порового пространства

**Петров И.С., Жевненко С.Н.**

*Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва, Россия, E-mail: ioannespetrovus@gmail.com*

В данной работе представлены методы и результаты прямых измерений кинетики растекания, установления контактного угла смачивания и скорости капиллярного впитывания в пористую среду в системе Fe(тв.)–AgCu(ж.). Измерения были проведены на оборудовании, сконструированном для прямых скоростных видео (до 10000 к/с) и термовизионных (до1000 к/с) наблюдений взаимодействия расплавов с твердыми телами при высоких температурах (до 2000 °C) в вакууме ($10^{-5}$ мм.рт.ст.) [1]. Сплошные подложки были изготовлены из чистого литого железа (99,995 ат. % Fe). Пористые Fe подложки были получены путем спекания сфероидизированного порошка железа ОСЧ-6-2 (со средним размером частиц 5 мкм) при температуре 800°C в атмосфере смеси аргона и 10% водорода в течение часа. В качестве расплавов были использованы серебро (99,999 ат. % Ag), медь (99,999 ат. % Cu) и их бинарные сплавы. Контактные углы на твердой железной подложке варьируются от <9° (для чистой меди) до 52° (для чистого серебра). Скорость движения жидкого расплава внутри пористой подложки составляла от 0,5 мм/с (для чистого серебра) до 416 мм/с (для чистой меди). Расплавы промежуточных составов демонстрируют закономерное нелинейное изменение скоростей растекания и впитывания. Результаты по кинетике впитывания были проанализированы в рамках классической модели [2] и предложенной в наших работах [3]. Обсуждены различия скоростей движения жидкости по плоской поверхности и внутри порового пространства.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSME-2023-0007.

## Литература

1. S. N. Zhevnenko, M. V. Gorshenkov, I. S. Petrov, Journal of Alloys and Compounds. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt., 860, 157886 (2021).
2. E.W. Washburn, The dynamics of capillary flow, Phys. Rev. 17 (1921) 273.
3. Petrov I. S., Zhevnenko S. N. Capillary infiltration measurements by finite size drop method: Wetting, spreading and infiltration of liquid silver in porous iron // Journal of Alloys and Compounds. – 2025. – Т. 1010. – С. 177913.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.107

# Продольные дислокации несоответствия в двухслойной нанопроволоке

**Петров Д. А.[1], Гуткин М. Ю.[1-3]**
[1]*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия,*
petrov_d_a@ipme.ru
[2]*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

Неоднородные кристаллические нанопроволоки представляют широкий класс наногетероструктур, привлекающих интерес в связи с их уникальными функциональными свойствами [1,2]. Одна из ключевых проблем при проектировании наноструктур – релаксация напряжений несоответствия (НН), неизбежно возникающих при сопряжении двух разных кристаллических решеток [2]. В настоящей работе рассмотрена континуальная модель дислокационного механизма релаксации НН в нанопроволоках определенного типа – слоистых нанопроволоках (рис. 1а).

В рамках построенной модели появление дислокаций несоответствия на границе раздела считается возможным, если при этом уменьшается общая энергия системы (количество и расположение дислокаций минимизирует энергию на единицу площади межфазной границы). Расчет энергии производился с помощью известного решения задачи теории упругости о продольной дислокации в цилиндре (см. [2]), а также с помощью полученного в данной работе решения для полей несоответствия в двухслойном цилиндре.

Показано (рис. 1б), что при заданной толщине верхнего слоя $h = R - y_0$ и увеличении параметра несоответствия $f$ релаксация в нанопроволоке начинается ожидаемо позже, чем, например, в тонкой пленке на толстой подложке. С другой стороны, при достаточно высоком уровне несоответствия плотность дислокаций практически не зависит от конфигурации.

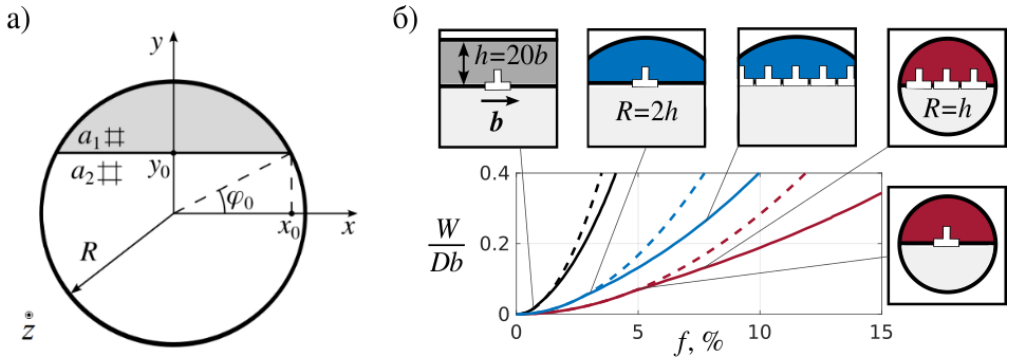



Рис. 1. а) Поперечное сечение двухслойной нанопроволоки с модулем упругости $G$ и коэффициентом Пуассона $\nu$. б) Зависимость энергии на единицу площади межфазной границы от параметра несоответствия $f = 2(a_2–a_1)/(a_2+a_1)$ при $h = 20b$, где $b$ – величина вектора Бюргерса, $D$=G/[$2\pi$(1–$\nu$)]. Штрихом обозначены те же зависимости без учета релаксации.

## Литература

1. McDermott S., Lewis R.B. // ACS App. Nano Mat. – 2021. – Vol. 4. – No. 10. – P. 10164-10172.
2. Романов А.Е., Колесникова А.Л., Гуткин М.Ю. // ПММ. – 2022. – Т. 86. – № 4. – С. 527-550.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.108

# Некоторые оптические свойства монокристаллов хлорида и бромида серебра

**С.М. Пилюшко, К.С. Зараменских, М.С. Кузнецов,**
**Г.В. Полякова, А.Р. Корнеева**
*АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, Москва, Россия*, vorpat2402@bk.ru

Монокристаллы галогенидов серебра AgCl, AgBr и их твердые растворы (состава системы $AgCl_x$–$AgBr_y$) впервые предложены в качестве оптических инфракрасных материалов в 1942-43 г.г. Долгое время они не находили серьезного практического применения из-за ряда особенностей [1].

Интерес к галогенидам серебра как к оптическому материалу возник на базе волоконно-оптической лазерной хирургии. Применимость галогенидов серебра в области медицины обуславливается рядом свойств, а именно: прозрачность в инфракрасной, не токсичность, малорастворимость в воде, дезинфицирующим свойствами и удовлетворительным прочностным характеристиками [2]. Такое сочетание характеристик (широкий спектральный диапазон и химическая устойчивость) также позволяет использовать их при изготовлении объемных оптических элементов (окна, линзы, призмы, полупрозрачные зеркала) для приборов инфракрасной и лазерной техники ИК-диапазона (в частности, для работы с излучением CO- и $CO_2$ - лазеров), а также для изготовления оптического волокна методом экструзии [3].

На сегодняшний день оптические характеристики галогенидов серебра изучены неокончательно, либо же данные, которые удалось найти, являются достаточно устаревшими. Исследования галогенидов серебра и по сей день является актуальной темой для различного рода научно-исследовательских работ ввиду широкой возможности их применений как в видимом, так и в ближнем и среднем ИК-диапазоне.

В работе получены спектральные зависимости образцов хлорида и бромида серебра толщиной 1 мм и 20 мм в поляризованном и неполяризованном свете диапазоне от 200 нм до 2500 нм. Исследовано влияние послеростовых изотермических отжигов в течение 20 часов при температуре 200 $^oC$ на оптические свойства кристаллов. В случае хлорида серебра отжиги не оказали сильного влияния. Спектральное пропускание образцов бромида серебра увеличилось примерно на 7 %. Рассчитаны спектральные зависимости показателей поглощения исследуемых кристаллов. На измеряемом диапазоне поглощение составляет менее 5 $см^{-1}$.

Экспериментальная часть выполнена на оборудовании АО «Гиредмет» и аккредитованной испытательной лаборатории МУИЛ МПМиД «Монокристаллы и заготовки на их основе».

## Литература

1. Бутвина Л.Н, Бутвина А.Л, Загороднев В.Н. и др. // Фотон-экспресс. – 2011. – № 6(94). – С. 45-46.
2. Пилюшко С.М., Умнов В.О, Зараменских К.С. и др. // Оптические технологии, материалы и системы ("Оптотех 2022"): Сборник докладов конференции, Москва, 5–10 декабря 2022 года. – М: МИРЭА, 2022. – С. 293-298.
3. Лисицкий И.С., Голованов В.Ф., Полякова Г.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. –2003. –№ 7. – С. 20-23.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.109

# Локализованный поверхностный плазмонный резонанс в квазиупорядоченном нанокомпозите Bi/GaAs

**Поленок Е.Д.[1,2], Берт Н.А.[2], Иванов А.А.[2], Преображенский В.В.[3], Путято М.А.[3], Семягин Б.Р.[3], Снигирев Л.А.[2], УшановВ.И.[2], ЯговкинаМ.А.[2], Чалдышев В.В.[2]**

*[1]СПБПУ Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*
*[2]ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
*[3]ИФП СО РАН им .А.В. Ржанова, Новосибирск, Россия*

Локализованный поверхностный плазмонный резонанс позволяет сконцентрировать электромагнитное поле на субволновых масштабах и усилить взаимодействие света с веществом. В полупроводниках это явление можно реализовать, если создать систему плазмонных наночастиц в полупроводниковой матрице. Для дополнительного усиления эффекта систему можно сделать периодической так, чтобы в области плазмонного резонанса реализовывался еще и брэгговский резонанс.

В данном докладе мы сообщаем о первой успешной реализации плазмонной квазибрэгговской решетки, состоящей из 24 слоев наночастиц Bi, сформированных в матрице GaAs.

Исследованные образцы получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Были проведены электронно-микроскопические и рентгеноструктурные исследования, в которых определены структурные и геометрические параметры нанокомпозита. В частности, характерный размер наночастиц составил 10 нм.

На рис.1 представлены экспериментальные (а) и расчетные (б) спектры отражения света, падающего под различными углами. Расчёт выполнен методом матриц переноса по теории Ми. В расчёте использовалась данные структурных исследований. Диэлектрические проницаемости компонент нанокомпозита находились по модели Адачи [1] и из расчётов *ab initio* Ушанова и др.[2].

Спектры отражения демонстрируют квазибрэгговские осцилляции в спектральной области 870-1100 мкм. Со стороны коротких длин волн эта область ограничена окном прозрачности матрицы GaAs, определяемой величиной $E_g$. В длинноволновой области затухание осцилляций связано с дисперсией диэлектрической функции Bi. А именно, на длинах волн, больших 1100 нм, система наночастиц Bi в GaAs перестает поддерживать плазмонный резонанс.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20012, https://rscf.ru/project/24-22-20012/.*

*[1]Adachi S., J.Appl.Phys.**58**, R1-R29(1985).*
*[2] Ushanov V. I. et al.,Nanomaterials**14**, 109(2024).*

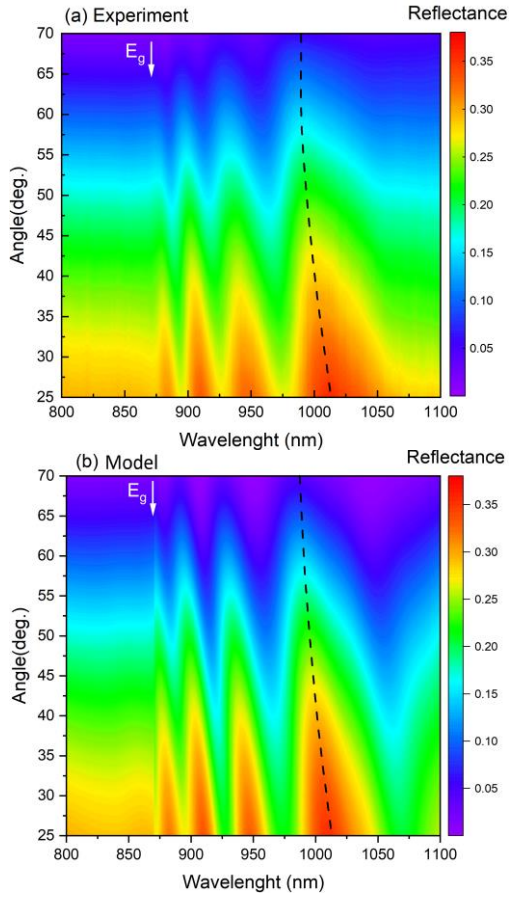



*Рис.1. Экспериментальные (а) и расчётные (b)спектры отражения света от 24 слоёв наночастиц висмута в матрице арсенида галлия при s-поляризации и температуре 300К. Максимумы отражения соединены штриховой линией.*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.110

# Экспериментальное исследование затухания вихревого движения на поверхности воды разной глубины

**Поплевин А. В.**
*Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Роосия*
E-mail: faraldos@issp.ac.ru

В работе представлены результаты экспериментов по изучению затухания вихрей, возникающих на поверхности воды при взаимодействии взаимно перпендикулярных поверхностных волн [1]. Это взаимодействие приводит к формированию решётки вихрей [2], а при высоких амплитудах — к возникновению крупномасштабных вихрей размером, сопоставимым с длиной ячейки [3].

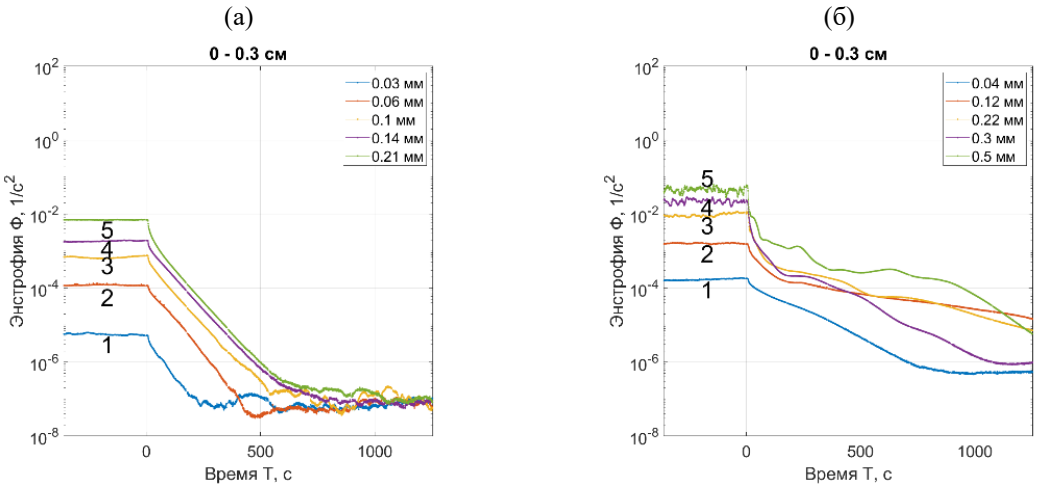



Рисунок 1. зависимость энстрофии вихревого движения в диапазоне волновых чисел 0 – 0.3 см$^{-1}$ от времени $E_к(t)$ при постоянной накачке волнами разной амплитуды и после ее выключения на глубине а) 2 см и б) 19 см.

В зависимости от глубины жидкости наблюдаются два режима: при глубокой воде (19 см) затухание определяется объемным трением, при мелкой (2 см) — трением о дно. На мелкой воде после выключения накачки возникает один крупный вихрь, энергия и энстрофия затухают экспоненциально. На глубокой воде формируются два вихря, но экспоненциальный характер убывания сохраняется лишь для энергии в ограниченном диапазоне волновых чисел. В остальных случаях зависимости энергии и энстрофии становятся немонотонными из-за взаимодействия с объёмными течениями.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-72-30006).

## Литература

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. 5.
2. Filatov S.V., Khramov D.A., Levchenko A.A. // JETP Lett. – 2017. – Vol. 106. – P. 330–335.
3. Филатов С.В., Поплевин А.В., и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2022. – № 12. – С. 53–64.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.111

# Топография сколотой поверхности монокристаллов $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Ch_2$ (Ch = S, Se, Te)

**М.С. Постников[1*], А.Ю. Кузнецова[1], А.И. Меренцов[1], Ю.В. Корх[1], Е.В. Таркаева[2], А.Н. Титов[1]**

*[1]Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
*[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*
**e-mail: mithanya0403@gmail.com*

Одним из способов варьирования электронной структуры дихалькогенидов переходных металлов является замещение по подрешетке металла. При синтезе материалов $MCh_2$ (M = Ti, Zr) обнаружено, что растворение компонентов происходит за счет растворения слоев $MCh_2$, а не атомов. Примечательно, что структурные слои обладают взаимным электрическим зарядом, что является ключевым фактором формирования однородного монокристалла [1, 2]. Анализ рельефа этих структурных элементов особенно важен для изучения того, как замена халькогена влияет на поверхностную морфологию в системе соединений $Ti_{0.5}Zr_{0.5}S_2$, $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Se_2$, $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Te_2$. Полученные топографические особенности могут послужить основой для разработки различных гетероструктур.

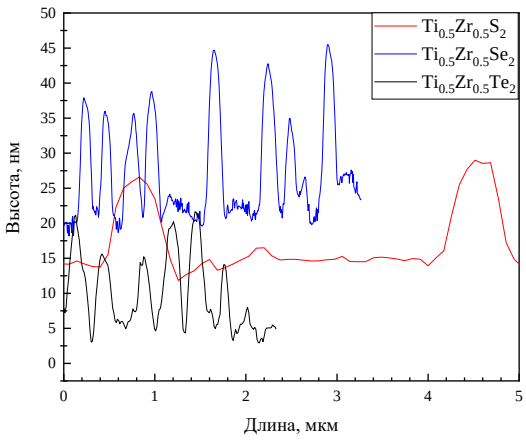



Рисунок 1 – Топография поверхности монокристаллов. Левый рисунок – $Ti_{0.5}Zr_{0.5}S_2$, центральный – $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Se_2$, правый – $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Te_2$.

В ходе исследования был осуществлен синтез образцов состава $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Ch_2$ (где Ch представляет собой S, Se или Te) методом твердофазной реакции. Синтезированные образцы были охарактеризованы с помощью рентгеноструктурного анализа. Для получения монокристаллов применялся метод газотранспортной реакции. Детальное исследование монокристаллов проводилось на сканирующем электронном микроскопе с применением энергодисперсионного анализатора. Изучение рельефа поверхности осуществлялось методом атомно-силовой микроскопии в режиме измерения высоты. В результате на свежесколотой поверхности были выявлены включения, что является принципиально новым открытием для данного класса материалов.

Анализ топографии поверхности монокристаллов (см. Рисунок 1) показывает следующие особенности: на монокристалле $Ti_{0.5}Zr_{0.5}S_2$ наблюдаются включения высотой около 10 нм и диаметром около 1 мкм, также эти включения имеют гексагональную форму, что говорит о их когерентности с исходным кристаллом. В $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Se_2$ диаметр включений меньше (~0.2 мкм), как и высота (около 20 нм). В теллуриде высота включений в среднем 10нм и диаметр включений составляет ~0.25 мкм. При замещении халькогена в $Ti_{0.5}Zr_{0.5}Ch_2$ (S – Se – Te) происходит уменьшение высоты включений и увеличение площади основания, что коррелирует с переходом от диэлектрика к полупроводнику [1, 2].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект РНФ № 24-23-20136, соглашение 9-24-МГ).

1. A.I. Merentsov et al. // J. Phys. Chem. Solids., – 2022, – №160, p. – 110309.
2. A.S. Shkvarin et al., // J. Phys. Chem. C, – 2022, – №126, – 7076.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.112

# Получение композитов Al –$Al_2O_3$ с использованием высоких давлений

**Прилипко С. Ю., Гангало А. Н., Кудрявцев Ю. А., Бурховецкий В. В.**
*ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, Россия,*suprilipko@mail.ru

Металл-керамические композиты на основе системы $Al_2O_3$–Al представляют собой перспективный класс материалов, а их исследование может привести к созданию композитов с уникальными механическими и термическими свойствами. Композиты на основе $Al_2O_3$ и Al могут обладать высокой прочностью на сжатие и жесткостью благодаря прочности керамической фазы, а также хорошей ударной вязкостью благодаря металлической матрице. Алюминий обеспечивает хорошую теплопроводность, что может быть полезно в деталях, где необходимо рассеивание тепла.

В работе исследовалось получение металл-керамических композитов системы $Al_2O_3$–Al с использованием холодного изостатического прессования (ХИП), а также горячего прессования (ГП). Целью работы было установление влияние состава и режимов холодного изостатического прессования на внутреннюю структуру, общую плотность и прочность на изгиб полученных композитов.

На первом этапе исследовалась порошковая смесь из мелкодисперсного алюминия с размером чешуек 10-20 мкм и оксида алюминия с содержанием 30, 40 и 50% корундового наполнителя. Также для сравнения были получены композиты, в которых оксид алюминия добавлялся в виде нанопорошка. Из подготовленных смесей были сформированы компакты методом холодного изостатического прессования давлением 2, 6 и 10 кбар (рис. 1). В дальнейшем образцы спекались и испытывались на прочность при четырехточечном изгибе. Внутреннюю структуру в месте излома исследовали на растровом электронном микроскопе.

Исследованы влияние состава, давления ХИП и ГП, кинетики спекания и окисления на прочность металлокерамических композитов Al–$Al_2O_3$. Установлены режимы, позволяющие проводить спекание композита в воздушной среде.

Получен композитный материал, сочетающий дешевизну, коррозионную стойкость, легкость обработки, низкую температуру спекания и высокую удельную прочность. Установлено, что прочность композита $Al_2O_3$ – Al получаемого с использованием метода холодного изостатического прессования определяется в большей степени структурой и характером распределения пор, чем общей пористостью материала.

Сделаны выводы о наличии потенциала для повышения конструкционных характеристик за счет оптимизации технологических режимов и подбора составов.

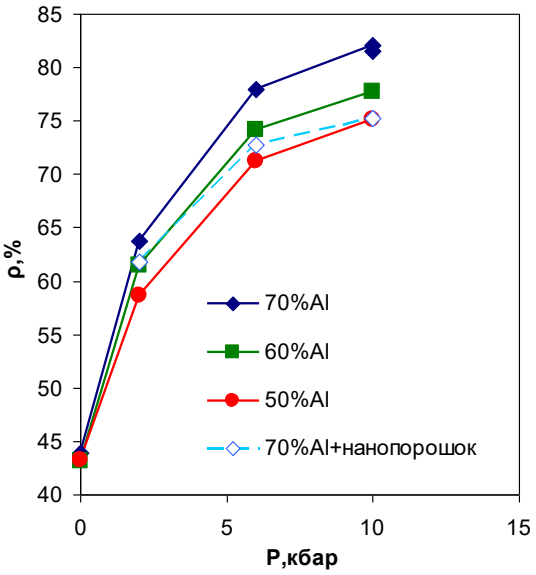


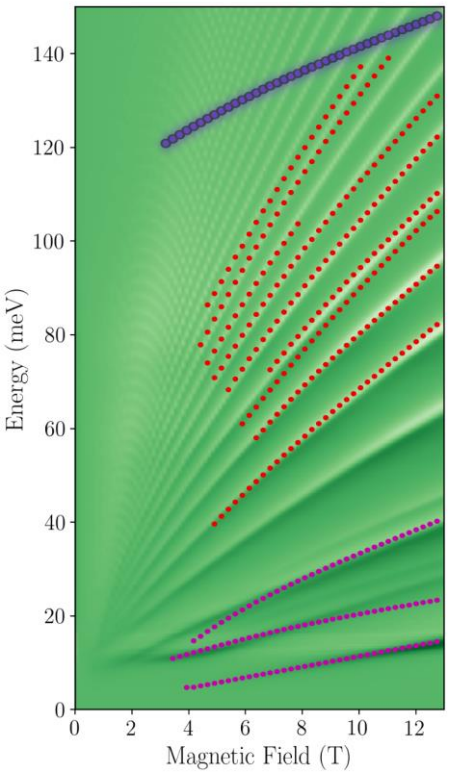

Рис.1. Зависимость плотности композитов с различным содержанием алюминия от давления ХИП.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.113

# Низкоэнергетическая электродинамика топологических полуметаллов

**Пронин А. В.**
*Erstes Physikalisches Institut, University of Stuttgart, Germany,*
E-mail: artem.pronin@pi1.physik.uni-stuttgart.de

Топологические полуметаллы находятся в фокусе исследований современной физики конденсированных сред [1]. В таких материалах трехмерные электронные зоны с линейной дисперсией пересекаются вблизи энергии Ферми. В общем случае, такие пересечения зон могут приводить к топологически тривиальным (как в случае дираковских полуметаллов) или нетривиальным (например, в полуметаллах Вейля) электронным фазам. Важно, что низкоэнергетические электронные дисперсионные соотношения могут быть аппроксимированы решением уравнения Дирака или его модификаций. Это делает оптический межзонный отклик топологических полуметаллов в целом отличным от отклика обычных трехмерных металлов и полупроводников и позволяет исследовать низкоэнергетические зоны с помощью измерений оптической проводимости. Например, полуметаллы с точечными пересечениями трехмерных зон имеют линейную по частоте оптическую проводимость [2], а в полуметаллах с зонами, пересекающимися вдоль линий со слабой дисперсией (nodal-line semimetals), оптическая проводимость не зависит от частоты [3]. Кроме того, магнитооптический отклик электронных зон с линейной дисперсией существенно отличается от отклика параболических зон: уровни Ландау в случае линейных зон неэквидистантны по энергии. Пример магнитооптических спектров отражения вейловского полуметалла NbAs из работы [4] показан на рисунке. Наконец, хиральная аномалия, известная по отрицательному магнитосопротивлению в вейловских полуметаллах, проявляется в оптических измерениях как дополнительный вклад в частоту плазменных колебаний электронного газа [5]. Все эти особенности низкоэнергетического отклика топологических полуметаллов наблюдались в нашей лаборатории в последние несколько лет и будут представлены в этом докладе.




## Литература

1. Armitage N.P., Mele E.J., Vishwanath A. // Rev. Mod. Phys. – 2018. – T. 90. – C. 015001.
2. Neubauer D., Carbotte J.P., Nateprov A.A., Löhle A., Dressel M., Pronin A.V. // Phys. Rev. B. – 2016. – T. 93. – C. 121202.
3. Schilling M.B., Schoop L.M., Lotsch B.V., Dressel M., Pronin A.V. // Phys. Rev. Lett. – 2017. – T. 119. – C. 187401.
4. Polatkan S., Uykur E., Wyzula J., Orlita M., Shekhar C., Felser C., Dressel M., Pronin A.V. // Phys. Rev. B. – 2024. – T. 108. – C. L241201.
5. Pronin A.V. // Linear electrodynamic response of topological semimetals. – Springer. – 2023.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.114

# Crossover from kinematical to dynamical regime of X-ray diffraction in free-standing smectic films

**Samsonov V. V.[1], Ostrovskii B. I.[2]**

[1]*Moscow State University, Moscow, Russia, samsonovvlvik@yandex.ru*
[2]*Institute of Solid State Physics, RAS, Chernogolovka, Russia*

Bragg mirrors are crucial components of X-ray optics, traditionally fabricated using periodic structures of inorganic materials that provide high reflectivity. However, free-standing smectic films (FSSF) of liquid crystals (LC) can also be considered as organic prototypes of Bragg mirrors with sub-nanometer roughness. FSSF are substrate-free and flat due to surface tension minimizing their surface area. When LC molecules are arranged in highly ordered stacks comprising thousands of molecular layers, their reflectance properties become comparable to those of conventional inorganic Bragg mirrors. Moreover, FSSF offer additional advantages, such as enhanced flexibility that makes them promising candidates for tunable X-ray optical components.

Here we report on a study of the properties of Bragg mirrors based on FSSF. Previously, synchrotron reflectivity studies of FSSF composed of approximately 80 smectic layers of the LC material 4O.8 were conducted. Our analysis demonstrated that nearly the entire reflectivity spectrum, including the Bragg peaks from the multilayer smectic structure, could be well fitted within a model based on the kinematical theory of X-ray diffraction. This indicates that the film thickness (about 220 nm) is insufficient to exhibit features predicted by the dynamical theory of X-ray diffraction. The kinematical theory assumes that multiple scattering effects at lattice planes are negligible and can be disregarded, making it valid for relatively thin films. In contrast, the dynamical theory accounts for multiple reflections at the interfaces between layers and the resulting interference effects, making it more suitable for thicker structures.

In our analysis of the diffraction properties of FSSF we used an approach based on the comparison of the full-widths of the first Bragg peaks calculated within the frameworks of kinematical and dynamical theories. This allowed us to derive an analytical criterion for the crossover from kinematical regime of diffraction to the dynamical regime. As a result, we succeeded in determining the crossover thickness (i.e., the critical number of layers) at the margin between these regimes. By varying the structural parameters obtained from the fitting of the experimental reflectivity curve, we conducted numerical experiments across a wide range of film thicknesses confirming the validity of the proposed criterion. It was shown that the Darwin plateau, serving as a signature of the validity of the dynamical theory, is clearly present at the top of the first Bragg peak for the FSSF comprising about 4000 smectic layers. Taking into account that the layer periodicity of 4O.8 films is about 3 nm, this corresponds to a FSSF of 12 micrometers thick.

By incorporating a crosslinking agent and subsequently exposing the FSSF to UV radiation, well-aligned smectic multilayers with the mechanical properties of LC elastomers (soft rubber) can be fabricated. These films exhibit high mechanical stability, making them promising candidates for high-quality adaptive X-ray optical elements.

The study was supported by Russian Science Foundation Grant No. 23-12-00200. The authors would like to thank Konstantin V. Nikolaev and Sergey N. Yakunin for their contributions to the project.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.115

# ЭФФЕКТ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ПОПЕРЕЧНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В p-$ZnAs_2$ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

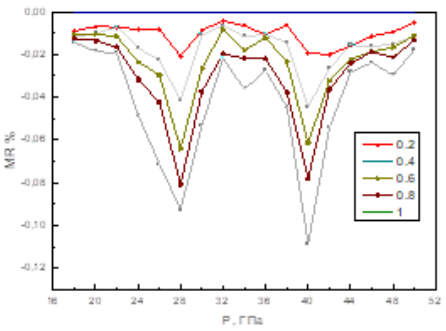
**Л.А. Сайпулаева[1], А.В. Тебеньков[2], Ш.Б.Абдулвагидов[1], А.Г. Алибеков[1], С.Ф. Маренкин[3]**

[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия,* l.saypulaeva@gmail.com

[2]*Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург, 620000 Россия*, av.tebenkov@urfu.ru

[3]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия,* marenkin@rambler.ru

Измерения удельного сопротивления и термоэдс проводились в алмазных камерах высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус-плоскость» изготовленных из синтетических алмазов. Диаметр образца $d \leq 200$ мкм при толщине $t<20$ мкм. В отсутствие магнитного поля p- $ZnAs_2$ переходит в низкоомное состояние при давлении порядка 25-30 ГПа. Приложение поперечного магнитного поля приводит к смещению перехода в низкоомное состояние в область давлений 35-40 ГПа. При первом цикле роста давления можно выделить четыре пика с максимальным значением магнитосопротивления: 28, 34, 38 и 42 ГПа (Рис.). Максимальные значения магнитосопротивления достигают 15% при 38 ГПа. Также наблюдается при давлении P < 20 ГПа слабое положительное магнитосопротивление порядка 3% при максимальном поле 1 Тл. На втором цикле роста давления магнитосопротивление остается отрицательным на всем исследуемом диапазоне и наблюдается локализация областей с максимальным значением MR. Пик, наблюдаемый при 28 ГПа, сохраняет свое положение при циклировании давления, при этом незначительно увеличивается по интенсивности. Значения магнитосопротивления при 28 ГПа при последующих нагружениях составляют около 10%. А вот область 34 ГПа, напротив, демонстрирует снижение интенсивности величины MR до 2-4%. В области давлений выше 36 ГПа наблюдается более сложная эволюция магниторезистивного эффекта. Остаются пики при 40 и 48 ГПа. В данном случае происходит не только локализация пиков, но и их смещение в область более высоких давлений. Смещение составило 2 ГПа. Как правило, повторная обработка давлением ведет к смещению особенностей в области более низких давлений. После снижения давления сопротивление образцов не возвращается в исходное состояние, что связано с необратимыми изменениями в структуре материалов. В магнитном поле в диарсениде цинка впервые был обнаружен эффект отрицательного MR и наблюдалась инверсия знака MR при прямых и обратных структурных превращениях в области давлений 28~30 ГПа. Как следует из рисунка, с понижением давления значение ОМС растет и достигает своего максимального значения при P=28 ГПа, H=1T, значение ОМС при этом составляет $\rho/\rho \approx 0.16\%$. А в области давлений P < 44 ГПа K, а также P > 38 ГПа значение ОМС уменьшается на 0.13 %, а при P≈(28-33)ГПа ОМС переходит к ПМС, т. е. происходит инверсия знака МС. Следует отметить, что величина давления, где наблюдается максимальное ОМС ($P_{max}$), смещается в сторону высоких давлений, соответственно падению сопротивления образцов.



DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.116

# РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В n- $CdAs_2$ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

**Сайпулаева Л.А.[1], Тебеньков А.В.[2], Абдулвагидов Ш.Б.[1], Алибеков А.Г.[1], Маренкин С.Ф.[3]**

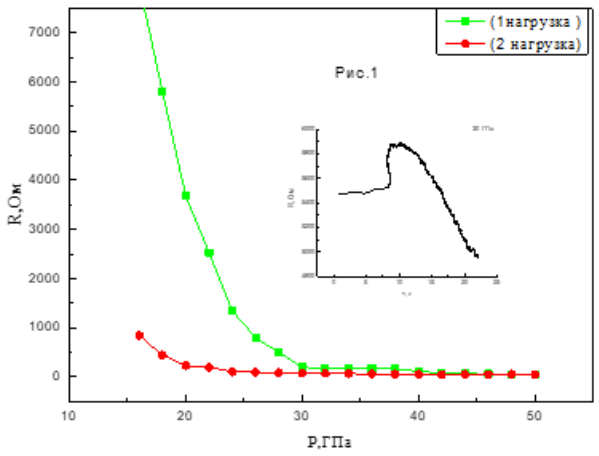
[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия,* l.saypulaeva@gmail.com

[2]*Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург, 620000 Россия,* av.tebenkov@urfu.ru

[3]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия,* marenkin@rambler.ru

Настоящая работа посвящена изучению особенностей поведения электрических характеристик n-$CdAs_2$ условиях воздействия высоких давлений (до 50 ГПа) и магнитных полей (до 1Тл). Электросопротивление полупроводников, особенно, поликристаллических нелинейно меняется при приложении высокого давления поля. Причем свойства полупроводников изменяются даже в том случае, когда давление неизменно, то есть наблюдается временная зависимость, например, электросопротивления от времени при некотором постоянно приложенном давлении. Ввиду этого, требуется некоторое время, чтобы кристаллическая структура пришла из неравновесной к равновесному состоянию. При деформации существенно возрастает число точечных дефектов, дислокаций, примесей, особенно в барической области структурных переходов, за счет деформационных процессов, поэтому необходимо достаточно длительное время, чтобы концентрация дефектов уменьшилась за счет аннигиляции междоузельного атома с вакансией, аннигиляции вакансий, снятия упругих напряжений, и др. процессов структурной релаксации. Давление изменяет расстояние между атомами, их окружение, рождает новые носители и пр. По зависимостям электросопротивления от времени приложения постоянной нагрузки детально можно исследовать релаксационные процессы, протекающие при обработке давлением. Вблизи фазовых переходов времена релаксации электросопротивления резко возрастают, достигая от десятков секунд до десятков минут.

Резкое увеличение времени релаксации физических параметров, за которое они стабилизируются, может свидетельствовать о структурных и фазовых превращениях.




На рисунке представлена барическая зависимость электросопротивления диарсенида кадмия первого цикла увеличения давления. Можно выделить два пика времени релаксации $\tau_1$. Первый пик соответствует давлению 30 ГПа (вставка), время релаксации при этом увеличивается примерно на порядок в сравнении с временами до 28 ГПа и достигает 1800 с. Второй пик возникает при давлениях 36-40 ГПа. Диапазон давлений второго пика можно обозначить от 36 до 46 ГПа. Для второго времени релаксации электросопротивления $\tau_2$, соответствующего более медленным процессам, общая зависимость сохраняется такая же как для $\tau_1$.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.117

# ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА 3D ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ С МАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

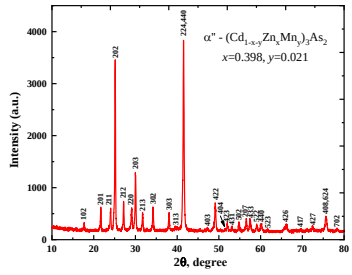
**Сайпулаева Л.А.[1], Захвалинский В.С.[2], Абдулвагидов Ш.Б.[1], Алибеков А. Г.[1], Кочура А. В.[3], Пирмагомедов З. Ш.[1], Залибеков У.З.[1]**

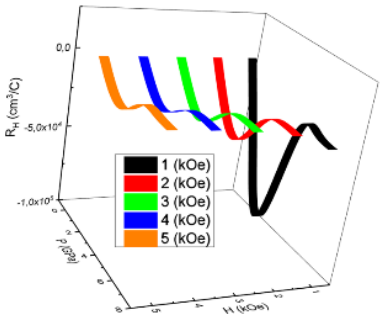
[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия,* l.saypulaeva@gmail.com

[2]*Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия, v_zaxval@mail.ru*

[2]*Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия,*

Целью работы является: исследовать влияния высокого давления на 3D топологические нетривиальные системы с магнитными примесями на примере твердого раствора $(Cd_{1-x-y}Zn_xMn_y)_3As_2$ ($x+y=0.4$). Исследованные материалы синтезированы в графитизированных вакумированных ампулах методом. Состав исследуемого кристалла уточнялся с помощью энергодисперсионного рентгеновского спектрометра X-MaxN (Oxford Instruments, England), которым был оснащен сканирующий электронный микроскоп JSM-6610LV (Jeol, Japan). Точность определения содержания элементов - 0.10 ат %. Измерения выполнялись на естественном сколе образца, который в арсениде кадмия, структурно близком к исследуемому образцу, происходит преимущественно вдоль кристаллографической плоскости (112). Распределение элементов по исследуемой поверхности было однородным и соответствовало составу $x$=0.398, $y$=0.021 ($x+y$=0.419), то есть $(Cd_{0.581}Zn_{0.398}Mn_{0.021})_3As_2$.




Порошковая рентгеновская дифрактограмма кристалла получена при комнатной температуре с помощью рентгеновского дифрактометра GBC EMMA с длиной волны λ = 1.5401 Å линии CuKα (верхний рисунок).

Установка для измерения кинетических коэффициентов при гидростатических давлениях до 9 GPa представляла собой аппарат высокого давления типа «Тороид».

При гидростатическом делении исследованы удельное электросопротивление, эффект Холла и магнетосопротивление. Измерения коэффициента Холла образцов $(Cd_{0.581}Zn_{0.398}Mn_{0.021})_3As_2$ (нижний рисунок) позволили определить тип носителей заряда, рассчитать их концентрацию и подвижность. Основными носителями оказались электроны. Из экспериментальных барических зависимостей коэффициента Холла в различных магнитных полях хорошо видно, что поведение $R_H(P)$ сильно зависит от магнитного поля.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.118

# СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРТОФЕРРИТА ЛАНТАНА $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0)

**В.Д. Седых[1], В.С. Русаков[2], О.Г. Рыбченко[1], А.М. Гапочка[2], М.Е. Мацнев[2], А.А. Топоркова[1], А.И. Иванов[1], В.И. Кулаков[1]**

[1] *Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия*
[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: sedykh@issp.ac.ru

Методами рентгеновской дифракции и мессбауэровской спектроскопии исследовано влияние содержания ионов $Ca^{2+}$ в ферритах лантана $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1), синтезированных на воздухе золь-гель методом, на их кристаллическую структуру, кислородные вакансии, валентные состояния Fe и на локальные изменения окружения ионов $Fe^{3+}$. Изучена также их эволюция в ходе вакуумного отжига при температуре (650ºC), когда ионы $Fe^{4+}$ переходят в $Fe^{3+}$. В образцах с крайними значениями x (x = 0 и 1) ионы Fe находятся только в трехвалентном состоянии. В Ca-замещенных образцах появляются кислородные вакансии и ионы $Fe^{4+}$. В исходных образцах $LaFeO_3$ и $La_{0.7}Ca_{0.3}FeO_{3-\gamma}$ структура ромбическая (пр.гр. Pbnm). В исходных и отожженных образцах $Ca_{0.5}La_{0.5}FeO_{3-\gamma}$ и $Ca_{0.7}La_{0.3}FeO_{3-\gamma}$ структуры двухфазные: в исходных – одна фаза ромбическая (пр.гр. Pbnm), которая при вакуумном отжиге переходит в кубическую, другая - предположительно, ромбическая (пр.гр. $Pcm2_1$) состава $Ca_2LaFe_3O_8$ (фаза Гренье), количество которой растет с увеличением концентрации Ca. Образец с x = 1 имеет структуру браунмиллерита ($CaFeO_{2.5}$).

Мессбауэровские спектры исходных и отожженных ортоферритов $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ были измерены при 85 К. Спектры состоят из нескольких парциальных спектров, сверхтонкие параметры одного из них, с меньшим изомерным сдвигом и магнитным полем, соответствуют ионам $Fe^{4+}$, а остальные – ионам $Fe^{3+}$. Наличие в спектрах нескольких зеемановских секстетов, относящихся к ионам $Fe^{3+}$, связано с появлением ионов $Fe^{4+}$ и кислородных вакансий в ближайшем окружении ионов $Fe^{3+}$, т.е. при замещении появляются атомы Fe со смешанной валентностью. В результате расшифровки спектров для всех образцов определено число ионов $Fe^{4+}$ ($y$) и число кислородных вакансий ($\gamma$), приходящихся на формульную единицу (Рис.), что позволило проанализировать изменения локального окружения ионов $Fe^{3+}$ как с изменением концентрации Ca, так и в результате вакуумного отжига.

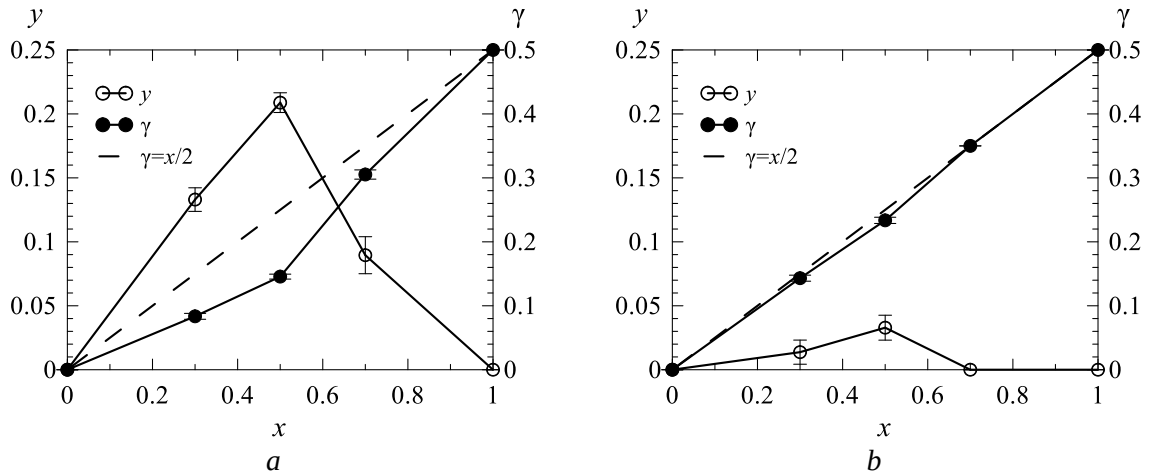



Рис. Зависимости числа ионов $Fe^{4+}$ ($y$) и кислородных вакансий ($\gamma$) от содержания Ca ($x$) для исходных образцов ($a$) и образцов, отожженных в вакууме при 650ºC ($b$).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.119

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРОГА ГЕНЕРАЦИИ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ ВОЛНАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ He-II

**Селин П.Г., Султанова М.Р., Ремизов И.А., Левченко А.А., Межов-Деглин Л.П.**
*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН*
*Россия, 142432, Черноголовка, Московская обл., ул. Академика Осипьяна, д. 2*
*e-mail: selin@issp.ac.ru*

Ранее было показано [1, 2] формирование квантовых вихрей двумя ортогональными волнами, возбуждёнными на поверхности сверхтекучего гелия и воды.

Эксперименты проводятся в жидком гелии при температуре $T$ = 1,5 K. Размеры ячейки составляют 5x5x3 см. Волны на поверхности жидкости возбуждаются двумя ортогонально установленными плунжерами. Для детектирования квантовых вихрей, в систему при помощи источника зарядов, вводятся отрицательные заряды, которые могут быть захвачены кором квантового вихря. Заряды детектируются путём прихода на коллектор, разделённый на 5 равных частей.

Были промерены общие зависимости пороговой амплитуды от резонансных частот и вычислена критическая скорость возникновения квантовых вихрей в системе.

Также мы оценили скорости в решёточном вихре [3] и скорость противотока в вязком подслое. Все они оказались меньше критического значения. Предполагается, что противоток нормальной и сверхтекучей компоненты возникает на стенках ячейки, так как сверхтекучая компонента будет двигаться со скоростью ≈3,4 мм/с, а скорость нормальной компоненты обращается в ноль.

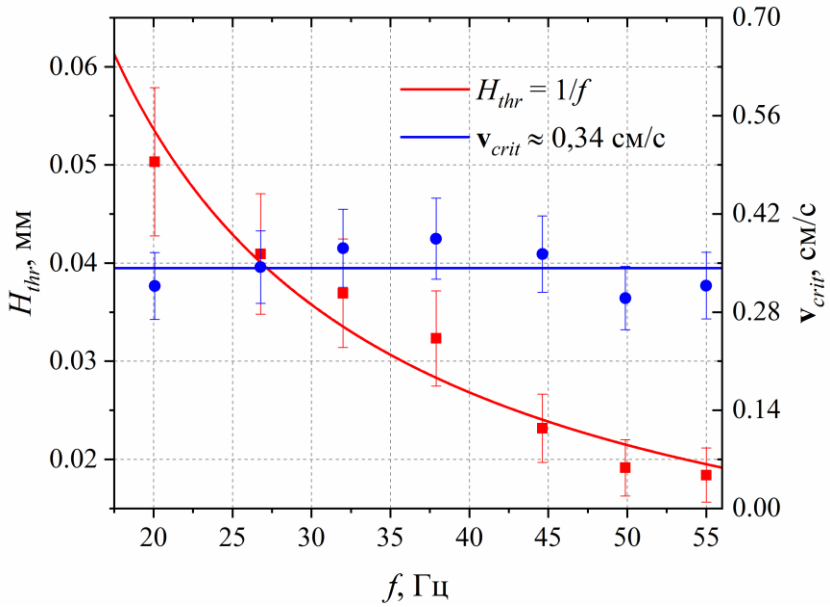



Рис. 1. Зависимость пороговой амплитуды и пороговой скорости от резонансной частоты в диапазоне от 20 до 55 Гц

## Литература

1. Султанова М.Р., Ремизов И.А. и др. – Генерация квантовых вихрей волнами на поверхности сверхтекучего гелия // Письма в ЖЭТФ – 2023. – Т. 118. – №8. – С. 596-601;
2. Filatov S.V., Parfenyev V.M. et al. – Nonlinear Generation of Vorticity by Surface Waves // Physical Review Letters – 2016. – V. 116. – P. 054501;
3. P.P. Craig, J.R. Pellam Observation of Perfect Potential Flow in Superfluid // Phys. Rev. – 1957. – V. 108 – PP. 1109-1112.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.120

# Структура поверхности плёнок поливинилиденфторида изготовленных методом кристаллизации в поле коронного разряда

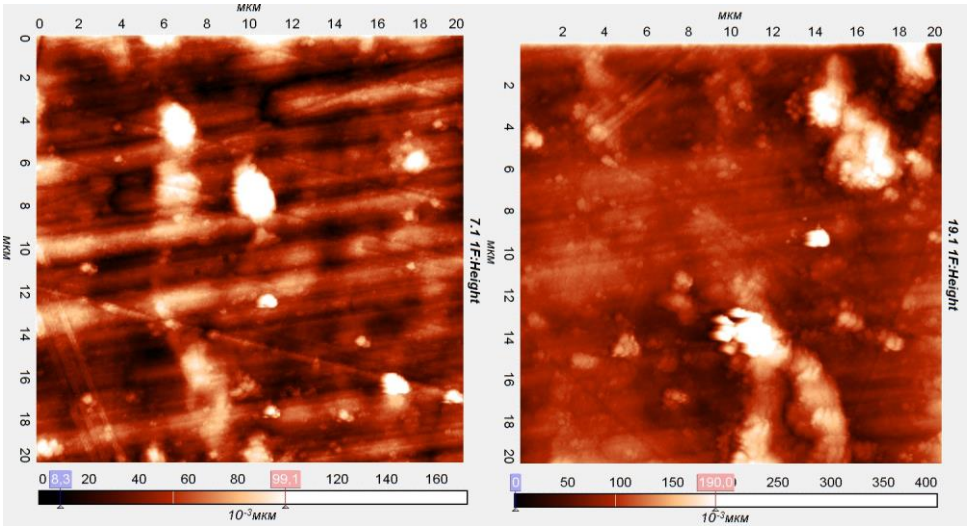
**Шнайдштейн Г. И., Барабанова Е. В., Солнышкин А. В.**
*Тверской государственный университет, Тверь, Россия, g.shnaidshtein@mail.ru*

Поливинилиденфторид (ПВДФ) широко используемый функциональный материал, обладающий, в том числе, сегнетоэлектрическими свойствами, на основе которого производятся различные пьезоэлектрические и пироэлектрические устройства. Возможности по повышению эффективности подобных устройств, в особенности это касается композитов из PVDF и сегнетокерамики, далеко не исчерпаны, и их исследования не теряют своей актуальности [1].

Одно из направлений таких исследований связано с уменьшением величины напряжения, необходимого для поляризации пленок ПВДФ, содержащих включения зерен сегнетокерамики, путем выбора наиболее подходящего метода кристаллизации пленки. Известно, что выбор оптимального метода позволяет увеличить значения соответствующих пьезоэлектрических модулей и показателей пироэлектрического качества образцов [2].

Нами создана установка, позволяющая кристаллизовать пленки ПВДФ в поле коронного разряда, путем модификации существовавшей установки, использующей метод литья из раствора [2], так что процесс поляризации пленки происходит во время ее отвердевания, подобно описанному в работе [3].

На этой установке изготовлена серия образцов. В ходе проведенных экспериментов мы обнаружили, что приложение постоянного поля коронного разряда в процессе кристаллизации, приводит к деформации поверхности образцов. Целью настоящей работы, выступало исследование особенностей топографии поверхности полученных плёнок методом атомно-силовой микроскопии.




Примеры АСМ-изображений исследуемых образцов.

## Литература

1. Nivedhitha, D.M., Jeyanthi, S. // Polym. Adv. Technol. – 2023. – V. 34. – P. 474-505.
2. Scott J.F. // Int. Sch. Res. Notice. – 2013. – P. 187313-1–187313-24.
3. Tansel T. // J. Polym. Res. – 2020. – V. 27. – P. 95-1–95-5.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.121

# Устойчивость газовой среды с уравнением состояния в форме Ван-дер-Ваальса

**V.Shikin.**
*ISSP RAS, 142432, Chernogolovka , Moscow District, Russia*

Хорошо известно [1], что при температуре $T$ ниже критической, $T < T_c$ газовая среда с уравнением состояния $P(V, T)$ в форме Ван-дер-Ваальса может (должна) находиться в смешанном, жидко - газовом состоянии. Зависимость давления $P$ от объема $V$ в этой области теряет свою монотонность, проходя на конечном интервале значений $V$ в сторону его уменьшения от максимума с $\partial P/\partial V_{max} = 0$ в газовой фазе к минимуму с $\partial P/\partial V_{min} = 0$ в жидкой фазе. Состоянию двухфазного равновесия отвечает линия конденсации (коннода), вдоль которой $P = const$ и выполняется "правило Максвелла" (площадка, сформированная кривой $P(V, T)$ с "отрицательными" по отношению к линии $P = const$ значениями давления должна быть равно.велика площадке с "положительными" по отношению к линии $P = const$ значениями кривой $P(V, T)$). Как следствие, на линии конденсации имеет место "правило рычага" . Любая точка, разделяющая "конноду " на правый (длиной $x$ ) и левый (длиной $(1 - x)$) участки, обладает свойством оценивать степень неоднородности среды отношением $x/(1 - x)$.

Учитывая сказанное, возникает повод сравнить критические предсказания "по Ван-дер-Ваальсу" для системы газ-жидкость с описанием процесса зарож- дения новой фазы такой же среды в бинодальном сценарии развития неустой- чивости [1]. Оба подхода солидарны в том, что неустойчивость имеет пороговый характер, но их природа различна. Для распадов "по Ван-дер-Ваальсу" требу- ется конечность безразмерного параметра $x_{cr}/(1 - x_{cr})$, где $x_{cr}$ - критическое значение составляющей жидкой фазы в смешанном состоянии. Неявно эти рассуждения предполагают, что при манипуляциях с полным объемом $V$ полное число $N$ газовых атомов в нем сохраняется. Бинодальная версия распада обращает внимание на другой тип конкуренции, сопровождающей появление зародыша. Объемная выгода его зарождения, пропорциональная $R^3_{cr}$, конкурирует с избыточной поверхностной энергией, пропорциональной $R^2_{cr}$ ( $R_{cr}$ - критический радиус зародыша). В этом формализме определение критического радиуса $R_{cr}$ может быть получено в "одно.частичном" приближении без учета фактора $x_{cr}/(1 - x_{cr})$.

Поиски компромисса в задаче о критических условиях развития бинодальной неустойчивости в классической газовой среде с уравнением состояния в форме Ван-дер-Ваальса определяют содержание данной работы . Имеющиеся экспериментальные данные подтверждают разумность предлагаемого.

1. Л.Ландау, Е.Лифшиц, "Статистическая физика, Часть 1" , Москва, Наука, 1995, 605 стр.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.122

# Электрохимическая коррозия металлов с участием пленки воды

**V. Shikin**

*ISSP RAS, 142432, Chernogolovka , Moscow District, Russia*

Электрохимической коррозией называют разрушение металла при его соприкосновении с электролитом. В атмосферных условиях роль электролита игра- ет водная пленка на доступных металлических поверхностях. При этом вдоль границы металл-электролит возникает множество микро.гальванических эле- ментов. Анодами возникающих цепочек служат участки материнского металла вблизи примесей, а катодами - инородные включения с металлическими свой- ствами, имеющие более положительный (отрицательный) потенциалы. Схема наблюдаемых процессов коррозии выглядит вполне освоенной ( см к примеру [1]). Но ее детали нуждаются в комментариях. Содержание вопросов и ответы на них предлагаются в данной работе на примере из [1] для коррозии железа в электрохимическом контакте с медью.

Более активный металл - железо - окисляется, посылая электроны атомам меди и переходит в жидкую пленку ионами $Fe^{2+}$. Водные ионы водорода, под- держивая токи в микро. цепях, разряжаются на меди

$$2H^{+} + 2e \leftrightarrow H_2. \qquad (*)$$

($e$ -заряд электрона). Остатки же $OH^{-}$ соединяются с перешедшими в раствор ионами $Fe^{2+}$, образуя, в конечном итоге, бурую ржавчину.

Уже на этом уровне возникают вопросы.

- Любая гальваника становится активной (появляются токи) с появлением разности потенциалов $\delta V$ между контактирующими металлами; какова природа $\delta V$ в ячейках с электрохимической коррозией ?

- Обратимая реакция (*) содержит обмен зарядами разного происхожде- ния (протоны в электролите и электроны в металле). Как такое возможно?

Ответы на эти и другие, менее очевидные, вопросы содержатся в данной заметке.

1. Н.Глинка, "Общая химия" , Ленинград, "Химия" 1979, 719 стр.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.123

# Строение и свойства шеелитоподобных редкоземельных молибдатов $Dy_2MoO_6$, легированных атомами свинца

**Сидорова Е. В.[1], Смирнова Е. С.[1], Орлова Е. И.[1,2], Харитонова Е. П.[1,2], Антипин А. М.[1], Кварталов В. И.[1], Сорокина Н. И.[1], Сорокин Т. А.[1], Алексеева О. А.[1]**

[1]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,* soul7418@gmail.com

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Редкоземельные молибдаты состава $Ln_2MoO_6$, *Ln* = La-Lu, интересны благодаря своим люминесцентным, электрофизическим и каталитическим свойствам. Недавние работы [1] показали, что структура, полиморфизм и проводящие свойства оксимолибдатов чувствительны к размеру редкоземельного катиона, а также к различным гетеровалентным замещениям. В данной работе планируется впервые синтезировать оксимолибдат $Dy_2MoO_6$, легированный двухвалентным свинцом, с целью изучения влияния гетеровалентного замещения на структуру и физические свойства.

Соединение $Dy_2MoO_6$, легированное $Pb^{2+}$, получено твердофазным синтезом на воздухе в виде поликристаллической керамики и раствор-расплавной кристаллизацией в виде монокристаллов. Синтезированные образцы проанализированы методами рентгеновского фазового анализа (РФА), полнопрофильного количественного анализа по методу Ритвельда, синхронного термического анализа, импедансной спектроскопии в атмосферах сухого воздуха и аргона. Методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой изучен состав монокристаллических образцов. Строение монокристаллов исследовано методом рентгеноструктурного анализа. Структура монокристаллов состава $Dy_{1.97}Pb_{0.03}MoO_6$ была уточнена в пространственной группе *I*2/*a*. В структуре присутствуют три кристаллографически независимые позиции атомов диспрозия, одна позиция атомов молибдена и шесть позиций атомов кислорода. Анализ карт разностных синтезов электронной плотности (ЭП) в окрестности катионов структуры, построенных на заключительном этапе уточнения структурной модели, показал, что наиболее значимые пики остаточной ЭП находятся вблизи позиций атомов диспрозия. Исходя из близости величин ионных радиусов ($r(Dy^{3+})$=1.17 Å, $r(Pb^{2+})$=1.43 Å для к.ч.=8 сделано предположение о том, что эти пики ЭП соответствуют положениям атомов свинца, которые частично замещают в структуре атомы диспрозия. Заключительные факторы расходимости равны *S*=1.99, *R*=1.44. РФА керамических образцов позволил установить области гомогенности твердых растворов на основе $Pb^{2+}$, сохраняющих моноклинную структуру недопированных оксимолибдатов $Dy_2MoO_6$. Введение катионов свинца в позиции лантаноидов индуцирует резкий рост электропроводности, на порядок величины по сравнению с немодифицированными соединениями. Общие значения проводимости допированных керамик достигают $10^{-2}$ См/см при 900 °C. Подтвержден смешанный кислород-ионный и электронный характер проводимости соединений. Такие свойства делают их перспективными кандидатами для применения в качестве катодных материалов твердооксидных топливных элементов, где совмещение ионной и электронной проводимости способствует расширению трёхфазных границ и повышению эффективности кислородной восстановительной реакции.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00221).

## Литература

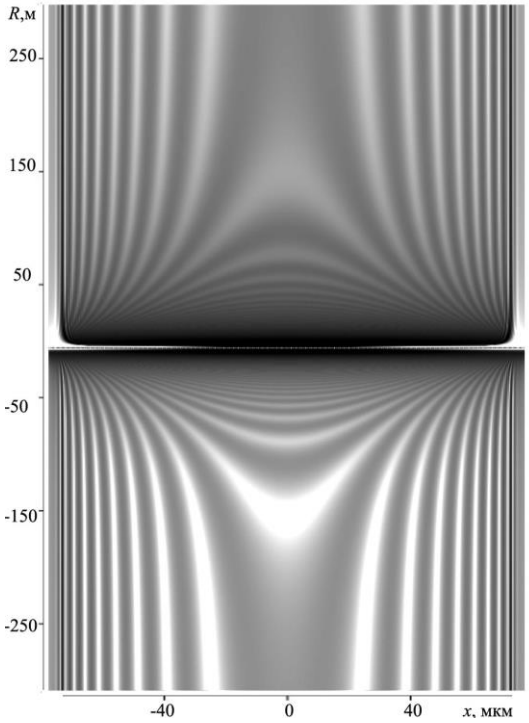
1. Morkhova Y.A., Orlova E.I., Kabanov A.A. et al. *Solid State Ionics*, 2023, 400, 116337.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.124

# Особенности дифракции рентгеновского излучения при изгибе отражающих плоскостей кристалла

**Смирнова И.А., Суворов Э.В.**
*ИФТТ РАН, Черноголовка, Моск.обл. Россия*
irina@issp.ac.ru; suvorov@issp.ac.ru

Рентгеновская дифракция широко используется для изучения структурного совершенства реальных кристаллов [1-2]. Первые подходы к построению динамической теории искаженных кристаллов использовали понятия геометрической оптики [3]. Второй подход динамической теории дифракции для искаженных кристаллов был разработан Такаги [4] и Топэном [5]. Уравнения Такаги-Топэна выведены из основных уравнений классической электродинамики. Для практических приложений удобным методом является интегрирование уравнений Т-Т численным способом.




В представленной работе методами численного интегрирования уравнений Т-Т изучено влияние изгиба отражающих плоскостях кристаллической решетки на формирование дифракционного изображения в секционной топографии, для камеры Ланга А-3. На рисунке представлена интенсивность дифрагированной волны Si (220) в плоскости детектора в зависимости от радиуса изгиба кристалла ($R$). Излучение $MoK_{\alpha 1}$, коэффициент поглощения $P$=0.6, что соответствует приближению тонкого кристалла. При больших радиусах изгиба (верх и низ топограммы) интенсивность бесконечно узкого пучка распределяется в треугольнике рассеяния с образованием интерференционных полос Като, соответствующие идеальному кристаллу.

При уменьшении радиуса изгиба интенсивность дифрагированного луча увеличивается, и уменьшается расстояния между полосами вблизи выходной поверхности. Для интенсивности отраженной волны имеется зависимость от знака изгиба (нарушение закона Фриделя). Следует подчеркнуть, что интенсивность прямого луча уменьшается при уменьшении радиуса изгиба, но не меняется при изменении знака изгиба. Интегральная интенсивность дифрагированной волны, как следствие, увеличивается с увеличением изгиба и толщины кристалла.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

1. Authier A. // Dynamical Theory of X-ray Diffraction 3rd ed. Oxford University Press. 2005.
2. Суворов Э. В., Смирнова И. А. // Успехи физических наук.- 2015.-Т. 185. - №9.- С.897-915
3. Kato N. // J. Phys. Soc. Jpn. – 1963. - 18. - P. 1785-1791; 1964. – 19. – P. 67-77, P. 971-985.
4. Takagi S. // Acta Crystallogr. – 1962. - 15. - P. 1311-1312.
5. Taupin D. // Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr. – 1964. - 87. - P. 469-511.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.125

# Строение и транспортные свойства флюоритоподобных молибдатов $Li_xNd_{5-x}Mo_3O_{16\pm\delta}$ в интервале температур 20–900 °C

**Смирнова Е. С.[1], Орлова Е. И.[1,2], Лысков Н. В.[3], Харитонова Е. П.[1,2], Сорокин Т. А.[1], Антипин А. М.[1], Сидорова Е. В.[1], Новикова Н. Е.[1], Сорокина Н. И.[1], Воронкова В. И.[2], Алексеева О. А.[1]**

[1]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,* esmi@ns.crys.ras.ru

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[3]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*

Редкоземельные флюоритоподобные молибдаты $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (пр. гр. $Pn\bar{3}n$) представляют интерес благодаря уникальному сочетанию высокой смешанной ионно-кислородной и электронной проводимости (~$10^{-2}$ См/см при 800 °C в атмосфере воздуха) и восприимчивости структуры к изменениям температуры, состава или степени окисления катионов [1]. Ключевым инструментом для управления кислородной стехиометрией и ионной проводимостью фаз $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ является гетеровалентное катионное допирование.

В данной работе исследовалось перераспределение атомов кислорода при нагреве литированных фаз $Nd_5Mo_3O_{16+\delta}$, которое напрямую влияет на ионный транспорт. Фазовый состав и изоструктурность керамических образцов $Li_xNd_{5-x}Mo_3O_{16\pm\delta}$ ($x$ = 0, 0.15), синтезированных твердофазным методом на воздухе, были подтверждены методом рентгенофазового анализа и полнопрофильного количественного анализа методом Ритвельда. Установлена термическая стабильность закаленных керамик $Li_xNd_{5-x}Mo_3O_{16\pm\delta}$ ($x$ = 0, 0.15) при 650 °C и выдержке 20 ч и при 800 °C и выдержке 50 ч. Исследования кристаллической структуры монокристаллов $Li_{0.2}Nd_{4.8}Mo_3O_{15.2+\delta}$, выращенных раствор-расплавной кристаллизацией по методике [2], выполнены при температурах 293, 600, 1050, 293 К (обратный ход). Выявлено термоактивированное перераспределение ионов кислорода по межузельным позициям O3 и вакансиям в базовой анионной подструктуре. С ростом температуры от 293 до 1050 К заселенность позиции атома O2 $q$(O2) = 0.89(1) увеличивается до $q$(O2) = 0.91(1), а при охлаждении образца до 293 К возвращается к исходному значению. Атомы кислорода в межузельной позиции O3 с координатами (0, 0, 0) покидают свою позицию с ростом температуры от 293 до 1050 К и возвращаются в нее при понижении температуры до 293 К. Динамика кислородной решетки (O2 ↔ O3) обратима и не нарушает кристаллическую симметрию. Данные импедансной спектроскопии керамик $Li_xNd_{5-x}Mo_3O_{16\pm\delta}$ ($x$ = 0, 0.15) в атмосфере сухого воздуха в интервале температур 300–900 °C выявили аномалии на температурных зависимостях диэлектрической проницаемости в диапазоне 400–600 °C, которые могут быть связаны с перераспределением ионов кислорода в кристаллической решетке.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00221).

## Литература

1. Voronkova V.I., Leonidov I.A., Kharitonova E.P. et al. // J. Alloys Compd. – 2014. – V. 615. – P. 395.
2. Орлова Е.И., Трухачева М.П., Сорокин Т.А. и др. // Кристаллография. – 2024. – Т.69. – № 2. – С. 259.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.126

# Образование и аннигиляция точечных и линейных топологических дефектов при фазовом переходе нематик – изотропная жидкость

**Спириденко Н. А., Долганов П. В., Долганов В. К.**
*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия*, pauldol@issp.ac.ru

Топологические дефекты встречаются в различных конденсированных средах. Исследования дефектов представляют интерес сами по себе; кроме того, дефекты могут оказывать существенное влияние на статические и динамические свойства образцов. Во многих случаях существование дефектов связано с топологией системы и с граничными условиями, задаваемыми поверхностями. Поведение топологических дефектов поля молекулярного упорядочения в жидких кристаллах можно изучать в удобном для экспериментов пространственном и временном масштабе.

В работе исследована структура и динамика топологических дефектов на межфазной границе нематический жидкий кристалл – изотропная жидкость [1]. В исследованиях использована высокоразрешающая поляризованная оптическая микроскопия, позволяющая визуализировать топологические дефекты, и высокоскоростная видеорегистрация. Дефекты наблюдаются на поверхности капель изотропной жидкости в жидком кристалле или капель жидкого кристалла в изотропной жидкости. Исследования проведены с использованием оптических ячеек в двухфазной области жидкий кристалл – изотропная жидкость. Гибридные граничные условия для ориентации молекул жидкого кристалла на поверхности ячейки и на границе раздела нематик – изотропная жидкость приводят к образованию на поверхности капель дефектов двух типов: линейных и точечных топологических дефектов [2,3]. Если размер капель меньше толщины образца, на поверхности капель наблюдается экваториальный линейный дефект («кольцо Сатурна»). В тонких образцах линейный дефект трансформируется в пару локализованных линейных дефектов.

Нетривиальные эффекты наблюдаются при слиянии капель. Слияние приводит к зарождению новых топологических дефектов, имеющих противоположный топологический заряд по сравнению с дефектами, существующими до слияния. Такое поведение находится в согласии с требованиями топологии. В дальнейшем происходит сближение и аннигиляция пар дефект–антидефект. Изучена динамика аннигиляции точечных и линейных дефектов в ячейках различных толщин. Экспериментальные результаты сопоставлены с теорией.

Исследование поддержано грантом РНФ 23-12-00200.

## Литература

1. Dolganov P.V. Spiridenko N.A., Dolganov V.K. // Phys. Rev. E. – 2024. – V. 110. – No. 2. – P. 024703.
2. Dolganov P.V., Spiridenko N.A. // Liquid Crystals. – 2022. – V. 49. – No. 14. – P. 1933–1941.
3. Dolganov P.V., Spiridenko N.A., Dolganov V.K. // The European Physical Journal E. – 2023. – V. 46. – No. 12. – P. 121-128.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.127

# Регулирование структуры и свойств сцинтилляционных композиций полистирола с $LaBr_3$(Ce) электрическими и деформационными воздействиями.

**Цебрук И.С., Классен Н.В., Кедров В.В, Киселев А.П., Орлов А.Д.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия, cebruk@issp.ac.ru*

Сцинтилляционные материалы играют ключевую роль в детекции ионизирующего излучения, находя применение в медицинской диагностике, ядерной безопасности и физике высоких энергий. Особый интерес представляют композиционные системы, сочетающие органические и неорганические компоненты, такие как полистирольная матрица с флуоресцентными добавками (PPO и POPOP) и наполнитель из бромида лантана, легированного церием ($LaBr_3$:Ce). Подобные гибридные структуры объединяют преимущества органических сцинтилляторов — быстрый отклик и технологичность — с высокой светосцинтилляционной эффективностью неорганических кристаллов. Однако их эксплуатационная стабильность ограничивается деградационными процессами, вызванными гигроскопическим взаимодействием с окружающей средой.

Проникая в структуру композита через поры, вода инициирует ряд необратимых процессов. Гигроскопичный $LaBr_3$:Ce склонен к образованию кристаллогидратов (например, $LaBr_3 \cdot nH_2O$), что нарушает кристаллическую решётку и снижает эффективность сцинтилляции. Последующее растворение кристаллов в адсорбированной воде приводит к формированию насыщенных растворов, расслоению композита и деградации полистирольной матрицы. Эти изменения не только уменьшают световыход, но и снижают механическую стабильность материала.

В ходе исследования механизмов гидратационной деградации гибридного композита «полистирол/$LaBr_3$(Ce)» был разработан метод стабилизации материала путём электростимулированной дегидратации. Ключевым результатом работы стала демонстрация управления фазовым состоянием неорганического наполнителя в пористой полимерной матрице, что открывает перспективы создания композитов с заданными свойствами. Предложенный метод подавления гидратации с использованием электрического поля (10 кВ/см) представляет принципиально новый подход. Установлено, что воздействие поля индуцирует электрохимический синтез оксибромида лантана (LaOBr) в порах полистирола, что подтверждено рентгенодифракционным анализом. Ограниченная порами морфология предотвращает агломерацию частиц и обеспечивает узкое размерное распределение, критически важное для сохранения высокой сцинтилляционной эффективности.

Полученные результаты подчёркивают важность создания гибридных систем с управляемой микроструктурой. Возможность формирования кристаллов LaOBr заданных размеров в порах полимера позволяет регулировать оптическую анизотропию материала, влияя на поляризацию люминесценции и квантовый выход. Это открывает перспективы разработки сцинтилляторов, устойчивых к эксплуатации в условиях повышенной влажности, таких как медицинская диагностика или мониторинг ядерных объектов. Таким образом, комбинация пористой полимерной матрицы и электростимулированных методов обработки представляет универсальную платформу для синтеза функциональных материалов с улучшенными свойствами.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.128

# Магнитные свойства монокристаллов $Nb_xBi_2Se_3$ вблизи критической температуры

**Тютвинов В.А.[1, 2], Сидельников М.С.[1], Тимонина А.В.[1], Колесников Н.Н.[1], Россоленко А. Н.[1], Зверев В.Н.[1], Винников Л.Я.[1]**

[1]*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия*

[2]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

Нематическая сверхпроводимость характеризуется спонтанным нарушением симметрии вращения параметра порядка Δ(k), что приводит к формированию вихрей Абрикосова эллиптической формы, например, в $Bi_2Se_3$ легированных Cu, Sr или Nb.

Исследование Sr- и Nb-допированных систем [1] с высокой долей сверхпроводящей фазы в объеме (75~100%) с помощью СТМ не выявило сверхпроводящего состояния на поверхности. При этом вихревая структура была обнаружена в $Cu_xBi_2Se_3$ [2] на <5% поверхности, при доле объемного эффекта ~17%.

Для изучения вихревой структуры $Nb_xBi_2Se_3$ (x=0.25, $T_c$=3.6 K), выращенного методом self-flux, применена техника декорирования. Для контроля температуры эксперимента использовалась плёнка In толщиной 250 нм с $T_c$=3.41 K.

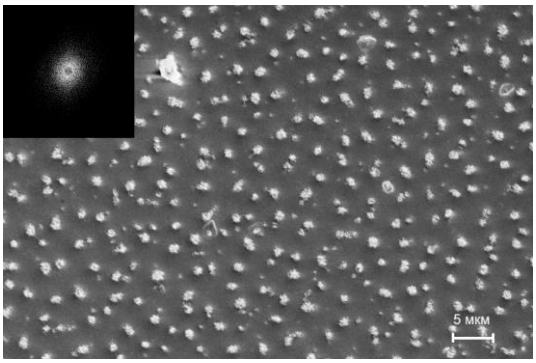



**Рис. 1.** СЭМ-изображение пленки In. Внешнее магнитное поле H = 10 Гс. В левой части изображения приведен соответствующий фурье-образ.

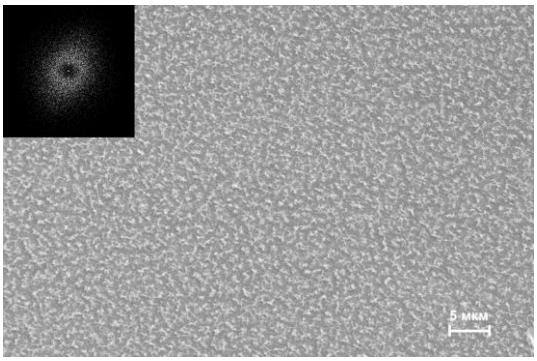



**Рис. 2.** СЭМ-изображение монокристалла $Nb_xBi_2Se_3$. Внешнее магнитное поле H = 10 Гс. В левой части изображения приведен соответствующий фурье-образ.

При исследовании структуры магнитного потока $Nb_xBi_2Se_3$ в поле 10 Гс не обнаружено вихрей Абрикосова. Обнаружено рамытие сверхпроводящего перехода при магнитных измерениях вблизи $T_c$ в полях до 100 Э.

Отсутствие вихревой структуры можно объяснить формированием некоррелированных сверхпроводящих слоев с пирловскими вихрями, а также термическим движением вихрей Абрикосова вблизи температуры сверхпроводящего перехода.

Авторы благодарят ЦКП ИФТТ РАН и Е. Ю. Постнову за проведение СЭМ-измерений. Работа выполнена в рамках госзадания.

## Литература

1. Wilfert S. et al. Scanning tunneling spectroscopy investigations of superconducting-doped topological insulators: Experimental pitfalls and results // Physical Review B. – 2018. – Т. 98. – №. 8. – С. 085133.
2. Tao R. et al. Direct visualization of the nematic superconductivity in Cu x Bi 2 Se 3 // Physical Review X. – 2018. – Т. 8. – №. 4. – С. 041024.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.129

# ТЕКСТУРНЫЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ПРИРОДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО УГЛЕРОДА

**Антонец И. В.[1], Устюгов В. А.[2]**
[1] *СГУ им. Питирима Сорокина, г. Сыктывкар, Россия,* aiv@mail.ru
[2] *СГУ им. Питирима Сорокина, г. Сыктывкар, Россия,* ustyugov@syktsu.ru

Интерес исследователей к природному разупорядоченному углероду (шунгитам и антраксолитам) обусловлен наличием ряда полезных для промышленности свойств. Среди них химическая стабильность, высокая электропроводность [1], потенциал для применения в составе комплексных металлорганических адсорбентов [2]. При этом в настоящее время не существует общепринятой модели строения шунгитов в силу разнообразности агрегатов составляющих его графеновых слоев. Основной метод исследования структуры природного разупорядоченного углерода — высокоразрешающая электронная просвечивающая микроскопия (ВРЭМ) показывает наличие в образцах графеновых пачек, лент, глобул, находящихся в сложной пространственной конфигурации [3]. Открытым остается вопрос о достоверном определении статистических распределений по размерам, количеству этих структурных образований, а также их связи с физическими свойствами.

В настоящей работе предложен компьютерный алгоритм для автоматизированной сегментации изображений ВРЭМ шунгитовых образцов на области с высокой и низкой степенью структурированности. В основу метода положено исследование текстурных свойств участков изображений с применением метрик Харалика для матрицы совместной встречаемости градаций серого [4]. Выявлено, что использование таких метрик как «энергия» и «энтропия» (термины из оригинальной работы Харалика [4]) позволяют с высокой степенью точности определять участки изображений, содержащие структурные элементы («энтропия»), а также шунгитовые поры, характеризующиеся отсутствием четко просматриваемой структуры («энергия»). Применение к полученным распределениям признаков Харалика по участкам изображений микроскопии образца процедур поиска локальных максимумов позволяет с хорошей точностью определять границы структурных элементов (пачек и лент из графеновых слоев или пор).

С использованием разработанного согласно вышеописанным алгоритмам программного обеспечения получены статистические распределения участков поверхности образцов разупорядоченного углерода по степени структурированности, оценены размеры пор и отдельных локализованных структурных образований.

Исследование проведено в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина» от 17.01.2024 № 075-03-2024-162 по теме «Влияние структуры на статические и динамические электропроводящие свойства разупорядоченного углерода».

## Литература

1. Golubev, Ye.A., Antonets, I.V. // Nanomaterials. – 2022. – V.21, № 12. – P.3797.
2. Sukhinina, N.S., Khodos, I.I., Zver'kova, I.I., Turanov, A.N., Karandashev, V.K., Emel'chenko, G.A. // Inorg. Mater. – 2022. – V. 58, №10. – P.1114–1121.
3. Golubev, Ye.A., Antonets, I.V., Korolev, R.I., Prikhodko, A.S., Borgardt, N.I., Sun, S. // Materials Chemistry and Physics. – 2024. – V. 317. – P.129181.
4. Haralick, R.M., Shanmugam, K., Dinstein, H. // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. – 1963. – V. SMC-3, №6. – P. 610−621.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.130

# Низкотемпературные зависимости сопротивления и магнитосопротивления многослойных плёнок $[(CoFeB+SiO2)+ZnO]_{50}$ в магнитных полях 0–9 Тл

**Уткин А.А.[1], Котов Л.Н.[1], Заговорич А.Д.[1], Ситников А.В.[2], Калинин Ю.Е.[2]**
*[1]Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия*
*[2]Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*
e-mail: utych@yandex.ru

Интенсивное развитие технологий искусственного интеллекта стимулирует разработку новой электронной компонентной базы [1]. В связи с возможным практическим применением многослойных плёнок: магнитный композит-диэлектрик, представляют значительный научный интерес для исследований магнитных и электрических свойств [2, 3]. В работе были исследовались образцы многослойной плёнок $[(CoFeB+SiO_2)+ZnO]_{50}$, сформированные на подложках из ситалла методом ионно-лучевого напыления в атмосфере аргона [2, 3]. Каждая плёнка состояла из 50 последовательно нанесенных пар композитного слоя ($CoFeB+SiO_2$) и диэлектрического слоя ZnO. Толщина нанослоев составляла от 2 до 4 нм. Для исследования температурных зависимостей сопротивления были выбраны пять образцов с толщиной композитного слоя 2 нм и слоя ZnO - 4 нм и концентрациями металлического сплава $x$ = 0.38, 0.47, 0.55, 0.76 и 0.80 соответственно. Исследования сопротивления проводились в интервале температур 20-400 К и в магнитных полях от 0 до 9 Тл, приложенных перпендикулярно плоскости плёнок. Эксперименты показали, что для всех исследованных образцов наблюдается экспоненциальное уменьшение электрического сопротивления на 2-4 порядка при повышении температуры от 20 до 400 К. Также сопротивление экспоненциально уменьшается и с ростом индукции магнитного поля от 0 до 9 Тл. Для большинства плёнок наблюдалось уменьшение отрицательного магнитосопротивления (МС) с ростом температуры, например, для плёнки с $x$ = 0.72 от -0.1 при 20 К до -0.02 при 400 К. Интересно, что для плёнки с $x$ = 0.72 при поле 3 Тл наблюдался широкий температурный максимум положительного МС с относительной величиной +4 при Т = 80 К. Также в работе был проведен анализ и аппроксимация кривых температурных зависимостей МС. Для образцов с $x < 0.6$ температурная зависимость МС хорошо описывается логарифмической функцией. Кроме того, при температурах ниже 180-200 К эти зависимости согласуются с законом «1/2» ($\propto T^{-1/2}$), что указывает на доминирование механизма туннелирования носителей заряда между металлическими гранулами для композитных слоёв ниже порога перколяции. В многослойных плёнках с $x > 0.75$ логарифмический закон для МС не выполняется, особенно, при температурах ниже 50 К. Наблюдаемое поведение может свидетельствовать о переходе к механизму проводимости, характерному для сплошных проводников, что согласуется с высокой концентрацией металлической фазы $x$, превышающей порог перколяции.

**Исследования были выполнены за счёт гранта РНФ, проект № 21-72-20048.**

## Список литературы

1. W. Huang, X. Xia, C. Zhu, P. Steichen, W. Quan, W. Mao, J. Yang, L. Chu, X. Li. Nano-Micro Lett., **13**, 85 (2021). DOI: 10.1007/s40820-021-00618-2
2. Ю.Е. Калинин, А.В. Ситников, В.А. Макагонов, В.А. Фошин, М.Н. Волочаев Прыжковая проводимость в многослойных наноструктурах {[(Co40Fe40B20)34(SiO2)66]/[ZnO]}n // Физика твердого тела, 2024, том 66, вып. 11. С.1941-1949. DOI: 10.61011/FTT.2024.11.59331.305
3. Котов Л.Н., Уткин А.А., Калинин Ю.Е., Ситников А.В., Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика, 15(4), 85-92 (2023).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.131

# Quantum-mechanical calculations of elastic and thermal properties of C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase

**Vasilyev D. A.[1], Ikhsanov R. S.[2], Zheleznyi M. V.[1,3], Kartsev A. I.[4]**
[1] *A.A. Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS, Moscow,*
[2] *HSE, Moscow Institute of Electronics and Mathematics, Moscow,*
[3] *Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia,*
[4] *Computer Center of the Far Eastern Branch of RAS, Khabarovsk, Russia*
dvasilyev@imet.ac.ru

Compounds with structures of the Laves phase, which are precipitated in the matrix of steels or superalloys at high temperatures, are usually considered useful strengthening phases, whose elastic and thermal properties are of considerable interest. In our work, the coefficients of the elastic tensor of the C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase were calculated. The calculations were obtained using the density functional theory (DFT). The elastic characteristics, namely the bulk modulus of elasticity, shear moduli, Young's modulus and Poisson's ratio, and the thermal properties like sound wave velocities and Debye temperature, were obtained. The factors influencing the anisotropy of the elastic properties of Fe6Nb4Al2 were calculated.

The hexagonal Laves phase Fe2Nb with the C14 structure has a large solubility region. It has recently been confirmed that the addition of aluminum to the Laves phase increases the invariant equilibrium temperature with α-Fe to 1000 °C [1].

In order to understand how to use the Fe2Nb Laves phases for strengthening steels and superalloys at high temperatures, an attempt was made to calculate the thermodynamics of the C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase. For this purpose, the elasticity coefficients (Cij) of the Fe6Nb4Al2 strain tensor were calculated. Cij were calculated through changes in the total energies ΔE(δ) depending on the applied strains δ, corresponding to different types of distortions Di of the crystal lattice

Table 1 shows the elasticity coefficients Cij of the deformation tensor of Fe6Nb4Al2, which were calculated by applying distortion matrices to the crystal lattice using the method described in [1-3].

Table 1. Elasticity coefficients Cij of the deformation tensor (in GPa) of the intermetallic compound C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase, calculated for the ground state (T = 0 K).

| | $C_{11}$ | $C_{12}$ | $C_{13}$ | $C_{33}$ | $C_{44}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $Fe_6Nb_4Al_2$ | 383.4 | 124.5 | 88.4 | 324.3 | 88.4 |

## References

1. Vasilyev, D., Ikhsanov, R.S., Zheleznyi, M., Kartsev A. Calculations of elastic and thermal properties of the strengthening C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase using the density functional theory. J Mater Sci 60 (2025) 5427–5441.
2. D. Vasilyev, Comparison of thermal expansion path of the Fe2Mo Laves phase calculated using the DFT-based phonon and Debye-Gruneisen approaches, Materials Today Communications 35 (2023) 105550.
3. Vasilyev D, Gorev V, Thermal expansion path, mechanical and thermodynamic properties of C14 Fe2Nb Laves phase calculated using density functional theory, Physica B: Condensed Matter, 699 (2025) 416850.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.132

# Структура и оптические свойства серебряных нанокластеров и наночастиц, сформированных ФС-лазером в цинк-фосфатном стекле

**Викленко И.А.[1], Срабионян В.В.[1], Дурыманов В.А.[1], Ветчинников М.П.[2], Рубаник Д.С.[1], Авакян Л.А.[1], Шахгильдян Г.Ю.[2], Липатьев А.С.[2], Сигаев В.Н.[2], Бугаев Л.А.[1]**

[1]*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия,* viklenko@sfedu.ru

[2]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

Одним из перспективных подходов к усилению люминесценции редкоземельных ионов (РЗИ) в лазерных средах является сенсибилизация редкоземельных ионов за счёт их взаимодействия с металлическими нанокластерами (НК) и плазмонными наночастицами (НЧ). Установленные механизмы таких взаимодействий показали зависимость усиления люминесценции от множества факторов, требующих тщательного подбора исходных компонентов, их концентрации, методов и условий синтеза материалов (НК-РЗИ/стекло), а также понимания структурных состояний выбранных компонентов и их трансформаций в ходе синтеза. Одним из эффективных способов создания НК/НЧ является обработка лазером стекла, содержащего все необходимые компоненты металлов и РЗИ, поскольку именно с использованием лазера удобно создавать упорядоченные структуры НЧ/НК в стекле.

В данной работе представлены результаты структурного анализа, выполненного методом XAFS-спектроскопии, НЧ/НК серебра, сформировавшихся в цинк-фосфатном стекле в результате лазерной записи. Анализ K-края XAFS спектров образца, содержащего серебро показал, что порядка 65% серебра в области лазерного трека остается в ионном состоянии, связанным с кислородом, в то время как порядка 35% серебра присутствует в состоянии НК/НЧ. XAFS-анализ выполнен для области стекла, модифицированного в результате лазерной записи. Поскольку при такой фокусировке захвачена также область необработанного стекла, сделан вывод, что доля сформировавшихся в треках НЧ больше, чем 35%. Сформированные таким образом малые НЧ серебра со средним размером меньше 2 нм продемонстрировали явно выраженный локализованный поверхностный плазмонный резонанс, расположенный на длине волны 450 нм, положение которого не менялось при увеличении скорости лазерной записи до 100 мкм/с.

Грант выполнен при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-12-00102)

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.133

# ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЙ ПЕРЕХОД В $LuB_{12}$ ПО ДАННЫМ ЯМР.

**Вяселев О.М.[1], Гиппиус А.А.[2],Случанко Н.Е.[3]**
[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*, vyasel@issp.ac.ru
[2]*МГУ им.М.В.Ломоносова; ФИАН, Москва, Россия,* gippius@mail.ru
[3]*ИОФ РАН, Москва, Россия,* nes@lt.gpi.ru

Приведены данные по ЯМР $^{175}$Lu, указывающие на структурный переход при $T^*$=150К, вызванный кооперативным эффектом Яна-Теллера (КЭЯТ) в $LuB_{12}$.

$^{175}$Lu — чувствительнейший ЯМР-зонд для изучения структурных дефектов благодаря огромному квадрупольному моменту. Согласно [1], спектр ЯМР $^{175}$Lu представлен суммой узкой (N - narrow) и широкой (B - broad) линий, что связано с дефектностью структуры — разбросом градиента электрического поля (ГЭП) на позиции Lu, где номинально ГЭП=0. Ширина B-линии определена разбросом квадрупольных сдвигов I порядка $\Delta_B \propto \nu_Q|f_I(\eta)|$, а N-линии — II порядка $\Delta_N \propto \nu_Q^2|f_{II}(\eta)|$, где $\nu_Q$ — средняя частота квадрупольных взаимодействий, $f_I$ – линейная, $f_{II}$ – квадратичная функция параметра асимметрии $\eta$ тензора ГЭП. Поэтому при постоянном или равномерным по температуре $\eta$, $\Delta_B$ должна быть гладкой функцией $\Delta_N^{1/2}$. Особенности при $T^*$= 150 К на зависимостях $\Delta_B(\Delta_N^{1/2})$ при охлаждении и при отогреве (рис.1) указывают на *качественное* изменение $\eta$, следовательно, на скачкообразное изменение симметрии решётки. Гистерезисный характер поведения ширины линии свойственен фазовому переходу I рода. В пользу фазового перехода свидетельствует также изменение характера $T$-зависимости скорости спин-решёточной релаксации $1/T_1$ от $T^2$ при $T>T^*$ к $\exp(-\Delta/T)$ при $T<T^*$ с $\Delta/k_B$=206К.

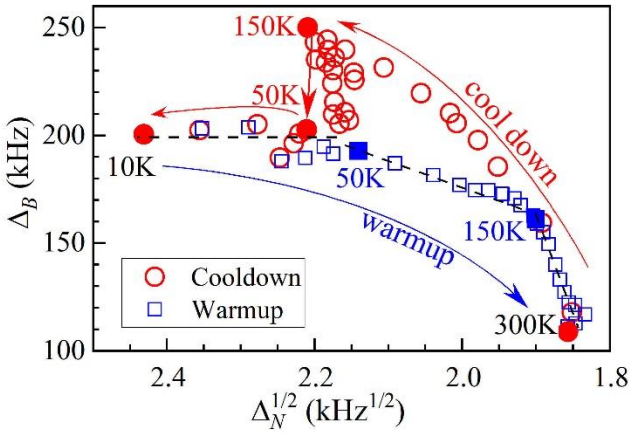



Рисунок 1 — Ширина широкого вклада в линию ЯМР $^{175}$Lu как функция корня из узкого вклада.

Обнаруженный в $LuB_{12}$ структурный переход, по-видимому, обязан КЭЯТ. Согласно [2], борный каркас $RB_{12}$ подвержен искажению номинальной *гцк* решётки вследствие КЭЯТ. При этом понижение симметрии из-за КЭЯТ должно происходить в результате структурного фазового перехода [3], который до сих пор не был документирован в других $RB_{12}$: жёсткий борный каркас препятствует масштабным изменениям структуры и резким температурным изменениям физических свойств. Однако, соединения $RB_{12}$ с разнообразными свойствами, заданными РЗ R-катионами (Кондо-диэлектрик, сверхпроводимость, антиферромагнетизм) имеют особенности вблизи $T^*$=150К [2], что естественно связать с изменениями в общей для них борной решётке — с Ян-Теллеровским переходом.

Приведённые данные являются первым свидетельством структурного Ян-Теллеровского перехода в додекаборидах ($RB_{12}$).

Работа выполнена в рамках госзадания.

## Литература

1. О.М.Вяселев и др., Письма в ЖЭТФ **119**, 524 (2024).
2. Rare-Earth Borides, ed. D. S. Inosov (2021), Jenny Stanford Publishing.
3. G. A. Gehring, K. A. Gehring, Rep. Prog. Phys. **38**, 1 (1975).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.134

# ЯМР ДОПИРОВАННОГО СВИНЦОМ Bi:2201.

**О. М. Вяселев**
*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,* vyasel@issp.ac.ru.

Представлено ЯМР исследование $^{63}$Cu системы Bi:2201, легированной Pb, $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_{2.05}CuO_y$ ($y \approx 6$). ЯМР измерения выполнены в магнитном поле $\mu_0 H$=7Тл на монокристалле размером 3×5мм$^2$ в плоскости (*ab*) и 1мм вдоль оси *c* в геометрии $H \| c$. Температура сверхпроводящего перехода $T_C$ измерена по изменению резонансной частоты $\nu_t$ LCR-контура датчика ЯМР (вставка на рис.1), связанному с экранировкой образца сверхтоками при переходе в сверхпроводящее состояние.

Соединение $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_{2.05}CuO_y$ — сверхпроводник с $T_{C0}$=16K. Температурные зависимости сдвига резонансной линии ЯМР $^{63}K$ (рис.1) и скорости ядерной спин-решёточной релаксации $^{63}$Cu выявили псевдощель, которая открывается при $T^*\approx$60K. Это намного выше $T_C\simeq$9K, измеренной в поле ЯМР эксперимента 7Тл в ориентации $H \| c$ (рис.1) Заметное расхождение между $T_C$ и $T^*$ и температурное поведение скорости спин-решёточной релаксации Cu при $T>T^*$ указывают на недолегированное (underdoped) состояние изучаемой системы. Магнитное поле оказывает относительно слабое влияние на сверхпроводимость в изучаемой системе, о чем свидетельствует небольшой (7-8K) сдвиг $T_C$ полем 7Тл (вставка на рис.1). Этот факт предполагает высокое значение верхнего критического поля, необычное для соединения с такой низкой $T_C$.

Монокристалл для исследований предоставлен сотрудниками IFW (Дрезден, Германия) S.Wurmehl и А.Н.Малюком.

Работа выполнена в рамках госзадания.

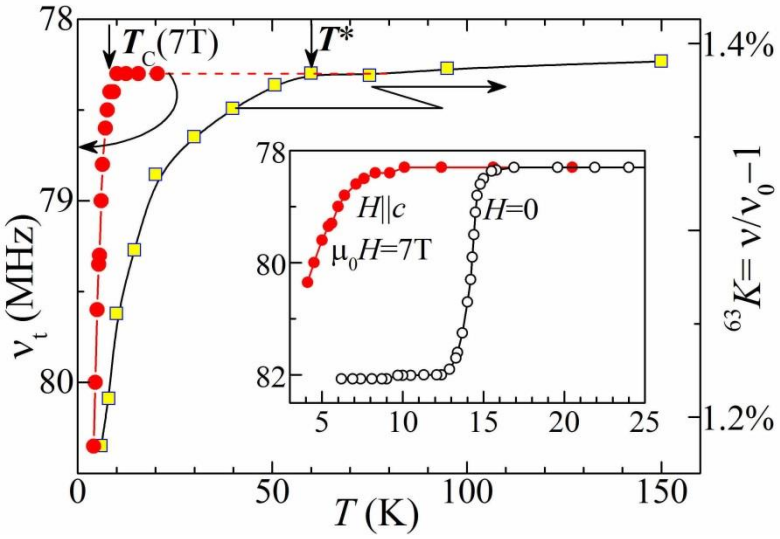



Рис. 1.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.135

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ РОСТА И СНИЖЕНИЕ ДЕФЕКТНОСТИ КРИСТАЛЛОВ КРС-5 С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

**К.С. Зараменских, С.В. Ерохин, М.С. Кузнецов, С.М. Пилюшко, А.Р. Корнеева**
*АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, Москва, Россия,* KSZaramenskikh@rosatom.ru

Галогениды таллия обладают равномерной прозрачностью в очень широком диапазоне длин волн, охватывающем видимую и среднюю инфракрасную области спектра от 0,35 до 50 мкм. Пропускание составляет до 70% при коэффициенте отражения 30%, полосы поглощения в диапазоне пропускания отсутствуют. В зависимости от состава галогениды талия находят применение в различных областях. Среди галогенидов таллия кристаллы КРС-5 (42,5% TlBr - 57,5% TlI) являются наиболее перспективными для применения в космической астрофизике, тепловидении и спектрофотометрии. Кристаллы обладают механической, химической и вибрационной прочностью и влагостойкостью, благодаря чему пригодны для работы в атмосферных условиях без специальной защиты. Сочетание характеристик кристаллов КРС-5 может позволить улучшить свойства оборудования в диапазоне до 10 мкм и послужить основой создания новых устройств, работающих в диапазоне от 10 до 50 мкм, не имеющих аналогов [1-2].

Однако высокие требования к качеству материала приводят к существенным сложностям производства данных монокристаллов. Без точных условий роста выращиваемые образцы часто получаются поликристаллическими, непригодными для коммерческого использования [3]. Целью данной работы является определение оптимальных параметров роста с помощью численных методов.

В работе используется метод конечных элементов для расчёта градиента температур в модели роста кристалла КРС-5 в мультизонной печи. Модель ампулы создавалась в пакете MATLAB с использованием модуля для решения уравнений в частных производных Partial Differential Equation Toolbox (PDEs). Задача распределения температур решалась в осесимметричном приближении.

С помощью метода компьютерного моделирования рассчитано распределение температур в материале в процессе роста, на основе чего определены положение и форма фронта кристаллизации и причины поликристалличности прежних образцов. Расчёты позволили установить новые параметры роста и получать кристаллы КРС-5 с низкой степенью блочности, подходящие для коммерческого использования.

## Литература

1. Лапшин В.В. и др. // Фотоника. – 2021. – Вып. 1 (15). – С. 18-28.
2. Хоркин В.С. и др. // Волновая электроника и инфокоммуникационные системы. Сборник статей. XXVI Международная научная конференция. В 3-х частях. Санкт-Петербург. – 2023. – С. 95-100.
3. Лисицкий И.С. и др. // Цветные металлы. – 2004. – №2. – С. 81-84.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.136

# ЭФФЕКТ АНОМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРЕМНИИ

**Зотов А. А.[1, 3], Терещенко А. Н.[1], Королев Д. С.[2], Никольская А. А.[2], Михайлов А. Н.[2], Белов А. И.[2], Тетельбаум Д. И.[2]**

[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, tan@issp.ac.ru*

[2]*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», г. Нижний Новгород, Россия*

[3]*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия, aleksandr.zotov.99@mail.ru*

В настоящее время основной проблемой кремниевой оптоэлектроники является создание эффективного источника излучения на кремниевой основе. Многочисленные попытки решения этой проблемы до настоящего времени не привели к созданию источника излучения, эффективность которого была бы достаточна для применения кремния в оптоэлектронных устройствах. Весьма перспективным вариантом решения этой проблемы является использование излучательной способности дислокаций в кремнии. Особенный интерес с этой точки зрения представляют центры, ответственные за длинноволновую линию D1 (~1.5 мкм). Среди различных методов генерации этих дефектов наиболее оптимальным представляется метод ионной имплантации с последующей термообработкой кристалла. Этот метод позволяет проводить модификацию параметров центров ДЛ в широких пределах с помощью изменения режимов облучения, дополнительного ионного легирования и термообработки. Однако одним из главных препятствий к практическому использованию ДЛ является ее сильное температурное гашение. В свою очередь, в последнее время было обнаружено, что при дополнительной имплантации образцов ионами $B^+$ можно наблюдать эффект аномальной температурной зависимости ДЛ: ее интенсивность кратно увеличивалась при повышении температуры кристалла [1-2].

В данной работе обсуждаются полученные экспериментальные результаты по влиянию параметров (температура, длительность, атмосфера) термообработок на температурную зависимость люминесценции дислокационных структур, сформированных путем облучения кремния ионами $Si^+$ и последующей дополнительной имплантации ионов $B^+$. Установлено, что дополнительные отжиги исследуемых образцов могут приводить к сильному смещению максимума интенсивности линии D1 на температурной зависимости, причем положение максимума и его интенсивность определяется длительностью термообработок. В работе также показано, что от температуры отжига исследуемых образцов зависит само проявление эффекта аномальной температурной зависимости ДЛ.

## Литература

1. Tereshchenko A., Korolev D., Khorosheva M., Mikhaylov A., Belov A., Nikolskaya A., Tetelbaum D. // Physica Status Solidi A. 2019. V. 216. P. 1900323. DOI: 10.1002/pssa.201900323
2. A.N. Tereshchenko, A.A. Zotov, D.S. Korolev, A.A. Nikolskaya, A.N. Mikhaylov, A.I. Belov, D.I. Tetelbaum // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – Vol. 18, Iss. Suppl. 1. – P. S193–S197. – DOI:10.1134/S1027451024702057

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.137

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВМСИМОСТЬ ПРОВОДИМОСТИ В СТРУКТУРАХ n-$Al_{0.24}Ga_{0.74}$ As/GaAs

**Агалиева С.Т., Маммадов Т.С., Ширинов М.М.**
*Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*
E-mail: saghaliyeva@yahoo.com

В этой работе структура pin-диода $Al_x$ $Ga_{1-x}$ As/GaAs была выращена с помощью устройства молекулярно-пучковой эпитаксии SEMICON VG80H и были исследованы электрофизические характеристики. Сначала легированная цинком (100) подложка GaAs p-типа нагревалась до 400 ºC с шагом 0,2 ºC/c. Затем температура увеличивалась до 690 ºC с шагом 0,1 ºC/c. Удаление оксидного слоя наблюдалось с помощью RHEED. После этого температура подложки была снижена до 640 ºC, температуры роста. После этого сначала выращивался нелегированный буферный слой GaAs i-типа толщиной 5000 Å со скоростью роста 2,78 Å/c. Затем выращивался слой $Al_{0,24}Ga_{0,76}As$ n-типа толщиной 0,5 мкм ($n_{Si}$=5x$10^{17}$ $см^{-3}$) со скоростью роста 0,447 Å/c для AlAs и 0,67 Å/c для GaAs. Затем был наращен эпитаксиальный слой GaAs n-типа ($n_{Si}$=1x$10^{18}$ $см^{-3}$) с примесью Si толщиной 500 Å со скоростью роста 2,78 Å/c. Наконец, температура подложки была снижена до 400 ºC с шагом 0,1 ºC/c. Затем были изготовлены контакты Шоттки толщиной 2500 Å (выпрямитель) путем испарения Au в высоком вакууме ($10^{-6}$ Торр). Контакты выпрямителя имеют точечную геометрию площадью 0,011 $см^2$. Характеристики I-V, C-V и G/W-V структуры Au/$Al_{0,24}$ $Ga_{0,76}$ /p-GaAs измерялись при различных температурах в диапазоне температур 79К-400К с использованием криостата Janes 475 с регулируемой температурой. Вольт-амперные характеристики подготовленного материала были получены с использованием программируемого источника постоянного тока Keithley 220 и электрометра Keithley 614. Характеристики C-V и G/W-V измерялись на частоте 100 кГц с помощью анализатора импеданса HP 4192 LF (5 Гц-13 МГц). Характеристики прямого смещения (I-V-T), обратного смещения (C-V-T) и (G/w-V-T) приготовленных структур Au/$Al_{o,24}$ $Ga_{0,76}$ /p-GaAs были исследованы в диапазоне температур 79 К-400 К.

Были получены профили распределения значений $N_{ss}$ и $R_s$, вызывающих отклонение от идеальной ситуации, в зависимости от напряжения и температуры. Из экспериментальных результатов следует, что в то время как значения n, $R_s$ и $N_{ss}$ уменьшаются с ростом температуры, значения $Ф_{Bo}$ увеличиваются. Такое поведение можно объяснить молекулярной перестройкой и перегруппировкой на границе раздела металл-полупроводник. Кроме того, наблюдалось несоответствие между значениями $Ф_B$(C-V), полученными из C-V характеристик, и $Ф_{Bo}$, полученными из I-V характеристик. Эту аномалию можно объяснить, предположив, что высота барьера имеет гауссовское распределение со средним значением σs и стандартным отклонением σs. Другими словами, можно объяснить, что ток в измерениях ВАХ контролируется током, протекающим через область с низким барьером Шоттки. В данном исследовании, учитывая фактор идеальности в выражении обратного тока насыщения, значения высоты барьера $Ф_{Bo}$, полученные из характеристик I-V, были скорректированы (n* $Ф_{Bo}$) и сделаны совместимыми со значениями $Ф_B$(C-V), полученными из измерений C-V обратного смещения.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.138

# Эволюция магнитной доменной структуры и величины ГМИ эффекта микропроводов при частичной нанокристаллизации поверхностного слоя

**Фукс А.А.[1], Аксенов О.И.[1], Аронин А.С. [1]**
[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,* oleg_aksenov@inbox.ru

Аморфные и нанокристаллические микропровода являются перспективным материалом для построения на их основе сенсоров деформации, магнитного поля, систем электромагнитной экранировки, магнитных меток и других приложений. Данные материалы обладают высокими показателями эффекта гигантского магнитного импеданса (ГМИ) порядка сотен процентов, что сочетается с бистабильной намагниченностью, высокой скоростью движения доменных границ и другими свойствами. Значительный интерес представляют микропровода, полученные методом Улитовского-Тейлора, что обусловлено неоднородным распределением напряжений по сечению таких объектов. Это приводит к формированию в них поверхностного доменной слоя с радиальной ориентацией магнитного момента (в случае положительной магнитострикции) и центрального доменной слоя с осевой ориентацией магнитного момента. Такая структура обусловлена наличием в поверхностном слое сильных сжимающих осевых и касательных напряжений [1]. Как было показано в работе [2], это может ускорять образование нанокристаллов в микропроводах на основе сплава Finemet. Из работы [3] известно, что формирование частично нанокристаллического слоя может заметно улучшить величину ГМИ эффекта (до рекордных на текущий момент значений более 150 %).

В данной работе была исследована поверхностная доменная структура микропроводов на базе сплава Finemet в исходном состоянии и после термообработки, приводившей к существенному росту величины ГМИ эффекта. Обнаружено, что после нанокристаллизации существенно уменьшается величина радиальной компоненты магнитного момента в доменах поверхностного слоя. Однако наблюдаемые особенности магнитной доменной структуры близки к тем, что наблюдались в исходных микропроводах. Таким образом, повышение величины ГМИ эффекта может быть обусловлено относительным ростом касательной компоненты магнитного момента доменов поверхностного слоя.

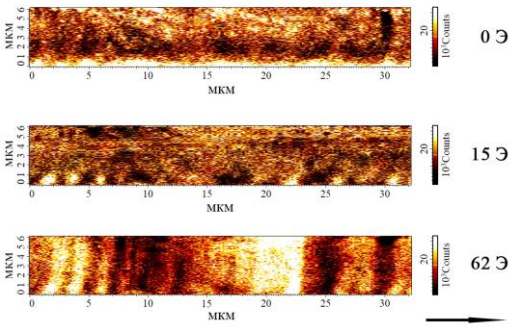



Рис. 1. Магнитная доменная структура исходных микропроводов на базе сплава Finemet

## Литература

1. Chiriac H., Ovari T.A., and Pop Gh. // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 52. – P. 10104.
2. Fuks A., Abrosimova G., Aksenov O., Churyukanova M., Aronin A. // Crystals. – 2022. – Vol. 12. – P. 1494.
3. Fuks A.A., Aksenov O.I., Matveev D.V., Aronin A.S. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2025. – Vol. 614. – P. 172712.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.139

# Колебательный спектр и теплоемкость фазы высокого давления γ-$MgH_2$

**Аксенова Т. А.** [1], **Кулаков В. И.** [1], **Усманов Р. И.** [2]
[1]*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*, aksenova@issp.ac.ru
[2]*Научно исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

Дигидрид магния содержит 7.6 масс.% H и является вторым по водородной ёмкости среди гидридов металлов. Другие его достоинства – доступность и низкая стоимость сырья, а также возможность синтеза в промышленных масштабах. Главный недостаток – высокая термическая устойчивость, требующая нагрева до 400 ºC для выделения водорода. На протяжении многих лет ведутся поиск и исследования менее термостойких и более плотных модификаций $MgH_2$ [1].

Наша работа посвящена синтезу и калориметрическому исследованию орторомбической γ-модификации $MgH_2$, образующейся при давлениях выше 1.5 ГПа из менее плотной тетрагональной фазы низкого давления α-$MgH_2$. Образец массой около 1 г, состоящий на 96% из γ-$MgH_2$ был получен при давлении 5 ГПа и температуре 843 K и переслан в Окриджскую национальную лабораторию в США для исследования методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН) на спектрометре SEQUOIA при $T$ = 7 K. Согласно литературным данным, γ-фаза метастабильно устойчива при нормальных условиях. Однако за время пересылки (более 2 недель) наш образец наполовину перешел в α-фазу.

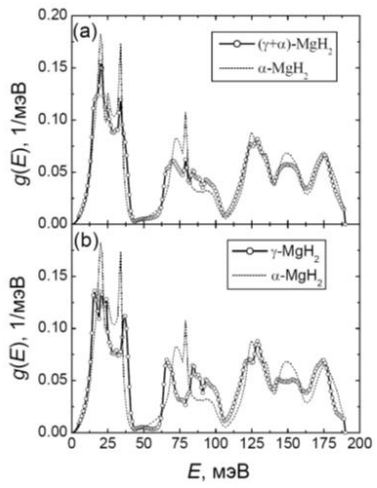



*Рис. 1. Спектры $g(E)$ плотности фононных состояний γ- и α-$MgH_2$*

Спектр $g(E)$ плотности фононных состояний для γ-$MgH_2$ (рис. 1b) был рассчитан как разность между полученным из данных НРН спектром $g(E)$ для смеси γ и α фаз (рис. 1a) и половиной $g(E)$ для α-$MgH_2$, полученным ранее [2]. Точность этого расчета неясна. Для проверки мы рассчитали температурную зависимость изобарной теплоемкости $C_P(T)$ и измерили ее при 120 ≤ T ≤ 298 K на дифференциальном сканирующем калориметре Perkin-Elmer DSC-7 на образце γ-$MgH_2$ массой 27.02 мг, синтезированном из α-$MgH_2$ при 9.0(5) ГПа и 723(20) K.

Экспериментальная зависимость $C_P(T)$ для γ-$MgH_2$ хорошо согласуется с расчетной, что подтверждает хорошую точность определения спектра g(E). Спектры g(E) с достаточной точностью для расчета теплоемкости ранее были получены методом НРН только для трех гидридов: α-$MgH_2$ [2], α-$AlH_3$[3] и CH (многослойный графан) [4]. Несколько неожиданный результат состоит в том, что как расчетная, так и экспериментальная зависимости $C_P(T)$ для γ-$MgH_2$ совпали с α-$MgH_2$ с точностью лучше 0.5%, несмотря на различия в спектрах g(E). Это иллюстрирует надежность довольно широко используемого метода восстановления фононного спектра из зависимостей $C_P(T)$.

**Литература:**

1. Yartys V.A., Lototskyy M.V. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2019. V. 44. P. 7809.
2. Kolesnikov A.I., Antonov V.E. et al. // J. Alloys Compounds. 2011. V. 509S. P. S599.
3. Antonov V.E., Kolesnikov A.I. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 275204.
4. Yartys V.A., Antonov V.E. et al. // Mater. Chem. Phys. 2025. V. 332. P. 130232.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.140

# ВКЛАД СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В ФОРМИРОВАНИЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА СЛОИСТОГО СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА- ПОЛУПРОВОДНИКА $TlGaSe_2$

**В. Б. Алиева[1], Т. Г. Мамедов[1], F. A. Mikailzade[2], M-H. Yu. Seyidov[2]**

*[1]Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*
*[2]Department of Physics, Gebze Technical University, Gebze, Kocaeli, Turkey*
E-mail: vafa_neymatova@mail.ru

Слоистое полупроводниковое соединение $TlGaSe_2$ является несобственным сегнетоэлектриком с температурой Кюри $T_c$ = 107 К. Фазовому переходу (ФП) в сегнетоэлектрическую фазу предшествует ФП из параэлектрической (симметрия $C_{2h}^6$) в несоизмеримую фазу при $T_{inc}$ = 120 К. Многочисленные эксперименты свидетельствуют, что физические свойства соединения $TlGaSe_2$ контролируются в большой степени собственными дефектами кристаллической решетки. Существование таких дефектов в слоистом полупроводнике $TlGaSe_2$ приводит к формированию глубоких акцепторных уровней в зонной структуре. Внутренние дефекты могут существенно изменить электронную структуру вблизи запрещенной зоны и контролировать электронные и оптические свойства $TlGaSe_2$. Дефекты на поверхности полупроводника могут влиять на электрические и оптические свойства поверхности через закрепление уровня Ферми, изгиб зон и рекомбинацию носителей заряда. Поверхностные дефекты могут заряжаться под воздействием внешнего электрического поля, что приведет к образованию приповерхностных заряженных областей.

В настоящем сообщении исследуется природа необычного поведения полярности сигнала пироэлектрического тока вблизи Тс в зависимости от предыстории поляризации образца. Так, при приложении внешнего электрического поля только в температурном диапазоне параэлектрического состояния при режиме охлаждения в темноте, знак тока деполяризации при Тс противоположен полярности внешнего поля. В случае, если образец был поляризован в температурном интервале, включающем область существования несоразмерной фазы, полярность пироэлектрического тока совпадает с полярностью внешнего поляризующего поля. Наблюдения свидетельствуют, что внутреннее электрическое поле присутствует в объеме и приповерхностных областях электрически поляризованного монокристалла $TlGaSe_2$. Проведен анализ механизмов и причин возникновения внутренних электрических полей в $TlGaSe_2$. Показано, что образование внутренних электрических полей в $TlGaSe_2$ обусловлено зарядкой внутренних дефектов в процессе поляризации.

Ранее, методами фотоэлектрической релаксационной (PICTS) и термостимулированной токовой (TSC) спектроскопии были исследованы характеристики (энергия активации и поперечное сечение) электрически активных собственных глубоких дефектов в $TlGaSe_2$, локализованными как в объеме, так и на поверхности образца. Установлена корреляция между эффектами поляризации с результатами PICTS и TSC. Установлено, что локальные электрические поля, создаваемые электрически активными собственными дефектами, расположенными вблизи поверхности образца, ответственны за положительный знак пироэлектрического тока. Локальные электрические поля дефектов кристаллической решётки, локализованные в объеме образца, ответственны за отрицательный знак пироэлектрического тока в этом соединении, регистрируемого экспериментально.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.141

# ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СЛОИСТОМ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ-ПОЛУПРОВОДНИКЕ $TlInS_2$, ЛЕГИРОВАННОМ АТОМАМИ La

**Вафа Б. Алиева**
*Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*
E-mail: vafa_neymatova@mail.ru

Собственные заряженные дефекты и примеси в полупроводниках существенно влияют на их различные физические свойства. Электрическое поле, приложенное к сегнетоэлектрику-полупроводнику (С-П) содержащему собственные глубокие дефекты (ГД) или электрически активные примеси (ЭАП), индуцирует появление в нём микроскопических диполей, которые складываются в макроскопическую поляризацию внутри кристалла. Индуцированная внешним полем макроскопическая поляризация внутри кристалла может существовать и после снятия внешнего поля и называется встроенной. Обычно, нагрев кристалла до комнатной температуры и выше приводит к стиранию указанного встроенного поля. Спонтанная поляризация в сегнетоэлектриках-полупроводниках, существующая в определенном диапазоне температур, может быть изменена под действием встроенного электрического поля. Таким образом, собственные заряженные ГД и ЭАП могут быть визуализированы прямым методом измерения температурной зависимости пироэлектрического тока (ПТ) в исследуемом кристалле. Экспериментальное подтверждение наличия заряженных ГД и ЭАП в С-П является важной фундаментальной проблемой физики твердого тела. Особенная значимость указанной тематики связана с тем, что данная методика может быть использована в диагностики наиболее распространённых структурных дефектов (дефектоскопия) в полупроводниковых материалах, применяемых на практике.

Тройной С-П $TlInS_2$ относится к классу полупроводников со слоистой кристаллической структурой. При комнатной температуре кристаллическая структура $TlInS_2$ относится к моноклинной сингонии с пространственную группой симметрии $C_{2h}^6$. При охлаждении $TlInS_2$ претерпевает два структурных фазовых перехода, в несоразмерную и соразмерную сегнетоэлектрические фазы при температурах $T_i$~216 К и $T_c$~200 К, соответственно.

В данной работе представлены результаты исследований поляризационных эффектов в легированном лантаном $TlInS_2$. Пироэлектрические свойства $TlInS_2$:La исследовались путем измерения тока короткого замыкания через образец в зависимости от температуры. Перед измерениями ПТ, $TlInS_2$:La был поляризован приложением внешнего электрического поля. Было выявлено, что внутреннее поле поляризации в $TlInS_2$:La может концентрироваться среди заряженных ГД, локализованных как на поверхности образца, так и в его объеме, создавая поверхностные и/или объемные внутренние электрические поля, являющиеся суммой полей дипольных моментов заряженных дефектов или примесей. Однозначная корреляция между пироэлектрическими свойствами $TlInS_2$:La и зарядовым состоянием ЭАП La выявлена экмпериментально в рамках данного исследования.

Ранее, методами спектроскопии глубоких центров в полупроводниках, было выявлено наличие пяти глубоких дефектов в $TlInS_2$:La. Четыре из них были идентифицированы как заряженные собственные ГД, поскольку они были обнаружены также и в нелегированном $TlInS_2$. Пятый дефект имел отношение к ЭАП La. Вклад каждого заряженного ГД в поляризационные свойства $TlInS_2$:La был выявлен аномальным поведением ПТ в окрестности температур, в котором соответствующий дефект был изначально зарядово-индуцирован. Встроенное электрического поле, сформированное на примесях La, также было идентифицировано в объемно-легированном полупроводнике $TlInS_2$.

Данная работа была выполнена в лаборатории Оптоэлектроники ИФ, Баку/Азербайджан

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.142

# Бислойные структуры с графеном: DFT моделирование в атомноподобном базисе

**Аникина Е. В.[1], Каплун М. В.[2], Бескачко В.П.[3]**
[1]*ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия,* anikinaev@susu.ru
[2]*ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия,* kaplunmv@susu.ru
[3]*ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия,* beskachkovp@susu.ru

Слоистые системы с графеном представляют интерес для разных областей материаловедения: благодаря своей высокой удельной поверхности графен может служить хорошим адсорбентом, а комбинация с другими двумерными материалами в теории может привести к открытию запрещенной зоны в графене, что интенсифицирует его применение в наноэлектронике. Многие свойства новых материалов (или их ранее не встречавшейся комбинации) достаточно эффективно можно исследовать путем численных экспериментов, поэтому в данной работе с помощью теории функционала электронной плотности моделировалась бислойная структура из монослоя графена и монослоя нитрида углерода $C_2N$, обладающего шириной запрещенной зоной более 1,5 эВ [1].

Расчеты проводились в программном пакете SIESTA [2]. Ячейка моделирования содержала 42 атома (24 атома графена и 18 атомов $C_2N$). Параметр трансляции при использовании DZP базиса [2] атомноподобных орбиталей составил 8,49 Å, а при использовании SZP базиса – 8,56 Å. Разбиение обратного пространства на 19×19×1 *k*-точек позволило получить погрешность вычисления энергии связи слоев не более 10 мэВ.

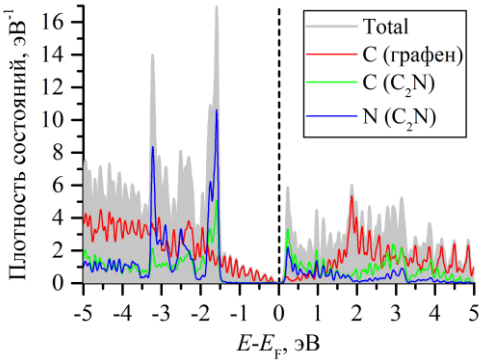



Рис. 1. Диаграмма плотности состояний, полученная для оптимизированного DZP базиса после внесения поправки в геометрию в приближении обменно-корреляционного функционала с полуэмпирическими дисперсионными поправками.

Равновесная геометрия определялась с учетом поправки к ошибке суперпозиции базисного набора [3]. После получения оптимизированной структуры была построена плотность состояний, представленная на рис. 1. К сожалению, взаимодействие слоев оказалось слишком слабым, поэтому для графена по-прежнему наблюдается полуметаллическое состояние, а значит открыть запрещенную зону не удалось. При этом в ходе исследования была уточнена методика моделирования слабосвязанных систем при использовании атомноподобного базисного набора.

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

## Литература

1. Ashwin Kishore M.R., Ravindran P. // J. Phys. Chem. C. – 2017. – V. 121. – № 40. – P. 22216-22224.
2. Soler J.M. et al. // J. Phys. Condens. Matter. – 2002. – V. 14. – № 11. – P. 2745–2779.
3. Kaplun M.V., Anikina E.V., Beskachko V.P. // Bull. South Ural State Univ., Ser. Math. Mech. Phys. – 2022. – V. 14. – № 2. – P. 64-71.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.143

# ПРОЧНОСТЬ КОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРОПИТКОЙ ГРАФИТА ЛЕГКОПЛАВКИМИ МЕТАЛЛАМИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

**Антанович А.А.**
*ФГБУН институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской Академии наук, Москва, г. Троицк, Россия, antanov@hppi.troitsk.ru*

Пропитка графита легкоплавкими металлами позволяет существенно улучшить прочностные свойства получаемых композитов, практически сохраняя полезные свойства исходного графита. Ввиду того, что легкоплавкие металлы практически не смачивают графит, пропитку проводят под высоким давлением. Так как получаемый металлографитный композит можно отнести к категориям хрупких или хрупко-пластичных материалов, основным показателем его прочности можно считать прочность на сжатие ($\sigma_{сж}$). Очевидно, что пропитывающий металл будет способствовать «залечиванию» микротрещин исходного графита, а также препятствовать образованию новых микротрещин в получаемом композите.

Пропитка пористых материалов расплавленными металлами под высоким давлением требует специального оборудования и является достаточно затратной операцией. В то же время эти затраты зависят от температуры плавления ($T_{пл}$) используемого матричного металла: чем ниже температура плавления, тем проще операция пропитки и используемое для этого оборудование. Поэтому представляет определенный интерес сравнение прочности композитов от выбора пропитывающего графит металла. Это позволит выбрать матричный металл в зависимости от потребной прочности композита.

Проведена серия пропиток графита марки МГ ОСЧ индием, свинцом и алюминием Д16. Пропитку графита индием ($T_{пл}$ = 157°C) проводили в стандартной пресс-форме с внешним хомутовым нагревателем. При этом подвижные пуансоны пресс-формы были снабжены специально разработанными уплотнениями на жидкость. Пропитку графита свинцом ($T_{пл}$ = 327°C) или алюминием ($T_{пл}$ = 650°C) проводили с использованием аппарата высокого давления, в котором средой, передающей давление, служил обычный кварцевый песок [1].

Полученные образцы композитов, а также образцы исходного графита были испытаны на прочность при их сжатии на прессе ИП1000. Для испытаний композитов были отобраны образцы с остаточной пористостью в интервале 8-10%. При этом пористость образцов исходного графита перед пропиткой составляла 24-26%. Средние значения результатов испытаний приведены в таблице. Там же показаны значения предела прочности ($\sigma_b$) использованных для пропитки металлов. Единицы всех приведенных значений - мегапаскаль (МПа).

| | C | In | C + In | Pb | C + Pb | Al | C +Al |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\sigma_{сж}$ | 40 | | 63 | | 76 | | 118 |
| $\sigma_b$ | | 2 | | 13 | | 245 | |

Прочность на сжатие композитов будет возрастать при снижении их пористости. Ранее было показано [1], что композит, полученный пропиткой графита ГМЗ, близкого по свойствам к графиту МГ ОСЧ, алюминием Д16 до пористости 3% разрушился при $\sigma_{сж}$ = 207 МПа.

1. A.A. Antanovich. Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron techniques, 2024, No. 3, pp. 620-622. **DOI:**10.1134/S1027451024700204

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.144

# Рентгеновская рефлектометрия в исследованиях твердых и жидких слоистых структур

**Асадчиков В. Е.[1], Рощин Б. С.[1], Волков Ю. О.[1], Тихонов А. М.[2], Нуждин А. Д.[1], Шаблов Ю. С.[1]**

[1] *Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия,* asad@crys.ras.ru

[2] *Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия*

В работе представлены теоретические подходы и экспериментальные результаты, полученные при исследовании твердых подложек из различных материалов для широкого класса применений. Проведено сравнение полученных результатов с данными атомно-силовой микроскопии и оптических измерений [1–3]. Представлены результаты решения обратной задачи рентгеновской рефлектометрии при исследовании нанесенных на такие подложки однослойных и многослойных покрытий. Эти результаты сопоставлены с данными атомно-силовой и электронной микроскопии [3–5]. Отдельно рассмотрены возможности метода для исследования поверхности жидких фаз [6–8] и нанесенных на них органических плёнок [9, 10]. В последнем случае результаты сопоставлялись с данными молекулярно-динамических расчётов и показано их хорошее соответствие [11].

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и Института физических проблем РАН.

## Литература

1. Занавескин М.Л., Занавескина И.С., Рощин Б.С., Асадчиков В.Е., Азарова В.В., Грищенко Ю.В., Толстихина А.Л.// Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2006. – № 3. С. – 80-82.
2. Кожевников И.В., Воронов А.С., Рощин Б.С., Асадчиков В.Е., Медников К.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н., Ванг Д., Джонг Д., Ванг Ф. // Кристаллография. – 2006. – Т. 51. – № 6. – С. 1146-1152.
3. Roschin B.S., Argunova T.S., Lebedev S.P., Asadchikov V.E., Lebedev A.A., Volkov Y.O., Nuzhdin A.D. // Materials. – 2022. V. – 15. – P. 7669.
4. Tholapi R., Karateev I.A., Roshchin B.S., Asadchikov V.E., Slobodskyy T., Hansen W., Vasiliev A.L. // Journal of Applied Physics. –2017. – V. 121. – P. 205308.
5. Асадчиков В.Е., Благов А.Е., Буташин А.В., Волков Ю.О., Дерябин А.Н., Каневский В.М., Муслимов А.Э., Проценко А.И., Рощин Б.С., Таргонский А.В., Чуховский Ф.Н. // Журнал технической физики. – 2020. – Т. 90. – № 3. – С. 419-426.
6. Asadchikov V.E., Bunkin N.F., Volkov V.V., Volkov Yu.O., Nuzhdin A.D., Stepina N.D., Roshchin B.S., Tikhonov A.M. // Physics of Wave Phenomena. – 2021. – V. 29. – No. 2. – P. 131-135.
7. Асадчиков В.Е., Волков Ю.О., Рощин Б.С., Нуждин А.Д., Чернавская Е.Р., Тихонов А.М., Миронов А.В., Мариянац А.О., Попов В.К. // Кристаллография. – 2023. – Т. 68. – № 1 – С. 94-99.
8. Тихонов А.М., Асадчиков В.Е., Волков Ю.О., Рощин Б.С., Хонкимаки В., Бланко М.В. // ЖЭТФ. – 2021. – Т. 159. – № 1. – С. 5-24.
9. Tikhonov A.M., Asadchikov V.E., Volkov Yu.O., Roshchin B.S., Nuzhdin A.D., Makrinsky K.I., Ermakov Y.A. // Membranes. – 2022. – V. 12. – P. 1223.
10. Тихонов А.М., Волков Ю.О., Нуждин А.Д., Рощин Б.С., Асадчиков В.Е. // Кристаллография. – 2024. – Т. 69. – № 3. – С. 476-486.
11. Ermakov Yu.A., Asadchikov V.E., Roschin B.S., Volkov Yu.O., Khomich D.A., Nesterenko A.M., Tikhonov A.M. // Langmuir. – 2019. – V. 35. – P. 12326-12338.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.145

# ПРОГНОЗ ФАЗОВОГО СОСТАВА, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ МОЛИБДЕНОВОЙ СТАЛИ ТИПА М9Ю

**Баклушина И.В., Романов Д.А., Громов В.Е.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,*
baklushina@rambler.ru

Формирование поверхностных слоев, полученных плазменной наплавкой быстрорежущими сталями в защитно-легирующей среде азота является энергоэффективной технологией ремонта и восстановления изношенного оборудования в металлообрабатывающей, машиностроительной и металлургической отраслях промышленности. Создание новых марок быстрорежущих сталей идет по пути замены дорогого вольфрама на молибден. Твердость таких сталей после отпуска и теплостойкость должны превышать W и W-Mo быстрорежущие стали благодаря более тонкой эвтектике и меньшим размерам нерастворимых карбидов.

Методами современного физического материаловедения изучены структурно-фазовые состояния и элементный состав наплавки молибденовой быстрорежущей стали (вес %, Mo-11,9; Cr-4,2; Co-3,5; V-1,8; Si-0,9; Mn-0,5) на среднеуглеродистую сталь 30ХГСА. Показано, что наплавленный слой является многофазным материалом, содержащим твердый раствор на основе Fe и включения карбидной и интерметаллической фаз. Проведена оценка энтропии смешения и показано, что наплавка относится к среднеэнтропийным сплавам. Используя программу MatLab и кристаллохимическую базу данных, выполнены расчеты изменения термодинамических и упругих свойств модельной быстрорежущей стали 72,2 Fe – 12 Mo – 5 Co – 5 Cr – 5 V – 0,8 C близкого химического состава к стали М10 в температурном диапазоне до 1600 °С. Установлено, что увеличение температуры сопровождается α→γ полиморфным превращением, снижением количества карбидов $M_{23}C_6$, $M_3C$, $M_2C$, MC и упругих модулей (модуля Юнга и модуля объемного сжатия).

Плазменной наплавкой в среде азота нетоковедущей порошковой проволокой сплава типа М9Ю на стали 30ХГСА сформирован слой толщиной до 10 мм, имеющий поликристаллическую структуру дендритного типа. Показано, что основными фазами наплавленного слоя являются твердый раствор на основе α-железа (88 мас. %) и твердый раствор на основе γ-железа (12 мас. %). Присутствие на рентгенограмме дифракционных максимумов сравнительно низкой интенсивности позволяет предположить формирование в наплавленном слое частиц карбидной фазы. Осуществлены оценки и показано, что сформированный наплавленный слой стали типа М10 может быть отнесен к среднеэнтропийным сплавам. Выполнены расчеты термодинамических и механических (упругие модули) свойств наплавленного слоя на основе модельной быстрорежущей стали близкого состава. Показано, что в температурной области существования α-фазы в наплавленном слое возможно присутствие частиц карбидов типа $M_{23}C_6$, $M_3C$, $M_2C$ и MC. Увеличение температуры сопровождается α→γ полиморфным превращением железа и снижением количества карбидных фаз. Наиболее тугоплавкими являются карбиды типа $M_2C$ и MC. Выявлено, что увеличение температуры сопровождается размягчением кристаллических решеток α- и γ-железа и монотонным снижением упругих модулей (модуля Юнга и модуля объемного сжатия) данных фаз. Наиболее чувствительным к изменению фазового состава исследуемой стали при нагревании является объемный модуль сжатия.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, https://rscf.ru/project/23-19-00186.*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.146

# Особенности люминесценции гидроксиапатита допированного редкоземельными элементами методом высокотемпературного отжига

**Банишев А.Ф.**
*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия, E-mail: banishev@mail.ru*

Биосовместимые неорганические материалы привлекают значительное внимание в связи с их использованием в различных клинических целях. Гидроксиапатит (ГАП) является одним из наиболее перспективных биосовместимых керамик, который все больше находит применение в биомедицине. Близость состава гидроксиапатита к естественному костному составу и благоприятные физико-химические свойства, такие как твердость, стойкость к различным средам позволяют использовать его в ортопедии и стоматологии как лечебный препарат, а и возможность допирования его различными химическими элементами делают его перспективным кандидатами для биовизуализации и контролируемой доставки лекарств в биообьектах. Гидроксилапатит допированный ионами редкоземельных элементов (РЗЭ) используется в биомедицине для визуализации процессов происходящих в биообьектах выполняя роль биологического зонда. Для этого необходимо, чтобы допированный ГАП обладал высоким выходом люминесценции в нужной области спектра, а излучение слабо поглощалось в тканях биообьекта.

Целью данной работы является получение методом высокотемпературного вакуумного отжига допированного РЗЭ гидроксилапатита $Ca_{5-x}OH(PO_4)_3$ с высоким выходом люминесценции в видимой области спектра. В качестве материалов для допирования ГАП были выбраны окиси европия $Eu_2O_3$, диспрозия $Dy_2O_3$, иттрия $Y_2O_3$ и борная кислота $H_3BO_3$. В результате получены допированные ГАП:$Eu^{3+}$, ГАП:$Dy^{3+}$, ГАП:$Eu^{3+}$,$Dy^{3+}$, ГАП:$Eu^{3+}$,$B^{3+}$, ГАП:$Dy^{3+}$,$B^{3+}$, и ГАП:$Eu^{3+}$,$Y^{3+}$ в которых ионы $Eu^{3+}$, $Dy^{3+}$, $Y^{3+}$ , $B^{3+}$ вероятно занимают вакантные позиции ионов кальция CaI и CaII в структуре ГАП. Допирование ГАП ионами $Eu^{3+}$, $Dy^{3+}$ приводит к появлению узких и интенсивных линий фотолюминесценции в желто-красной области спектра в ГАП:$Eu^{3+}$, ГАП:$Dy^{3+}$, ГАП:$Eu^{3+}$,$Dy^{3+}$, в то время как недопированный ГАП не фотолюминесцирует. Содопирование ионами $Y^{3+}$ и $B^{3+}$ приводит к кардинальному изменению спектров фотолюминесценции в ГАП:$Eu^{3+}$,$Y^{3+}$ и ГАП:$Eu^{3+}$,$B^{3+}$ в спектре которых появляется одна широкая и интенсивная полоса фотолюминесценции с максимумом при $\lambda\approx507$ нм и $\lambda\approx510$ нм соответственно, в то время как спектр ГАП:$Dy^{3+}$,$B^{3+}$ практически не изменился см.рис.1(а-г). Обсуждаются возможные механизмы допирования и изменения спектров фотолюминесценции.

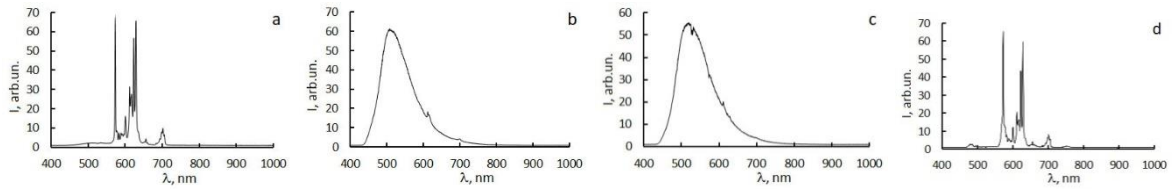



Рис.1. Спектры фотолюминесценции: а)- ГАП:$Eu^{3+}$; b)- ГАП:$Eu^{3+}$,$B^{3+}$; c)- ГАП:$Eu^{3+}$,$Y^{3+}$; d)- ГАП:$Eu^{3+}$,$Dy^{3+}$. Возбуждение спектров лазером $\lambda$=405 нм

Работа проведена в рамках выполнения Государственного задания НИЦ "Курчатовский институт".

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.147

# ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОБРАТНОЕ МАРТЕНСИТНОЕ (α→ γ) ПРЕВРАЩЕНИЕ В МЕТАСТАБИЛЬНОМ СПЛАВЕ Fe-18Cr-10Ni

**Блинова Е.Н.[1], Воронов В.Д. [2], Ишкиняев Э.Д. [2], Либман М.А.[1], Осинцев А.В. [2], Петровский В.Н. [2,] Шурыгина Н.А. [1,3]**

*[1]Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И. П. Бардина, г. Москва, Россия, blinova_en@rambler.ru*
*[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия*
*[3] РТУ МИРЭА, г. Москва, Россия*

Метастабильные сплавы системы железо-хром-никель, в том числе, сплав Fe-18Cr-10Ni (вес%: Fe-18.35Cr-9.65Ni-0.02C) характеризуются наличием прямого (γ→α) и обратного (α→ γ) мартенситных превращений с широким температурным гистерезисом. Это позволяет использовать эти сплавы для создания естественных композитов - материалов, характеризующихся наличием мартенситной матрицы, полученной путем пластической деформации из исходной γ-фазы, в которой определенным образом распределены макроскопические области аустенита [1,2]. Для создания локальных областей аустенита используется сверхбыстрый нагрев интенсивным лазерным излучением, позволяющий, с одной стороны, создавать метастабильные области γ-фазы, по своей структуре и свойствам существенно отличающиеся от γ-фазы, полученной в равновесном состоянии, а, с другой - вследствие локальности лазерного воздействия создавать области аустенита необходимой формы и размеров. Для реализации процесса лазерного воздействия применялся нагрев непрерывным лазером до температур устойчивости γ-фазы (550 - 850°C) с ошибкой измерения температуры не более $50^0$C. Точное определение температуры лазерной обработки представляет собой сложную задачу, для решения которой была построена математическая модель, позволяющая регулировать величину мощности источника лазерного излучения. Измерение температуры на поверхности образца производилось дистанционно с помощью тепловизора FLIR650S. Для создания локальных аустенитных областей заданной формы использовалась установка, оборудованная роботизированным манипулятором MOTOMAN с одномодовым волоконным лазером IPG ЛС-5 мощностью до 5 кВт. Луч, осциллирующий в одном направлении, медленно двигался вдоль обрабатываемого образца, при этом, для избежания перегрева, линия движения была разбита на четыре сегмента, на каждом из сегментов мощность излучения уменьшалась на заданное количество процентов. В результате такого нагрева были изготовлены образцы композита, содержащие области метастабильной γ-фазы различной формы, полученные при различных температурах из указанного выше интервала. Исследование механических свойств материалов с различной формой областей γ-фазы, полученных при указанных выше температурах проводилось путем построения кривых “напряжение-деформация”. В результате проведенных экспериментов было установлено, что изменения формы областей метастабильной γ-фазы, а также температуры их образования существенно влияет на соотношение прочностных и пластических характеристик исследуемого композита, что связано с особенностями строения γ-фазы, полученной в результате лазерного воздействия.

1.Ишкиняев Э.Д., Осинцев А. В., Петровский В. Н. Воронов В. Д., Блинова Е.Н., Либман М. А. //ЖТФ. 2023. Т. 93. Вып. 8, С. 1152-1157
2. Blinova E. N., Voronov V. D., Ishkinyaev E. D., Libman M. A, Petrovskiy V. N., Pichienko V. I., Tomchuk A. A. Physics of Atomic Nuclei, 2023, Vol. 86, No. 9, pp. 2109-2114.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.148

# Ток Вигнера и его связь с квантово-классическим переходом

**Бурков И. Д.[1], Сеидов С. С.[1]**
[1]*НИТУ «МИСИС», Москва, Россия,* masterofphysic@mail.ru

В работе рассматривается поведение тока Вигнера для различных начальных состояний частицы в одномерной квантовой яме, а также его особенности при изучении квантово-классического предела. Функция Вигнера определяет квазивероятностное распределение в фазовом пространстве канонически сопряженных величин. Определяется она как Фурье образ матричного элемента матрицы плотности $\hat{\rho}$, характеризующей состояние системы, между двумя смещёнными состояниями

$$W(x,p) = \frac{1}{\hbar}\mathcal{F}_y\left[\left\langle x + \frac{y}{2}\middle|\hat{\rho}\middle|x - \frac{y}{2}\right\rangle\right]\left(\frac{p}{\hbar}\right).$$

Классическое распределение вероятности в фазовом пространстве подчиняется уравнению Лиувилля. Также для такого распределения можно записать уравнение непрерывности и из системы уравнений найти функцию тока. Аналогичный подход возможен и к функции Вигнера, результатом которого служит ток Вигнера [1]

$$\dot{W}(x,p,t) = -\frac{p}{m}\partial_x W(x,p,t) + i\{\{V(x), W(x,p,t)\}\} = -\nabla \cdot \boldsymbol{j}_W(x,p,t)$$

$$\Longrightarrow \boldsymbol{j}_W(x,p,t) = \begin{pmatrix} \frac{p}{m}W(x,p,t) \\ -\int i\{\{V(x), W(x,p,t)\}\}\,dp \end{pmatrix}$$

где $\boldsymbol{j}_W(x,p,t)$ - ток Вигнера; $m$ - масса частицы; $V(x)$ - потенциал, в котором движется частица; $\{\{\cdot,\cdot\}\}$ - скобка Мояля.

Ток Вигнера определяет траектории в фазовом пространстве системы. Такие траектории обладают особенностями, представляющими интерес для изучения.

Квантово-классический переход осуществляется путём устремления константы Планка к нулю. Также таким переходом служит предел высоких энергий. Для изучения поведения при классическом пределе введём классический импульс $p_c$ и сделаем замену $\hbar k_n = p_c$, где $k_n = \sqrt{2E_n m}/\hbar \sim n$; $n$ - номер собственного состояния частицы в квантовой яме. При такой замене константы Планка в функции Вигнера совместный предел $\hbar \to 0$ и $n \to \infty$ остаётся постоянным [2]. При анализе высокоэнергетического собственного состояния становится заметным образование пучностей тока Вигнера вдоль классического импульса.

В результате были исследованы токи Вигнера собственных и нестационарных состояний частицы в одномерной квантовой яме, описаны характеристики траекторий, образованными под влиянием тока, изучены особые точки на фазовом пространстве, а также исследован квантово-классический переход для тока Вигнера.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" в НИТУ МИСИС (Стратегический проект "Квантовый интернет", грант К2-2022-025).

## Литература

1. Seidov S. S., Bezymiannykh D. G. (2024). Wigner current in multidimensional quantum billiards. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 58(2), 025301.
2. Angelone G., Facchi P., Ligabò M. (2024). Classical echoes of quantum boundary conditions. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 57, 425304.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.149

# ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ: ЭКСИТОНЫ ИЛИ СВОБОДНЫЕ НОСИТЕЛИ ЗАРЯДА?

**Бутылкин В.С.[1], Крафтмахер Г.А.[2], Фишер П.С.[3]**
*ФИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, г. Фрязино, Россия*
*E-mail:* [1]vasebut@yandex.ru, [2]gaarkr139@mail.ru, [3]fisherps@mail.ru

Работа посвящена сравнительному анализу результатов экспериментальных и теоретических исследований поведения микроволновой и оптической диэлектрической проницаемости $\varepsilon$ фотооблучаемых полупроводников как функции мощности облучения и сканирующей частоты $w = 2pf$. Рассматриваются механизмы, связанные с экситонами [1] и свободными носителями заряда [2].

Опытами [3] в нижней части терагерцового диапазона обнаружено, что при увеличении мощности фотооблучения $\mathrm{Re}\,\varepsilon$ полупроводника уменьшается, как и в оптике [2]. Этот эффект находится в согласии и с теорией свободных носителей заряда, базирующейся на модели Друде (см. [2]), и с экситонным механизмом [1]. В гигагерцвых опытах [4, 5] увеличение мощности фотооблучения приводило к увеличению $\mathrm{Re}\,\varepsilon$ полупроводников CdS, CdSe, Si, GaAs, с чем расходится теория свободных носителей заряда, но согласуются выводы экситонной. В опытах [6] коэффициент поглощения $a(w)$, пропорциональный $\mathrm{Im}\,e(w)$, растет при усилении фотооблучения согласно обеим теориям. Наблюдаемый в оптике и терагерцах рост коэффициента поглощения с понижением частоты $\omega$ при неизменной мощности облучения соответствует обоим механизмам. При переходе в гигагерцы $\alpha$ достигает максимума и с дальнейшим понижением частоты убывает, что соответствует экситонной теории и не следует из модели свободных носителей заряда.

Т.о., поведение $\mathrm{Re}\,\varepsilon$ полупроводников, рассчитанное с экситонной моделью, подтверждается опытами в оптическом, тера- и гигагерцовом диапазонах, тогда как результаты модели свободных носителей заряда подтверждены только в оптике и терагерцах, где совпадают с экситонными. Объяснение в том, что вклад, связываемый со свободными носителями заряда, является высокочастотным крылом экситонного отклика. К высокочастотному крылу относятся частоты, превышающие частоту $w^{ex} = \mathrm{h}^{-1}E^{ex}$ ($E^{ex}$ – энергия связи экситона) и близкие к ней. Частоты низкочастотного крыла заметно ниже $w^{ex}$. На промежуточных частотах усиление фотооблучения практически не должно влиять на $\mathrm{Re}\,e(w)$, хотя $\mathrm{Im}\,e(w)$ растет.

## Литература

1. Бутылкин В.С., Фишер П.С., Крафтмахер Г.А., Казанцев Ю.Н., Каленов Д.С., Мальцев В.П., Пархоменко М.П. // Радиотехника и электроника. – 2022. – Т. 67. – № 12. – С. 1185.
2. Кашкаров П.К., Тимошенко В.Ю. // Оптика твердого тела и систем пониженной размерности, Физический факультет МГУ, М. – 2009.
3. Padilla W.J., Taylor A.J., Highstrete C., Lee M., and Averitt R.D. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 96. – P. 107401.
4. Крафтмахер Г.А., Бутылкин В.С., Казанцев Ю.Н., Мальцев В.П., Фишер П.С. // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т. 114. – № 9. – С. 586.
5. Бутылкин В.С., Крафтмахер Г.А., Фишер П.С.// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2024. – №1. – С. 41.
6. Busch S., Scherger B., Scheller M., Koch M. // Optics letters. – 2012. –V. 37. –No 8. –P. 1391.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.150

# Ab initio моделирование взаимодействия водорода с межфазными границамиα-Fe/Fe$_3$C

**ВерховыхА. В.[1], Мирзоев А.А.[1], ОкишевК.Ю.[2]**

[1]*ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Челябинск, Россия,*avverkhovykh@susu.ru

[2]*ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия*

Перлит, эвтектоидная структура углеродистых сталей, формируется в результате распада аустенита (ГЦКγ-Fe) на феррит (ОЦК α-Fe) и цементит (орторомбический Fe$_3$C). Микроструктура перлита, в частности, ориентация кристаллических решеток феррита и цементита друг относительно друга, существенно влияет на механические свойства стали. Известно, что в перлите могут реализовываться несколько типов ориентационных соотношений (ОС) между ферритом и цементитом: Багаряцкого (ОС$_Б$), Исайчева (ОС$_И$) и Петча–Питча (ОС$_П$). Влияние типа ориентационного соотношения на свойства межфазных границ в перлите, а также взаимодействие этих границ с водородом, представляют значительный интерес, поскольку водород может оказывать негативное влияние на механическую прочность стали, вызывая водородное охрупчивание.

В рамках данного исследования, используя методы моделирования «из первых принципов», была изучена структура и энергия когерентных межфазных границ α-Fe/Fe$_3$C, соответствующих ОС$_Б$, ОС$_И$ и ОС$_П$. Кроме того, было исследовано взаимодействие водорода с этими границами на атомном уровне. Все расчеты проводились в программном пакете WIEN2k, основанном на теории функционала плотности (DFT) в рамках обобщённого градиентного приближения (GGA'96). Данный подход позволяет получить точные результаты, опираясь только на фундаментальные физические законы, без использования эмпирических параметров.

Все системы подвергались полной оптимизации геометрии, включающей параметры решетки и положения атомов, до достижения минимальной энергии. После оптимизации в структуры помещался атом водорода в трех неэквивалентных позициях, что позволяло оценить предпочтительные места локализации водорода на межфазных границах.

Расчет поверхностной энергии межфазных границ дал следующие результаты: 0,383 Дж/м$^2$ для ОС$_Б$, 0,594 Дж/м$^2$ для ОС$_И$ и 0,978 Дж/м$^2$ для ОС$_П$. Полученные значения хорошо согласуются с доступными экспериментальными данными [1–2], и результатами других теоретических исследований [3–5]. Анализ взаимодействия атомов водорода с межфазными границами показал, что предпочтительными для них являются позиции либо непосредственно на границе, либо в цементитной фазе, что может влиять на стабильность и механические свойства перлита.

## Литература

1. KramerJ.J., PoundG.M., MehlR.F. // ActaMetallurgica. – 1958. – V. 6 - № 12. – P. 763–771.
2. Li C.-Y., Blakely J.M., Feingold A.H. // Acta Metallurgica. – 1966. – V. 14 -№ 11. – P. 1397–1402.
3. Zhang X., Hickel T., Rogal J. et al. // Acta Materialia. – 2015. – V. 99. – P. 281–289.
4. Ruda M., Farkas D., Garcia G. // Computational Materials Science. – 2009. – V. 45. - № 2. – P. 550–560.
5. Chen F. et al.//Journal of Materials Research and Technology. – 2023. – V. 26. – P. 6782-6793.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.151

# О спектре корреляционной функции шероховатостей фосфолипидных мультислоёв

**Волков Ю. О.[1,2], Тихонов А. М.[3], Рощин Б. С.[1], Асадчиков В. Е.[1]**
[1]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
[2]*Институт физики твёрдого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, Москва, Россия*
[3]*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва, Россия*

Монослойные и бислойные системы, состоящие из различных типов липидов, представляют интерес для биомедицинских исследований, поскольку имитируют поверхность естественных органических мембран [1]. Ранее в [2] была предложена методика приготовления ламеллярных фосфолипидных мультислоёв на поверхности раствора коллоидного кремнезёма.

В докладе мы представляем систематическое исследование строения и спектров корреляционных функций шероховатости межслойных границ раздела в ламеллярных многослойных структурах, сформированных из фосфолипидов дипальмитойл-фосфатидилхолина (DPPC) и дистеароил-фосфатидилхолина (DSPC) на подложках кремнезоля 22 нм наночастиц кремния (массовая доля $SiO_2 \approx 20\%$), по данным рентгеновской рефлектометрии и скользящего диффузного рассеяния с использованием синхротронного излучения (энергия фотонов 71 кэВ).

Расчёт распределений электронной плотности в структурах и статистики шероховатостей на границах раздела проводился согласно непараметрическому итерационному подходу [3], сочетающему анализ данных зеркального отражения и незеркального рассеяния в рамках единой процедуры.

Обнаружено, что статистические свойства шероховатостей липидных слоёв фундаментально отличаются от принятого в литературе формализма капиллярных волн [4]; это потребовало интерпретации спектров высот шероховатостей в виде суммы K-корреляционных моделей [5]. Показано, что для мультислоя DSPC в наблюдаемом интервале пространственных частот шероховатость является однородной и стохастической, однако для мультислоя DPPC спектр пространственных корреляций в плоскости близок к спектру шероховатости поверхности чистого кремнезоля. Предположительно, это обусловлено захватом и накоплением в плёнке DPPC наночастиц $SiO_2$ из приповерхностного слоя. В то же время критическая корреляционная длина и фрактальная экспонента для слоя DPPC существенно изменяются, что свидетельствует о значимой зависимости мехвнических свойств липидной плёнки от концентрации наночастиц в ней.

Методическая часть работы выполнена в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». Расчётная часть работы выполнена в рамках Государственного задания ИФП РАН. Теоретическая часть работы выполнена за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00200).

## Литература

1. Stefaniu C., Brezesinski G., and Möhwald H. // Adv. Colloid Interface Sci. – 2014. – V. 208. – P. 197.
2. Тихонов А.М. // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – № 92. – С. 394.
3. Kozhevnikov I.V., Peverini L., and Ziegler E. // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 85. – P. 125439.
4. Buff F.P., Lovett R.A., and Stillinger F.H. // Phys. Rev. Letters. – 1965. – V. 15. – P. 621.
5. Palasantzas G. // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48. – P. 14472.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.152

# ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕТАЛЛОВ НА ПРОВОДИМОСТЬ И ПАРАМЕТРЫ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК (CoFeB/CoTaNb+$SiO_2$/MgO)

**Гаврилюк С.И.[1], Котов Л.Н.[1], Заварин Д.В.[1], Калинин Ю.Е.[2], Ситников А.В.[2]**

*[1]Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия,*
*[2] Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

E-mail: Gavrilyuk-SI@yandex.ru

Интерес к изучению металл-диэлектрических композитных плёнок постоянно растёт из-за их необычных свойств, таких как гигантское магнитосопротивление и аномальный эффект Холла [1]. Исследование влияния концентрации металлического сплава *x* на проводимость и параметры ферромагнитного резонанса (ФМР) металл-диэлектрических композитных плёнок является актуальной задачей в области материаловедения и физики конденсированного состояния [2,3]. Ферромагнитный резонанс представляет собой эффективный метод для изучения микро - и наноструктуры и магнитных свойств пленок [2,3]. В данной работе исследованы концентрационные зависимости удельного электрического сопротивления и параметров (ширины и положения линии) ФМР композитных плёнок с разными металлическими сплавами и диэлектриками (CoFeB/CoTaNb+$SiO_2$/MgO) и найдена взаимосвязь этих параметров и характеристик. Измерения электрического сопротивления плёнок проводились четырехзондовым методом при помощи универсального вольтметра Е6-24. Результаты проведённых экспериментов показали, что рост концентрации металлического сплава *x* в плёнках приводит к уменьшению удельного сопротивления, резонансного поля и ширины линии ФМР. Ширина линии ФМР и удельное сопротивление в зависимости от концентрации *x* имеет осцилляционный характер, который, скорее всего, связан со структурными изменениями в плёнках при их напылении.

**Исследование выполнено за счёт гранта РНФ, проект № 25-72-20063**

## Список литературы

1. *Котов Л.Н., Уткин А.А., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.* Магнитные, проводящие и магнитопроводящие свойства композитных плёнок (CoFeB+SiO2+N2) в интервале температур 2-400 К и магнитных полей 0, 1 и 5 Тл // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2023. – Т. 15, № 4. – С. 85-92.
2.*Устюгов В.А., Котов Л.Н., Ковалёв П.Д., Калинин Ю.Е., Ситников А.В*. Концентрационные зависимости параметров ФМР и структура композитных плёнок (CoFeB+SiO2+N2), полученных в атмосфере азота // Физика твердого тела, 2024, том 66, вып. 12. С. 2148-2151. DOI: 10.61011/FTT.2024.12.59582.6516PA
3. 3. *L.N. Kotov, Z. N. Blinov, P. D. Kovalev, D. V. Zavarin, Yu. E. Kalinin and A. V. Sitnikov,* Concentration and angular dependences of ferromagnetic resonance parameters and magnetic structure of CoTaNb/MgO composite films, Bull. Russ. Acad. Sci. Phys., 2024, 88 (Suppl 1), p80–p84.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.153

# ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЕ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК MN НА ПОВЕРХНОСТИ PT(332) СО СПИРАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРОЙ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ДЗЯЛОШИНСКОГО-МОРИЯ

**Глазова Е.С.[1], Колесников С.В.[2], Салецкий А.М.[3]**

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*
*Физический факультет, Москва, Россия*
*E–mail: [1]sapronova.es18@physics.msu.ru, [2]kolesnikov@physics.msu.ru*

На сегодняшний день изучение одноатомных ферромагнитных цепочек является интересной и актуальной задачей ввиду активно развивающихся технологий, позволяющих работать со структурами наномасштабов [1]. В последние годы проводятся активные исследования по созданию и изучению атомных цепочек с использованием методов сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии. В данной работе объектом исследования является уникальная система Mn на поверхности Pt(332), обладающая спиральной магнитной структурой. Подобные атомные цепочки представляют особый интерес в области магнитных материалов и нанотехнологий. Магнитные моменты поворачиваются от атома к атому, образуя спираль, что является проявлением значительного взаимодействия Дзялошинского-Мория [2].

Атомные цепочки Mn на поверхности Pt(332) описываются в рамках классической модели с входящими в неё энергией магнитной анизотропии, обменным взаимодействием, взаимодействием Дзялошинского-Мория и диполь-дипольным взаимодействием. Параметры гамильтониана были взяты из литературы, где рассчитывались в рамках теории функционала плотности. Для цепочек длиной от 5 до 200 атомов были найдены основные и метастабильные состояния с различным количеством полупериодов спирали. С помощью геодезического метода упругой ленты [3] рассчитаны энергетические барьеры переходов системы между различными состояниями. В рамках гармонического приближения теории переходного состояния [4,5] вычислены частотные префакторы и оценены значения времени жизни найденных метастабильных и основных состояний цепочки.

Данная работа поддержана стипендией Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» для аспирантов Физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова.

## Литература

**1.** Сыромятников А.Г., Колесников С.В., Салецкий А.М., Клавсюк А.Л. Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов, *Успехи физических наук*, том **191**, № 7, с. 705-737 (2021).

**2.** B. Schweflinghaus, B. Zimmermann, M. Heide, G. Bihlmayer, S. Bl¨ugel, Role of Dzyaloshinskii-Moriya interaction for magnetism in transition-metal chains at Pt step edges, Phys. Rev. B. **94**, 024403 (2016).

**3.** P.F. Bessarab, V.M.Uzdin, H.Jónssond, “Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation,” Comput. Phys. Commun., vol. **196**, pp. 335–347 (2015).

**4.** И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М. Уздин, Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (миниобзор), Письма в ЖЭТФ, Т. **113**, 833 (2021).

**5.** P. Hanggi, P. Talkner, M. Borkovec, Reaction-rate theory: fifty years after Kramers, Rev. Mod. Phys. V. **62**, 251. (1990).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.154

# Особенности фазовых переходов в сегнетоэлектриках

**Гордей М.М., Метлов Л.С.**
*ФГБНУ «ДонФТИ им. А. А. Галкина», Донецк, Россия, gordei-maksim@mail.ru*

В классическом случае, фазовые переходы в сегнетоэлектриках, согласно теории фазовых переходов Ландау, описываются с помощью только сегнетоэлектрических параметров порядка [1,2]. Однако, как показал ещё Индебом, при сегнетоэлектрическом переходе практически всегда происходит искажение кристаллической решётки [3]. Поэтому, для полного описания таких переходов необходимо учитывать параметры порядка, описывающие структурные искажения.

Свободную энергию для сегнетоэлектрического фазового перехода для соединений, испытывающих при таком переходе тетрагональные искажения, можно записать в виде [4]:

$$F = F_0 + \frac{1}{2}a\left(e_2^2 + e_3^2\right) + \frac{1}{3}be_3\left(e_3^2 - 3e_2^2\right) + \frac{1}{4}c\left(e_2^2 + e_3^2\right)^2 + \frac{1}{2}\alpha P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4 + \\ + D_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}e_2\left(P_1^2 - P_2^2\right) + \frac{1}{\sqrt{6}}e_3\left(3P_3^2 - P^2\right)\right) \quad (1)$$

где $e_2$ и $e_3$ – линейные комбинации диагональных компонентов тензора деформации, отвечающие тетрагональным искажениям; $P = P(P_1,P_2,P_3)$ – вектор электрической поляризации; a,b,c – линейные комбинации упругих постоянных второго, третьего и четвертого порядков.

Легко заметить, что при минимизации свободной энергии подобного вида в высокосимметричном состоянии, ниже температуры сегнетоэлектрического фазового перехода, равновесные значения структурных параметров порядка будут немного отличны от нуля (слабая тетрагональность). Таким образом, сегнетоэлектрический фазовый переход при понижении температуры провоцирует структурные искажения задолго до начала структурного фазового перехода.

Данную слабую тетрагональность можно использовать, как малый параметр. В этом случае, нам будет необходимо приравнять к нулю производные свободной энергии по структурным параметрам порядка и, оставив самую низшую степень структурного параметра порядка выразить $e_2$ и $e_3$ через поляризационные параметры порядка.

$$e_2 = -\frac{D_2}{a\sqrt{2}}\left(P_1^2 - P_2^2\right); \quad e_3 = -\frac{D_2}{a\sqrt{6}}\left(2P_3^2 - P_1^2 - P_2^2\right) \quad (2)$$

Это говорит нам, о том, что незадолго до структурного перехода система уже находится в локальном минимуме, отвечающему одному из трёх структурных минимумов, представляющих искажения стороны куба по одной из координатных осей.

Также можно отметить, что в случае подстановки выражений (2) в формулу (1), она переходит к классическому виду, записанному в работе Девоншира [2,4].

## Литература

1. Гинзбург В.Д. // ЖЭТФ. – 1945. – № 15. – С. 739.
2. Devonshire A.F. // Phil. Mag. – 1949. – № 40 – P. 1040.
3. Инденбом В.Л. // Изв. АН СССР сер. Физическая – 1960. – № 24. – С. 1180.
4. Метлов Л.С., Гордей М.М., Заворотнев Ю.Д., Варюхин В.Н. // ФТТ. – 2025. – Т. 67 – № 2. – С. 332-339.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.155

# Расчет и сравнительный анализ дифракционных фазового и бормановского контраста дефекта кулоновского типа в тонком непоглощающем Si(111) и сильно поглощающем SiC-6H монокристаллах

**Чуховский Ф. Н., Григорьев В. А., Волков В. В., Конарев П. В.**
*Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", 119333 Москва, Россия*
E-mail: f_chukhov@yahoo.ca, vasiliy.grigorev.1996@mail.ru

В настоящее время техника компьютерной рентгеновской дифракционной микротомографии как инновационный метод исследования развивается и имеет хорошую перспективу ее применения для изучения контраста точечных и линейных микродефектов в полупроводниковых кристаллах и более того, их 3D декодирования с цифровой точностью (см. [1-3]). Важно, что в этой технике определяющее значение имеют такие факторы как развитие и применение методов “по возможности” точного расчета контраста проекционных 2D изображений.

В представленном докладе, на основе новой численно-разностной схемы решения уравнений Такаги–Топена [4], рассмотрены результаты компьютерного моделирования и дан анализ расчетных 2D дифракционных изображений дефекта кулоновского типа в слабо Si(111) и сильно поглощающем SiC-6H монокристаллах Приводится и используется критерий точности численного решения уравнений Такаги-Топена в поглощающих кристаллах. Из анализа расчетного контраста точечного дефекта показано, что новая схема численного решения уравнений Такаги-Топена является приемлемым с точки зрения необходимой точности и времени проведенных расчетов фазового и бормановского контраста дефекта кулоновского типа в слабо Si(111) и сильно поглощающем SiC-6H монокристаллах.

Фактор поглощения $\mu T$ составил 0.05 для Si(111) и 5.25 для SiC-6H. Дефект в Si(111) радиусом $R$ = 0.4 мкм и $\varepsilon = 10^{-3}$ ($\varepsilon$ - величина, характеризующая упругость континуума) располагался в центре кристалла, дефект в SiC-6H с $R$ = 10 мкм и $\varepsilon = 10^{-4}$ был расположен на расстоянии $0.5R$ от выходной поверхности кристалла. Значения критерия точности решения [4] составили $10^{-4}$ для Si(111) и $10^{-2}$ для SiC-6H, что свидетельствует о достоверности проведенных расчетов. Бормановский контраст для SiC-6H, полученный численным решением уравнений Такаги-Топена, качественно совпадает с расчетом в приближении Инденбома-Чамрова, но в то же время позволяет увидеть более тонкие детали дифракционного изображения.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатовский институт”.

## Литература

1. Asadchikov V., Buzmakov A., Chukhovskii F., Dyachkova I., Zolotov D., Danilewsky A., Baumbach T., Bode S., Haaga S., Hänschke D., Kabukcuoglu M., Balzer M., Caselle M., Suvorov E. // J. Appl. Cryst. – 2018. – Т. 51. – С. 1616-1622.
2. Шульпина И.Л., Суворов Э.В., Смирнова И.А., Аргунова Т.С. // Журнал технической физики. – 2022. – Т. 92. – № 10. – С. 1475-1496.
3. Золотов Д.А., Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Волков В.В., Дьячкова И.Г., Конарев П.В., Григорьев В.А., Суворов Э.В. // УФН. – 2023. – Т. 193. – № 9. – С. 1001-1009.
4. Григорьев В.А., Конарев П.В., Чуховский Ф.Н., Волков В.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2024. – № 2. – С. 68-73.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.156

# Ян-теллеровская структурная неустойчивость и динамические зарядовые страйпы в гексаборидах $PrB_6$ и $NdB_6$.

**Гридчина В. М.[1], Хрыкина О. Н.[1], Болотина Н. Б. [1], Случанко Н. Е. [2]**
[1]*Отделение «Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, vasilisa.gridchina@gmail.com*
[2]*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия, nes@lt.gpi.ru*

Недавно прецизионные структурные исследования гексаборида $CeB_6$ позволили обнаружить статические ян-теллеровские (ЯТ) искажения ковалентного борного каркаса, формирование кластеров ионов Ce (режим фазы Гриффитса) и динамические зарядовые страйпы в этом классическом соединении с тяжелыми фермионами [1]. Объектами настоящего исследования являются гексабориды $NdB_6$ и $PrB_6$, также обладающие кубической структурой типа $CaB_6$ (*Pm*–3*m*, Z=4).

Информация об атомном строении $NdB_6$ и $PrB_6$ была получена по данным прецизионных рентгеноструктурных экспериментов с использованием монокристального дифрактометра Synergy DW HyPix-Arc 150° в диапазоне 30–293 К. Обнаружено немонотонное поведение параметров элементарной ячейки, найдены связанные со ЯТ-эффектом малые статические искажения кубической структуры. Выявленные тенденции температурного изменения соответствуют отклонениям зависимости ширины квазиупругого рассеяния нейтронов от линейного закона Корринги ниже 80 К [2] в $PrB_6$ и аномалии типа Шоттки на зависимости теплоемкости в области 50 К [3] в $NdB_6$.

Анализ атомной динамики выполнен при описании поведения параметров атомных смещений в моделях Дебая (для атомов бора) и Эйнштейна (для катионов), получены значения температур Эйнштейна ($\Theta_E \approx 135$ К для $PrB_6$ и $\Theta_E \approx 120$ К для $NdB_6$), обнаружено отклонение экспериментальных кривых от модельных вблизи $\Theta_E$.

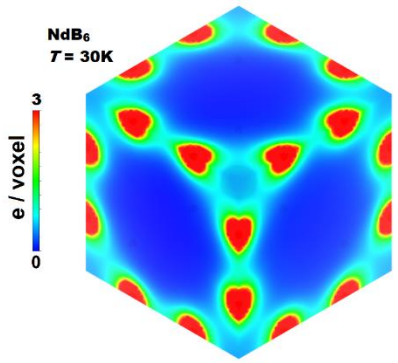



Рис. 1. Распределение электронной плотности в основных гранях элементарной ячейки $NdB_6$, полученное ММЭ.

Поскольку кооперативная динамическая ЯТ-структурная неустойчивость борного каркаса в $CeB_6$ и $LaB_6$ приводит к возникновению зарядовых страйпов [1,4], представляло интерес из анализа структурных данных выяснить также характер распределения электронной плотности (ЭП) в $NdB_6$ и $PrB_6$ с помощью метода максимальной энтропии (ММЭ). В результате в исследованных гексаборидах РЗЭ нами также обнаружено формирование динамических зарядовых страйпов в направлениях <001> (см., например, рис.1) и выполнено сопоставление конфигураций ЭП в различных редкоземельных гексаборидах.

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

**Литература**

1. *Khrykina O.N., et. al.*// J. Alloys Compd. – 2024. – V. 970. – P. 172527.
2. *Alekseev P.A., et. al.* // Physics of the Solid State. – 2010. V. – 52. – № 5. – P. 914–916.
3. *Reiffers M., et. al.* // J. Magn. Magn. Mater. – 2007. – V. 310. – P. e595–e597.
4. *Азаревич А.Н., и др.* // Письма в ЖЭТФ. – 2024. – Т. 119. – № 12. – С. 909–916.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.157

# Особенности работы многокубитного квантового компьютера при отличной от нуля температуре (на основе сверхпроводящей платформы)

**Гуртовой В.Л.**
*ИПТМ РАН, Черноголовка, Россия,* gurtovoi@iptm.ru

Из-за экспоненциально большого количества запутанных квантовых состояний и параллелизма работы, квантовые компьютеры (КК) на различных платформах (ионы, нейтральные атомы, спины, сверхпроводники, квантовые точки и др.) становятся реально функционирующими устройствами с демонстрацией превосходства над классическими суперкомпьютерами в некоторых задачах. На разработку различных платформ КК страны и компании выделяют значительные финансовые средства для достижения лидирующих позиций в данной области. Тем не менее, до настоящего времени не сформулирован общий подход, определяющий преимущества определенной платформы КК над другими.

В докладе на основе простой модели многокубитного сверхпроводящего квантового процессора, состоящего из связанных двухуровневых состояний, соответствующих отдельным кубитам, анализируется работа КК в зависимости от температуры. Формулируется оценочный критерий, связывающий количество кубитов и температуру в режиме работы КК без ошибок. Рассматривается также влияние выполнения гейтов и процесса считывания на работу КК без ошибок.

Анализ работы КК на основе сверхпроводящей платформы является довольно общим и может без ограничений быть применен для анализа других платформ.

Работа выполнена в рамках госзадания 075-00295-25-00.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.158

# Исследование кинетики рекристаллизации сплавов Al-Ni методом механической спектроскопии

**Дерябина А. И., Палачева В. В., Мочуговский А.Г., Михайловская А.В., Головин И.С.**
*НИТУ МИСИС, г. Москва, Россия,*
*m2104814@edu.misis.ru*

Частицы вторых фаз имеют важное значение для процесса рекристаллизации сплавов на основе Al. Дисперсные частицы (<300 нм) могут повышать температуру рекристаллизации и измельчать зеренную структуру в соответствии с механизмом Зинера. Частицы микронного размера стимулируют зарождение новых зерен из-за искажений решетки, накопленных вблизи этих частиц в процессе деформации [1].

Эффективным «in situ» методом изучения эволюции структуры в материалах является механическая спектроскопия (МС), которая позволяет исследовать упругие и неупругие свойства материалов [1]. Спектры внутреннего трения (ВТ) чувствительны к эволюции микроструктуры. Фазовые и структурные превращения сопровождаются так называемыми переходными неупругими эффектами. Эти эффекты приводят к образованию «псевдо» пиков ВТ [3]. При комнатной температуре фон ФТ имеет дислокационную природу. Уменьшение плотности дислокаций во время рекристаллизации приводит к резкому уменьшению фона ВТ, который выглядит как пик. Температура данного пика соответствует температуре начала рекристаллизации. Анализ температуры рекристаллизации с использованием методов in-situ МС выявил высокую степень сходимости результатов по сравнению с методами ex-situ.

В рамках текущего исследования в сплавах Al-Ni с 0,04-6%Ni были получены параметры рекристаллизации с использованием параметров внутреннего трения и связанного с ними микроструктурного анализа. Из-за эффекта стимулируемого зарождения новых зерен на частицах $Al_3Ni$ размером ~1 мкм наблюдалось снижение температуры рекристаллизации и измельчение зерна с увеличением содержания Ni. Температура «псевдо» пика рекристаллизации $P_R$ снижается с 297 до 208°C, а размер зерна (субзерна) уменьшается с 68±22 (12±2) мкм до 5,6±0,2 (4,5±0,1) мкм с увеличением объемной доли фазы $Al_3Ni$ с 0,1 до 10%.

Значение кинетического n-коэффициента Аврами при отжиге зависит от параметров микроструктуры, уменьшаясь от ~0,29 для восстановленной структуры до ~0,45 для частично рекристаллизованной структуры и до ~0,73-0,87 для рекристаллизованных структур, образующихся при более высоких температурах.

*Исследование проведено при поддержке РНФ, грант № 24-79-00118.*

**Литература**

1. W.Xu,M.Ferry,J.Cairney,F.Humphreys,Three-dimensional investigation of particle-stimulated nucleation in a nickel alloy,ActaMater.55(2007)5157–5167
2. M.S.Blanter, I.S.Golovin, H.Neuhäuser, H.-R.Sinning, Internal Friction in Metallic Materials, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007.
3. I.S.Golovin, A.V.Mikhaylovskaya,H.-R.Sinning,Role of theβ-phase in grain boundary and dislocation anelasticity in binaryAl–Mg alloys, J.Alloys Compd. 577(2013)622–632

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.159

# Электрон-ядерное взаимодействие ядер бора $^{11}$B и спинового дефекта в гексагональном нитриде бора

**Дмитриева Е.В.[1], Мамин Г.В[1], Мурзаханов Ф.Ф[1], И.Н. Грачева[1], М.Р. Гафуров[1], В.А. Солтамов[2]**

[1]*КФУ, Казань, Россия,* dev600@mail.ru

[2] *ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*

Вакансия бора в кристалле гексагонального нитрида бора (hBN) представляет собой значительный интерес в области квантовых технологий благодаря сочетанию уникальных спиновых, оптических и когерентных свойств. Экспериментально установлено, что исследуемые спиновые дефекты в hBN проявляют чувствительность к незначительным магнитным воздействиям и температурным изменениям, позволяя рассматривать данную систему в качестве платформы для квантового зондирования[1]. Возможность оптической инициализации электронного спина и считывания состояний при комнатной температуре центра окраски (S = 1) в hBN определяет его потенциальную применимость в квантовых приложениях[2]. Отличительной особенностью исследуемой системы по сравнению с алмазом является наличие естественных изотопов с ненулевыми ядерными спинами. Установленные сверхтонкие и квадрупольные взаимодействия между электронным спином вакансии и окружающими ядрами открывают возможности для реализации электрон-ядерных квантовых регистров и использования ядерных спинов в качестве материальной базы для квантовой памяти[3].

Для образования стабильных вакансий бора образец hBN подвергался электронному облучению с энергией частиц 2 МэВ. Эксперименты методом электронного парамагнитного резонанса проводились на спектрометре Bruker Elexsys E680 в W - диапазоне (94 ГГц) при оптическом возбуждении с использованием диодного лазера ($\lambda$ = 532 нм, $P$ = 100 мВт). Сверхтонкие и квадрупольные взаимодействия изучались при температуре 25 K с применением импульсной методики двойного электрон-ядерного резонанса (ДЭЯР).

В данной работе было получено, что спиновый дефект обладает расщеплением в нулевом магнитном поле $D$ = 3550 МГц (126.8 мТл) и $g$-фактором = 2.004. Для ядер бора $^{11}$B (I=3/2, 80.1%), находящихся во второй координационной сфере, установлены следующие величины: компонента тензора сверхтонкого взаимодействия $A_{xx}$ = − 3,80 МГц, константа квадрупольной связи $C_q$ = 2,7 МГц.

Проведенный анализ квадрупольных и сверхтонких взаимодействий демонстрирует пригодность ядерной подсистемы в качестве элемента памяти. Полученные результаты открывают перспективы для создания масштабируемых квантовых систем с длительным временем хранения информации.

Работа поддержана грантом РНФ № 24 - 12 - 00151.

## Литература

1. Vaidya S. et al. Quantum sensing and imaging with spin defects in hexagonal boron nitride //Advances in Physics: X. – 2023. – Т. 8. – №. 1. – С. 2206049.
2. Gottscholl A. et al. Initialization and read-out of intrinsic spin defects in a van der Waals crystal at room temperature //Nature materials. – 2020. – Т. 19. – №. 5. – С. 540-545.
3. Wolfowicz G. et al. Quantum guidelines for solid-state spin defects //Nature Reviews Materials. – 2021. – Т. 6. – №. 10. – С. 906-925.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.160

# Развитие функциональных свойств в монокристаллах сплава $Ni_{50}Mn_{25}Ga_{19}Fe_6$

**Дмитриенко М.С., Тимофеева Е.Е., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.**
*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, e-mail: max06.2002@mail.ru*

Данная работа посвящена исследованию закономерностей развития мартенситных превращений (МП), эффекта памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичности (СЭ) в монокристаллах $Ni_{50}Mn_{25}Ga_{19}Fe_6$ при деформации сжатием. Монокристаллы выращены методом Бриджмена и имели форму параллелепипедов с размерами (3 × 3 × 6) мм$^3$. Исследовались монокристаллы в двух состояниях после роста и высокотемпературного отжига при 1273 К – 4 ч с закалкой в воду (закаленное). Сжимающую нагрузку прикладывали вдоль [001]-направления.

Проведены калориметрические исследования МП при охлаждении/нагреве. Температуры МП после роста составляют: $M_s$ = 380 К, $M_f$ = 340 К, $A_s$ = 350 К, $A_f$ = 391 К. Закалка приводит к небольшому понижению температур МП на 10-15 К. Также на калориметрических кривых обнаружен дополнительный пик выделения тепла при 300 К, который может быть связан с развитием межмартенситного перехода 14M-$L1_0$.

В монокристаллах после роста и после закалки наблюдается высокотемпературный ЭПФ в термоциклах под сжимающей нагрузкой, с температурой начала МП от 372 К до 462 К. На кривых ЭПФ в интервале напряжений 10-50 МПа наблюдаются две стадии, которые могут быть связаны с межмартенситными превращениями, характерными для сплавов NiMnGa [1, 2]. Максимальная деформация при ЭПФ составляет 5,0-5,5 %, что меньше теоретически рассчитанной (6,2 %) деформации при B2-$L1_0$ МП и может быть связана с наличием непревращенных областей [3]. Для первой стадии величина $\Delta_{\sigma 1}$ монотонно растет (увеличение упругой энергии при МП) с ростом напряжений, тогда как величина $\Delta_{\sigma 2}$, напротив, сокращается. Уменьшение интервала $\Delta_{\sigma 2}$ коррелирует с сокращением деформации второй стадии и связано с изменением последовательности МП с ростом напряжений. МП под нагрузкой протекает с узким термическим гистерезисом 20-30 МПа, который слабо зависит от температуры испытания, что характерно для B2-сплавов Гейслера, ориентированных вдоль [001]-направления при сжимающей деформации [4].

В циклах нагрузка/разгрузка в состояниях после роста и после закалки наблюдается МП под нагрузкой вплоть до температуры ($M_d$) 548 К, когда достигается предел текучести аустенита ~ 690 МПа. Закалка способствует небольшому расширению температурного интервала развития СЭ с $\Delta T_{СЭ}$ = 100 К до $\Delta T_{СЭ}$ = 125 К за счет увеличения температуры $T_{СЭ2}$ на 25 К. Это связано с повышением прочностных свойств мартенсита с 780 МПа в монокристаллах после роста до 1300 МПа в закаленных.

Таким образом, за счет выбора химического состава и термической обработки на основе сплавов NiMnGaFe созданы условия для наблюдения высокотемпературного ЭПФ и высокотемпературной СЭ в широком интервале температур.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 24-19-00242).

**Литература**

1. Ge Y., [et al] // Mater. Charact. 2022. V. 190. Art. 112007.
2. Vronka M., [et al] // Appl. Phys. Lett. 2021. V. 119. Art. 212901.
3. Pons J., [et al] // Acta mater. 2000. V. 48, № 12. P. 3027–3038.
4. Chumlyakov Y.I., [et al] // Shape Memory Alloys: Properties, Technologies, Opportunities, Trans Tech Publications Ltd, Switzerland. 2015. V. 81–82. P. 107–173.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.161

# Упругость голубых фаз жидких кристаллов: теоретические подходы

**Дмитриенко В. Е.*[1,2], Мамонова А. В.[1,2], Чижиков В. А.[2,3]**
[1]*Институт физики твёрдого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия*
[2]*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова*
*Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники*
*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
[3]*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*
*e-mail: dmitrien@crys.ras.ru

Мы предлагаем ряд теоретических подходов к описанию физики упругих взаимодействий в голубых фазах – самоорганизующихся трёхмерных кристаллических структурах в хиральных жидких кристаллах, как правило обладающих кубической симметрией и возникающих в серии фазовых переходов между изотропной жидкостью и холестерической фазой. Предлагаемые подходы базируются на функционале свободной энергии Ландау – де Жена [1,2], параметрами которого являются жидкокристаллические модули Франка. Так как типичные периоды этих кристаллов порядка нескольких тысяч ангстрем, их предполагается использовать в качестве фотонных кристаллов, электрооптических элементов, дисплеев и т.п. [3,4]. Несмотря на то, что оптические свойства голубых фаз изучены весьма основательно, остаётся ещё много нерешённых фундаментальных проблем в понимании их упругих, электроупругих, вязкоупругих, оптоупругих свойств. Проблема упругости структур с макроскопическими периодами выходит далеко за рамки физики голубых фаз. Похожие проблемы возникают для трёхмерных, двумерных и одномерных структур, образующихся в жидких кристаллах по весьма разным физическим причинам [5,6].

Было проведено детальное рассмотрение кристаллических упругих свойств простейшей кубической голубой фазы $O^5$ в различных моделях, позволившие получить подробную картину изменения всех трёх упругих констант при произвольной температуре и силе хиральности [7]. Выявлены интересные частные случаи: например, в случае равенства упругих констант в микроскопической свободной энергии Ландау – де Жена ($\eta = 1$) голубая фаза в приближении жёстких тензоров оказывается упруго изотропной, а в приближении свободных геликоидов для сдвиговых компонент тензора упругости выполняются условия Коши $\lambda_{xxyy} = \lambda_{xyxy}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 23-12-00200

## Литература

1. Беляков В.А., Дмитриенко В.Е. // УФН. – 1985. – Т. 146. – № 3. – С. 369-415.
2. Wright D.C., Mermin N.D. // Rev. Mod. Phys. – 1989. – V. 61. – № 2. – P. 385-433.
3. Guo D.Y. *et al.* // Nature Materials. – 2020. – V. 19. – P. 94–101.
4. Hu W. *et al.* // Nature Communications. – 2021. – V. 12 – P. 1440.
5. Dolganov P.V., Baklanova K.D., Dolganov V.K. // Phys. Rev. E. – 2022. – V. 196. – P. 014703.
6. Бакланова К.Д., Долганов В.К., Кац Е.И., Долганов П.В. // Письма в ЖЭТФ. – 2023. – Т. 117. – С. 537-542.
7. Чижиков В. А., Мамонова А. В., Дмитриенко В.Е. // ЖЭТФ. – 2024. – Т. 166. – № 6. – С. 900-909.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.162

# Дробный квантовый эффект Холла в двухслойных электронных системах

**Дорожкин С.И., Капустин А.А.**
*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия,* dorozh@issp.ac.ru

В двухслойных электронных системах, создаваемых в одиночных квантовых ямах GaAs ширины 60 нм при температуре 45 мК выполнены исследования состояний дробного квантового Холла (ДКЭХ), возникающих в квантующем магнитном поле, отклоненном от нормали к плоскости квантовой ямы [1], и их эволюции при изменении плотности электронов в разных слоях. Основными результатами проведенных исследований является наблюдение широкого плато холловского сопротивления, соответствующего необычному квантовому числу q=4/5 с четным числителем, а также состояний дробного квантового эффекта Холла на полных дробных факторах заполнения $\nu_{fr}$=7/3, 8/3 и 4/3 с квантовыми числами $q=1/\nu_{fr}$. Последнее из перечисленных состояний на приведенном рисунке отсутствует в силу доминирования состояния с q=4/5 и появляется при других плотностях электронов. Состояние с квантовым числом q=4/5 не имеет объяснения в рамках существующих теоретических представлений. Одновременные измерения магнетотранспортных характеристик и магнетоемкостей между электронной системой и двумя затворами, расположенными по разные стороны от квантовой ямы, позволили установить, что это состояние возникает в случае, когда в слое с большей плотностью электронов реализуется несжимаемое состояние на факторе заполнения этого слоя $\nu_{FL}$ равном единице. Впервые были обнаружены состояния ДКЭХ, являющиеся комбинированными несжимаемыми состояниями, соответствующими целочисленным факторам заполнения $\nu_{FL}$=2 и 1 в слое с большей плотностью электронов и стандартным состояниям ДКЭХ в слое меньшей плотности, так что $\nu_{fr}$=7/3=2+1/3, $\nu_{fr}$=8/3=2+2/3 и $\nu_{fr}$=4/3=1+1/3. Это наблюдение указывает на двухслойный характер электронной системы в перечисленных состояниях ДКЭХ.

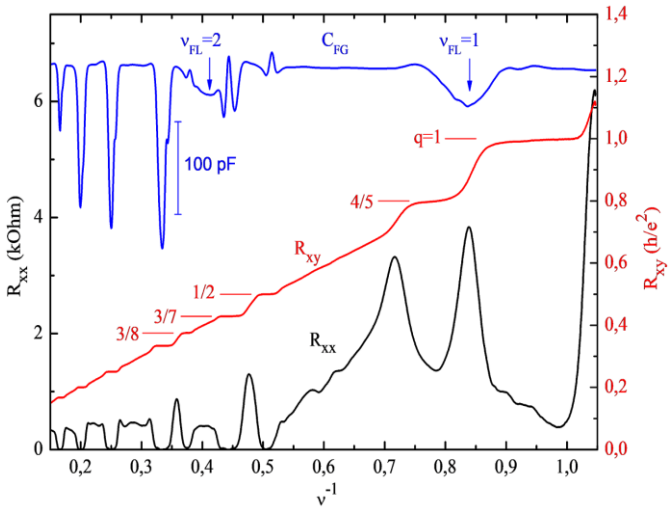



Рис. Магнетосопротивление $R_{xx}$, холловское сопротивление $R_{xy}$ и магнетоемкость $C_{FG}$, приведенные в функции обратной величины полного фактора заполнения ν, пропорционального компоненте магнитного поля перпендикулярной квантовой яме. Горизонтальными отрезками отмечены положения квантовых плато с соответствующими квантовыми числами q. Вертикальными стрелками отмечены положения факторов заполнения 2 и 1 в слое с большей плотностью электронов. Угол между магнитным полем и нормалью к квантовой яме

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-22-00312.

## Литература

1. Дорожкин С.И., Капустин А.А., Федоров И.Б., Уманский В., Смет Ю.Х. // Письма в ЖЭТФ.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.163

# Роль металлических наночастиц в этиологии образования конкрементов в организме человека

**Дьячкова И. Г.[1,2], Золотов Д. А.[1,2], Асадчиков В. Е.[1], Прусаков К. А.[2], Басманов Д. В.[2], Нагорных В. И.[3], Лабис В. В.[3]**

[1]*НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия*, sig74@mail.ru

[2]*ФГБУ ФНКЦ ФХМ им. Ю.М. Лопухина ФМБА, Москва, Россия*

[3]*ФГБОУ ВО «Российский университет медицины», Москва, Россия*

Работа посвящена изучению морфологии и состава камней, полученных в результате хирургических вмешательств по поводу сиалолитиаза и холелитиаза. Анализ структуры камней различной локализации, с точки зрения изучения основы патогенеза их возникновения, является актуальной задачей приведенного исследования и позволит определить роль металлических наночастиц в формировании комплекса антигенных структур и центров кристаллизации. Источниками наночастиц металлов, могут быть не только металлические конструкции, используемые при проведении реконструктивных операций в общей медицине [1]. Металлические наночастицы могут быть как составляющей табачной продукции, пищевых добавок так и лекарственных средств. Кроме того, условия внешней среды, вредные производства, становятся источником накопления металлических наночастиц, мигрирующих в ткани и органы человека, секреты желез, что может потенциировать образование кальцифицированных многокомпонентных антигенных структур в виде камней.

Для изучения патогенеза камнеобразования применяли рентгеновскую микротомографию, рентгенофлуоресцентный анализ и рамановскую спектроскопию. Предметом исследований являлись 2 группы конкрементов, полученные у пациентов с желчнокаменной болезнью и сиалолитиазом. По результатам проведенных исследований методом рентгенофлуоресцентного анализа можно сделать вывод о содержании наночастиц металлов, таких как титан и свинец, в структуре камней разной этиологии. При этом найденные наночастицы металлов, по данным рентгеновской микротомографии, преимущественно расположены в центральной области камней, что может указывать на их значимую роль в инициации процесса кальцификации. Обнаруженные особенности строения конкрементов позволяют сформулировать вывод о формировании комплекса антигенных структур, где наночастицы металлов могут играть роль участников центров кристаллизации в комплексе с белковыми и бактериальными компонентами, в условиях хронического тканевого воспаления. Наночастицы титана, ранее считавшиеся биоинертными, могут инициировать реакции клеток врожденного и адаптивного иммунитета, направленные на распознавание и элиминацию антигенных структур. Формирование слоистой структуры оболочек в виде гидроксиаппатита, обусловленной движением конкрементов, показанная с помощью рамановской спектроскопии, указывает на инициацию защитной реакции организма, при невозможности элиминации антигенного комплекса по типу IgG4- опосредованного воспаления.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

## Литература

1. Labis V., Gaiduk I., Bazikyan E., Khmelenin D., Zhigalina O., Dyachkova I., Zolotov D., Asadchikov V., Kravtsov I., Polyakov N., Solovyev A., Prusakov K., Basmanov D., Kozlov I. // International Journal of Molecular Sciences. – 2024. – V. 25. – № 17. – P. 9609.

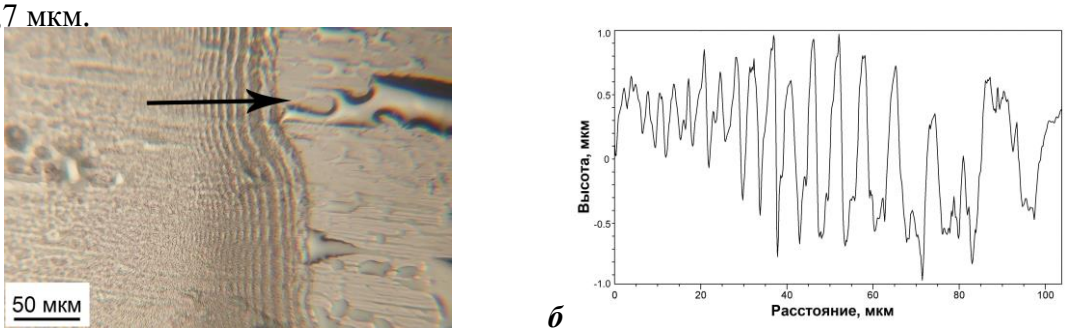
DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.164

# ВОЛНОВОЙ РЕЛЬЕФ НА ПОВЕРХНОСТИ АМОРФНОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ Co-Fe-Cr-Si-B ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ УФ ЛАЗЕРОМ

**Дюжева-Мальцева Е. В., Пермякова И. Е.**

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия,* elena.dujewa@yandex.ru

Обработка аморфных сплавов (АС) короткоимпульсным лазерным излучением является перспективной технологией современного материаловедения [1,2]. Высокие плотности потока энергии, малые времена воздействия, локальность обработки, простота реализации в технологических процессах открывают новые возможности для инженерии градиентных материалов на базе АС с измененными поверхностными свойствами, которые могут отличаться от их внутренних слоев. В работе изучены особенности волнового рельефа быстрозакаленных лент АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$, подвергнутых облучению УФ эксимерным KrF лазером с длиной волны 248 нм и длительностью 10 нс. Металлографическое изучение топологии поверхности АС показало, что под действием лазерных импульсов высокой интенсивности на краю облучаемой зоны происходит образование ряби в микромасштабе (рис. 1*а*). Видно, что генерируемая от центра рябь уплотненная, короткие расстояние между волнами $r$ составляют ≈ 2-3 мкм, высота волн небольшая ≈0,2 мкм (рис. 1*б*). При приближении к границе лазерного пятна волны становятся более разреженными, $r$ увеличивается от 4 до 7 мкм, также возрастает их амплитуда до 0,7 мкм.




***а*** ***б***

**Рис. 1** Рябь на краю зоны лазерного воздействия АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$ при 800 импульсах (*а*) и соответствующая профилограмма (*б*).

Формирование волнового рельефа связано с термокапиллярной неустойчивостью [3]. С позиций гидродинамики предложена обобщенная теоретическая модель описания видоизменения поверхности АС. Механизм лазерного «гофрирования» АС состоит в следующем: при облучении поверхностный слой АС плавится до жидкости. Так как ударное давление от лазера очень велико, колебания жидкости или капиллярная волна легко индуцируются вблизи центра расплава и распространяются наружу. Волны, прошедшие из центра, собираются на границе облучаемой зоны, а затем их форма сохраняется за счет быстрого затвердевания. Монотонное уменьшение амплитуды и длины волны ряби в основном зависят от высокой вязкости расплавленного АС (чем больше вязкость, тем меньше амплитуда и короче длина волны).

*Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00319-25-00.*

## Литература

1. Пермякова И.Е., Иванов А.А., Черногорова О.П. Модификация аморфных сплавов с применением лазерных технологий // В кн.: «Актуальные проблемы прочности» / Под ред. В.В. Рубаника – Минск: ИВЦ Минфина, 2024. – Гл. 11 – С. 124-139.
2. Shelyakov A.V., Sitnikov N.N., Sheyfer D.V. [et al.] // Smart Mater. Struct. – 2015. – V. 24. N 11. – Art. No. 115031. P. 1-7.
3. Кузнецов П.М., Федоров В.А. // Вестник ТГУ. –2015. – Т. 20. – Вып.4. – С. 872-877.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.165

# Магнитные свойства металлических композитов Ni/Cu

**Евстигнеев Р.С.[1]*, Колыванов Е.Л.[1],, Успенская Л.С.[1],**

[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*, *evstigneev@issp.ac.ru

Ламинированные металлические композиты представляют собой перспективный класс композиционных материалов, чьи макроскопические свойства определяются не только индивидуальными характеристиками исходных компонентов, но и структурой межфазных границ. Как показано в работе [1], ламинаты системы Cu-Ni, изготовленные методом горячего прессования при температуре $950\,^0$C, демонстрируют аномальное поведение модуля сдвига и наличие выраженного пика внутреннего трения в области $T_{кр} \sim 220$ К, которые отсутствует в однофазных составляющих. Эффект исчезает при отжиге. Подробный анализ показал, что выявленный процесс не описывается ни релаксационной, ни гистерезисной моделями. Также не было найдено свидетельств фазового превращения. Остался вопрос, с чем связан наблюдаемый эффект.

В данной работе была предпринята попытка выяснить природу эффекта с помощью магнитометрии и визуализации магнитной доменной структуры [2]. Никель - материал с довольно значительной магнитоупругостью, поэтому перераспределение напряжений должно проявляться в изменении локальной анизотропии и, соответственно, в изменении доменной структуры и магнитных характеристик материала. В то же время распространение звуковых волн может вызывать изменение доменной структуры, что в свою очередь может повлиять на упругие свойства материала, найденные в [1]. Различие в коэффициентах теплового расширения Cu и Ni может приводить к сложному перераспределению напряжений при вариации температуры, что также может приводить к изменению доменной структуры и кинетики перемагничивания. Известно, что магнитометрия позволяет детектировать тонкие структурные изменения магнетика, включая дефекты кристаллической решетки, фазовые превращения и особенности межфазного взаимодействия, судить о природе магнитных механизмов внутреннего трения.

Было проанализировано изменение петель гистерезиса с температурой в диапазоне 100 - 300 K, определена наведенная в процессе синтеза материала перпендикулярная слоям анизотропия и установлено, что максимум коэрцитивности достигается в именно в окрестности $T_{кр}$. С использованием закона приближения к насыщению проведена оценка остаточных напряжений в материале. В результате проведения field-cooling измерений обнаружен температурный гистерезис в окрестности $T_{кр}$ при значениях магнитного поля меньше поля насыщения. Температурная зависимость магнитной восприимчивости также показала корреляцию с аномальным поведением механических свойств. Магнитооптическая визуализация позволила исследовать трансформацию магнитной доменной структуры и выявила её необратимое изменение под действием магнитного поля. Кроме того, было установлено, что магнитная обработка приводит к восстановлению аномального поведения модуля сдвига и затухания звука. Полученные данные позволили прояснить природу наблюдаемых в [1] эффектов.

Работа выполнена в ИФТТ РАН в рамках Госзадания. Авторы благодарны Коржову В.П. (ИФТТ РАН) за изготовление образцов.

## Литература

1. Е.Л. Колыванов, В.П. Коржов // Материаловедение. - 2025. - № 4. - С. 10-17.
2. Евстигнееев Р.С., Успенская Л.С., Баделин А.Г., Карпасюк В.К. // Journ. Surf. Investig: X-ray, Synchrot., Neutr. Techn. - 2024. - V. 18. - No. 6. - P. 1678–1684.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.166

# Спиновые дефекты и их динамические характеристики в перспективном материале для квантовых технологий 6*H*-SiC

**Ермакова Ю. Е[1]., Грачева И. Н.[1], Мурзаханов Ф. Ф.[1], Мамин Г. В.[1], Казарова О. П.[2], Гафуров М. Р.[1]**

*1 Казанский федеральный университет, Институт Физики, Казань, Россия,*

*yliyaermakova@gym5cheb.ru*

*2 Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Среди политипов кристаллов карбида кремния можно выделить три наиболее перспективных для кубитных приложений — 4*H*, 6*H* и 3*C* [1]. В них возможно формирование дефектов, которые демонстрируют свойства, аналогичные NV-центрам в алмазе [1]. В карбиде кремния NV дефект образуется, когда атом азота (N) замещает атом углерода (C), а рядом с ним находится вакансия кремния, а дефект дивакансии представляет собой пару вакансий углерода и кремния. NV дефекты при оптическом возбуждении излучают в ближней ИК-области, что соответствует длине волны передачи оптоволокна. Их времена когерентности являются одними из самых длительных среди твердотельных кубитов. Также центры окраски в карбиде кремния интересны как квантовые источники одиночных фотонов. Настоящая работа посвящена изучению параметров спиновых дефектов и их динамических характеристик в политипе карбида кремния 6*H*-SiC.

В ходе работы с помощью методики спектроскопии ЭПР и ДЭЯР были определены параметры электронно-ядерного и квадрупольного взаимодействий в NV-дефекте в карбиде кремния 6*H*-SiC. По полученным спектрам было установлено, что при понижении температуры интенсивность сигнала NV-центра уменьшается, тогда как интенсивность сигналов от дивакансии VV растет, что связано с перераспределением зарядов между этими дефектами. При высокой температуре VV-центры обладают быстрыми процессами релаксации, но при снижении температуры релаксационные процессы замедляются, увеличивая устойчивость сигналов VV-центров и их вклад в ЭПР-спектр.

При анализе угловой зависимость резонансных частот NV-центров в спектрах ДЭЯР было установлено, что компоненты тензора сверхтонкого взаимодействия $A_{\parallel}$ и $A_{\perp}$ практически равны между собой. Также были измерены температурные зависимости времен релаксации. Аппроксимация зависимости $T_1$ позволила сделать вывод о том, что в диапазоне 50–275 К основное влияние на продольную релаксацию оказывает термоактивируемый процесс, сопровождаемый небольшим температурно-независимым вкладом. При низких температурах на время поперечной релаксации начинает влиять спектральная диффузия электронов. Были определены характерные параметры процесса.

## Литература

1. High-resolution resonant excitation of NV centers in 6H-SiC: A matrix for quantum technology applications / Kh. Khazen, H.J. von Bardeleben, S.A. Zargaleh, [et al.] // Physical Review B. – 2019. – V. 100. – P. 205202.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности – FZSM-2024-0010

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.167

# Поведение нанотвердости растворов меди и титана при наложении интенсивной пластической деформации кручения

**Заворотнев Ю.Д.[1], Томашевская Е.Ю.[2]**
*[1]ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк*
*zavorotnev.yurii@mail.ru*
*[2]ФГБОУ ВО "ДОННУЭТ"*

В последнее время интенсивно исследуются растворы меди и титана с различными металлами. Такой интерес вызван необходимостью управления и улучшения различных свойств этих востребованных в промышленности соединений. В частности, Cu-Ag используется в производстве интегральных микросхем, а растворы на основе титана - в машиностроении, авиа- и космической промышленности. Одним из способов исследования является метод неразрушающего наложения интенсивной пластической деформации кручением (ИПДКР), при которой допускается до пяти и более оборотов образца вокруг некоторой оси [1]. При этом было обнаружено, что независимо от начальных условий (температура отжига) система после наложения ИПДКР приходит в одно и то же состояние, характеризуемое определенной концентрацией предельной растворимости примеси, максимальной нанотвердостью и т.д. В настоящей работе экспериментальные результаты теоретически объясняются на основе феноменологической теории Ландау. Неравновесный потенциал разлагается по структурному параметру порядка (ПП) до шестой степени включительно. Кроме этого, включены также инварианты Лифшица, описывающие возникающую спиральную структуру. Минимизируя этот функционал, получаем изображенную на рис.1 сплошной линией зависимость структурного ПП от числа оборотов для разных температур отжига. Видно, что имеется некоторая критическая температура, при которой величина структурного ПП не меняется, что свидетельствует о достижении максимальной твердости. На эксперименте это состояние достигается путем наложения значительного числа поворотов. Однако, используя гистерезисные явления достичь цели можно за несколько проходов (рис.1).

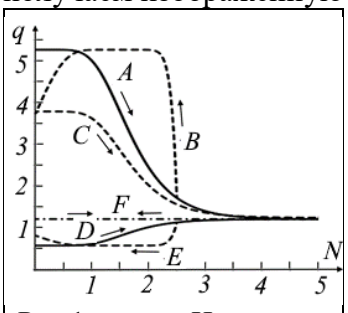



Рис.1. Изменение структур-ного ПП при прямом и обратном поворотах плунжера.

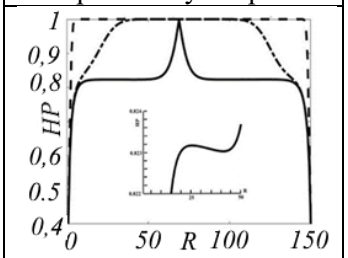



Рис.2. Распределение нанотвердости по радиусу идеального образца.

Аналогичным образом теоретически исследовалась нанотвердость в сплавах титана. Соответствующий эксперимент проводился при неизменном значении крутящего момента и закрепленных краях цилиндрического образца. Показано, что в идеальном соединении максимум нанотвердости HP находится в середине радиуса цилиндрического образца (рис.2). Кроме этого показано, что распределение HP по радиусу имеет осциллирующий характер. Предположение о возможности проскальзывания образца на краях и в центре позволило объяснить несимметричность экспериментальных значений нанотвердости относительно середины радиуса и сдвиг максимума нанотвердости.

**Литература**

1. Straumal B.B., Kilmametov A.R., Korneva A., Zieba P., Zavorotnev Y., Metlov L., Popova O., Baretzky B. // Crystals. – 2021. - V.11. - P.766-778. https:// doi.org./10.3390/cryst11070766.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.168

# Рентгеновские и оптические исследования крупных HPHT алмазов

**Золотов Д. А.[1], Бузмаков А. В.[1], Дьячкова И. Г.[1], Асадчиков В. Е.[1], Хохряков А. Ф.[2], Борздов Ю. М.[2], Пальянов Ю. Н.[2], Ягудин Л. Д.[3], Ширяев А. А.[3]**

[1]*НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия*, zolotovden@crys.ras.ru

[2]*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия*

[3] *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

На сегодняшний день достигнут значительный прогресс в выращивании кристаллов синтетического алмаза как при высоком давлении HPHT (High Pressures – High Temperatures), так и для алмаза газофазного синтеза CVD (Chemical Vapour Deposition). Однако до сих пор не решён вопрос реализации устойчивого роста малодефектных монокристаллов алмаза большого размера, что является одним из основных препятствий на пути к широкому использованию синтетического алмаза в ряде высокотехнологических применений, например, в рентгеновской оптике.

В работе методами оптической микроскопии и рентгеновской топо-томографии на лабораторном источнике [1] исследованы протяженные дефекты в крупных HPHT синтетических алмазах, полученных методом термического градиента при высоких статических давлениях и температурах. Установлено, что сектора роста граней {100} крупных синтетических алмазов характеризуются весьма высокой степенью совершенства. Хотя спиральный рост граней {100} и наблюдался на некоторых алмазах и ранее, в крупных синтетических алмазах мощные дислокационные пучки, направленные в центральную область кубических граней, весьма редки. Повышение температуры и уменьшение скорости роста кристаллов синтетического алмаза позволяет получать кристаллы более высокой степени совершенства, что находит отражение в понижении плотности дислокаций, размера и количества планарных дефектов.

Исследование методом топо-томографии позволило провести количественное изучение аннигиляции дефектов упаковки в процессе высокобарического отжига. Сравнительно быстрая кинетика исчезновения этих дефектов свидетельствует об определяющем вкладе диффузии вакансий. Показано, что аннигиляция дефектов упаковки может приводить к появлению дислокаций.

Работы по исследованию методом оптической микроскопии выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 125012200626-9); работы по росту, отжигу при высоких PT-параметрах и селективному травлению кристаллов синтетического алмаза выполнены по государственному заданию ИГМ СО РАН (№ 122041400159-3); работы по исследованию методом топо-томографии выполнены в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

## Литература

1. Анисимов Н.П., Золотов Д.А., Бузмаков А.В., Дьячкова И.Г., Асадчиков В.Е. // Кристаллография. – 2023. – Т. 68. – № 4. – С. 507–513.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.169

# Механизмы передачи энергии и преобразования света в кристаллах $BaY_2F_8$ при двойной активации ионами $Tb^{3+}$-$Yb^{3+}$

**Зубарева А.М.*, Шавельев А.А., Шакиров А.А., Миннебаев Т.М., Олейникова Е.И., Сидоров И.Д., Гинкель А.К., Низамутдинов А.С.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, г. Казань, Россия*

* gumonya@list.ru

В последние годы исследований материалы, легированные редкоземельными ионами, востребованы в виду большого количества механизмов передачи энергии из видимого диапазона в БИК-диапазон. В частности, в последние годы фториды являются основными объектами исследований [1]. Данные материалы имеют широкий спектр практических применений: апконверсионные лазерные системы, лазерные системы видимого диапазона, флуоресцентные метки на биомолекулах, а также в устройстве солнечных панелей [2, 3].

В данной работе были исследованы спектрально-кинетические характеристики кристаллов $BaY_2F_8$, активированные ионами $Tb^{3+}$ и при двойной активации ионами $Tb^{3+}$-$Yb^{3+}$. Были зарегистрированы и изучены спектры поглощения образцов, спектры люминесценции, а также кинетики затухания на длинах волн интересующих нас переходов с состояний $^5D_3$ и $^5D_4$ иона $Tb^{3+}$ (~380нм, ~480нм, ~540нм); были зарегистрированы и изучены низкотемпературные спектры люминесценции в диапазоне температур 77-300 К интересующего нас иона $Yb^{3+}$. Был измерен энергетический индекс зависимости интенсивности антистоксовой люминесценции от мощности падающего импульса возбуждения, который равен 2,27 и 2 для уровней $^5D_4$ и $^5D_3$, соответственно. Был измерен квантовый выход антистоксовой люминесценции кристаллов с двойной активацией ионами $Tb^{3+}$-$Yb^{3+}$, который составляет 0,004 %, 0,03 % и 0,014 % для, соответственно, 2 ат.%, 5 ат.% и 10 ат.% концентрации ионов иттербия. Был измерен квантовый выход даунконверсионной люминесценции, который составил 70,3 %, 49,3 % и 55,05 % 2 ат.%, 5 ат.% и 10 ат.% для концентраций ионов $Yb^{3+}$, соответственно. Был сделан вывод, что происходит обратный перенос энергии на ионы $Yb^{3+}$; процессы кросс-релаксации уменьшают населенность на уровне $^5D_3$ и одновременно увеличивают населенность на уровне $^5D_4$ для ионов $Tb^{3+}$. Был сделан вывод, что передача энергии от $Tb^{3+}$ к $Yb^{3+}$ происходит не по кооперативным механизмам переноса энергии, а, возможно, по механизмам однофотонного процесса, которые станут предметом дальнейшего изучения.

## Литература

1. A. V. Leontyev, L. A. Nurtdinova, E. O. Mityushkin, A. G. Shmelev, D. K. Zharkov, V. V. Andrianov, L. N. Muranova, Kh. L Gainutdinov, V. G. Nikiforov// Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics – 2024 - Vol.88 - pp.853-858
2. Jie Ding, Qiang Zhang, Jimeng Cheng, Xiaofeng Liu, Geng Lin, Jianrong Qiu, Danping Chen// Journal of Alloys and Compounds – 2010 - Vol.495 - pp.205-208
3. Xianju Zhou, Yongjie Wang, Guangchuan Wang, Li Li, Kaining Zhou, Qingxu Li// Journal of Alloys and Compounds – 2013 - Vol. 579 - pp.27-30

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.170

# Impact of Geometrical Dimensions and magnetic field on Interband Light Absorption in a Quantum Dot Superlattice

**Ibragimov G. B. [1] Zalova S.A.[1] Ibragimov B.G. [1,2]**

[1]*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan Republic, Baku*
[2]*French-Azerbaijani University, Baku*

Quantum dot superlattices are expected to exhibit significantly different non-equilibrium transport properties compared to quantum well superlattices. Their potential applications in high-performance thermoelectric converters , photovoltaics , and quantum cascade lasers further emphasize the importance of understanding their nonequilibrium transport characteristics. Due to three-dimensional quantum confinement, quantum dot superlattice structures exhibit a delta-function distribution of the density of states, discrete energy levels, an improved carrier scattering mechanism, and considerably lower lattice thermal conductivity, making them promising candidates for enhanced thermoelectric devices .

Due to its mathematical simplicity, it is regarded as one of the exactly solvable problems in quantum mechanics. This model is applied to a broad range of phenomena, from molecular vibrations to the dynamics of quantized fields. Within the strong-coupling approximation, the Hamiltonian describing charge carriers in a quantum dot superlattice can be expressed as follows :

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left(P + \frac{e}{c}A\right)^2 + m^*\omega_0^2\,(x^2 + y^2) + \frac{\Delta}{2}\left(1 - \cos p_z \frac{d}{\hbar}\right) \qquad (1)$$

Here $\Delta$ - is the width of miniband. Numerous theoretical and experimental studies have explored the optical properties of nanostructures such as quantum dots, quantum wires, and quantum wells [1, and the reference there]. The optical properties of quantum dots were first examined by Efros and Efros [2] in their theoretical study of direct light absorption in spherical quantum dots with infinitely high potential barriers.. Consequently, the equation for the absorption coefficient of a quantum dot superlattice can be formulated as follows:

$$K(\Omega) = A_0 \sum_{v,v'} \left| \int_V \psi_v^e \psi_{v'}^h dV \right|^2 \delta\left[\hbar\Omega - E_g - E_v^e - E_{v'}^h\right] \qquad (2)$$

where represents a quantity proportional to the squared modulus of the dipole moment matrix element, evaluated using Bloch functions.

In this study, we analyzed the direct interband transitions in a quantum dot superlattice. We derived analytical expressions for the interband light absorption coefficient and the absorption threshold frequency as functions of the geometrical size of the quantum dot superlattice. Additionally, we investigated how the absorption threshold frequency depends on the size and maqgnetic field of the quantum dot superlattice. Based on the findings of this study, it is concluded that the size of the quantum dot superlattice plays a significant role in determining the absorption threshold frequency.

## References

1.G.B.Ibragimov, R. Z. Ibaeva, // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2024, Vol. 18, No. 1, pp. 116–120.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.171

# Распределение элементов по толщине тонких ВТСП пленок $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с разным рельефом поверхности

**Ильин А.И.[1], Иванов А.А.[2], Егоров В.К.[1]**

[1] *ИПТМ РАН, Россия, 142432, г. Черноголовка, Московская обл., ул. Академика Осипьяна, 6,*
*[1]E–mail: ilin@iptm.ru, egorov-iptm@mail.ru*
[2] *НИЯУ "МИФИ" Россия, 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31, E–mail: andrej.ivanov@gmail.com*

Купраты YBCO среди ВТСП материалов являются наиболее значимыми, поскольку охлаждение до температуры жидкого азота достаточно для получения в них сверхпроводящего (СП) состояния с критической плотностью тока выше $10^6$ А/см$^2$ [1]. В нашей работе при осаждении импульсным эксимерным лазером из одной мишени с составом $YBa_2Cu_3O_{6.8}$ пленки толщиной 170-300 нм имели T(R=0) от 77.4 до 87К. Рентгенофазовый анализ, анализ спектров рентгеновской флуоресценции (РФ) показал присутствие в пленках примесных элементов Zn, Sr, Pd, Ag и Ti в количестве не более 2 ат. %. Исследование спектров РФ позволили установить неоднородность распределения атомов Y, Ba, Cu и примесных элементов по глубине. Избыток в верхнем слое пленок атомов Y и Cu был причиной ухудшения СП свойств в сравнении с пленками с оптимальным соотношением Y и Cu по толщине. Количество атомов примесных элементов возрастало у поверхности пленок при медленном осаждении. Неравномерное распределение элементов было причиной шероховатости пленок в виде возникновения рельефа на поверхности, исследованного методами СЭМ и АСМ. Поскольку свойства пленок сильно зависят от структуры и состава [2 - 4], а распределение состава по толщине изучены недостаточно, и в частности, в пленках с наноразмерными и крупными кристаллитами, то изучение распределения элементов по толщине представляется важной задачей для разработки технологий получения двумерных структур на основе ВТСП [5]. В данной работе анализ морфологии поверхности в СЭМ, XRD, XRF и RBS методы позволили определить послойное содержание элементов в виде формул состава каждого слоя в пленках YBCO с разным рельефом поверхности. Знание распределения элементов необходимы как для оптимизации технологий осаждения пленок YBCO в промышленности, так и в электронике для исследования физических явлений [6,7].

## Литература

1. Manabe, T.; Kondo, W.; Yamaguchi, I.; Sohma, M.; Tsuchiya, T.; Tsukada, K.; Mizuta, S. & Kumagai, T., Physica C 417 (2005), 98-102
2. Il'in A.I., Andreeva A.V., Tolkunov B.N. Materials Science Forum. 1996. Т. 207-209. № Part 2. С. 625-628ё
3. Ильин А.И., Андреева А.В., Физика металлов и металловедение. 1995. Т. 80. № 2. С. 132
4. Il'in A. I., Ivanov A. A., Trofimov O. V., Firsov A. A., Nikulov A. V., and Zotov A. V., Russ. Microelectron, Russian Microelectronics,.2019, 48, № 2, 119
5. Il'in A.I., Egorov V.K., Ivanov A.A., J. vacuum, 2025, v. 23, p. 113737
6. Gurtovoi V.L., Il'in A.I., Nikulov A.V., Antonov V.N., Exarchos M., Physica C: Superconductivity and its Applications. 2019. Т. 559. С. 14-20
7. Gurtovoi V.L., Il'in A.I., Nikulov A.V., Physics Letters A., 2020, v. 384, №26, p. 126669

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.172

# SnS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего поликристаллического пниктида недодопированного состава $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ с x=0.07

**Ильина А. Д.[1,2], Никитченков И. А.[1,3], Кузьмичев С. А.[3,1], Перваков К. С.[1], Власенко В. А.[1], Медведев А. С.[1], Кузьмичева Т. Е.[1]**

[1]*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия, office@lebedev.ru*

[2]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия, info@mipt.ru*

[3]*МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия, info@rector.msu.ru*

Исследованные поликристаллы $BaFe_{1.93}Ni_{0.07}As_2$ относятся к семейству железосодержащих сверхпроводников (СП) Ba-122. Переход в СП-состояние на фазовой диаграмме достигается при максимальной критической температуре $T_c \approx 20$ К, x ≈ 0.1 [1]. На поверхности Ферми по результатам ФЭСУР присутствует дырочный цилиндр около Г-точки зоны Бриллюэна и два вложенных электронных цилиндра в М-точках, каждая зона вносит вклад в сверхпроводимость ниже $T_c$ [1].

В данной работе исследованы вольтамперные характеристики (ВАХ) и спектры дифференциальной проводимости (ДП) планарных туннельных контактов типа SnS (*S* – СП, *n* – тонкий нормальный металл) высокой прозрачности в баллистическом режиме реализации эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (ЭНМАО) [2], полученных методикой “break-junction” [3] на базе поликристаллов $BaFe_{1.93}Ni_{0.07}As_2$ недодопированного состава с $T_c \approx 17–18$ К.

Ниже $T_c$ в $BaFe_{1.93}Ni_{0.07}As_2$ наблюдалась многощелевая сверхпроводимость. Определены экстремумы предположительно анизотропной большой СП-щели (наименьшее и наибольшее значение энергии связи куперовских пар в k-пространстве в данных зонах [5]) с параметром анизотропии $A_L = 100\%\cdot[1-\Delta_L^{in}/\Delta_L^{out}]$, слабо зависящим от температуры $A_L \approx 30 \pm 5$ %, с характеристическими отношениями $2\Delta_L^{in}(0)/k_BT_c \approx 4$, $2\Delta_L^{out}(0)/k_BT_c \approx 5.5$. Также определена предположительно изотропная малая СП-щель с $2\Delta_S(0)/k_BT_c \approx 2$ [6]. Полученные величины и вид температурных зависимостей СП-щелей согласуются с полученными ранее данными для монокристаллов близкого состава [7]. Таким образом, наблюдаемые на ДП-спектрах особенности не могут быть вызваны геометрическими резонансами или разориентацией СП-берегов контакта, а полученные энергетические величины соответствуют объемным СП-параметрам порядка. Оценено умеренное межзонное взаимодействие в k-пространстве между СП-конденсатами.

Помимо щелевых особенностей, ниже $T_c$ на ДП-спектрах мы наблюдали тонкую структуру при $|eV| = [2\Delta + E_{res}]/n$, связанную, предположительно, с испусканием бозона в процессе ЭНМАО. Впервые для недодопированных $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ определена энергия бозона $E_{res}(0) \approx 4.3$ мэВ и ее температурная зависимость. С увеличением температуры $E_{res}(T)$ слабо убывала, не повторяя зависимость $\Delta(T)$, однако схоже с поведением энергии спин-резонансного пика в железосодержащих СП [8].

## Литература

1. Кузьмичева Т.Е. [et al.]. // Письма в ЖЭТФ. – 2025. – Т. 121. – № 5–6. – С. 462–480.
2. Kummel R., Gunsenheimer U., and Nicolsky R. // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 42. – P. 3992.
3. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // Физ. Низк. Темп. – 2016. – Т. 42. – С. 1284.
4. Ильина А. Д. [et al.]. // Сверхпровод.: фунд. и прикл. иссл. – 2024. – Т.1. – №4.– С. 32–42.
5. Садаков А.В. [et al.]. // Письма в ЖЭТФ. – 2022. – Т. 116. – С. 686.
6. Korshunov M.M., Shestakov V.A., Togushova Yu.N. // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 94. – P. 094517.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.173

# Взаимодействие примесей водорода и ванадия с вакансиями в ГЦК-титане: ab initio исследование

**Кардаш А. С.[1], Верховых А.В.[1], Мирзоев А.А.[1]**

[1] *ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Челябинск, Россия, sashakardash999@gmail.com*

Титан и его сплавы являются важными конструкционными материалами в аэрокосмической, автомобильной и биомедицинской областях, благодаря сочетанию высокой удельной прочности и коррозионной стойкости [1]. Как известно, Ti имеет при комнатной температуре (<882°C) ГПУ структуру, переходя при температуре выше 882 °C в структуру ОЦК. Однако ряд недавних исследований показал, что фаза Ti с ГЦК структурой появляется при понижении размерности – на поверхности, границах зерен, тонких пленках [2,3], а также при легировании [4]. В коммерчески чистом Ti были обнаружены вызванные напряжением фазы ГЦК Ti с пластинчатой или игольчатой формой и толщиной 12 мм при криогенном плоском сжатии [3]. Кроме того, ГЦК-структурой обладают гидриды титана TiHx ($x \geq 1$), которые являются перспективными материалами для хранения водорода. ГЦК фаза Ti изучена, значительно хуже, чем ГПУ и ОЦК, хотя представляет интерес из-за уникальных электронных свойств [5,6]. Водород оказывает двойственное воздействие на титановые сплавы - может вызывать охрупчивание, но и улучшать механические характеристики при термоводородной обработке [7,8]. Однако взаимодействие водорода с вакансиями и легирующими элементами, такими как ванадий, в ГЦК-Ti остается недостаточно исследованным. В данной работе мы проводим исследование в рамках DFT, используя PAW-метод с учетом GGA в программном пакете VASP. В качестве модели была выбрана ГЦК-структура, состоящая из 32 атомов. Было получено, что равновесный параметр решетки для ГЦК-Ti составляет 4.109 Å, а модуль всестороннего сжатия равен 105.61 ГПа, что согласуется с литературными данными [4,9]. Энергия образования вакансии была определена на уровне 1.94 эВ, что близко к значению для ГПУ-Ti [10]. Водород в ГЦК-Ti предпочитает октапоры, аналогично ГПУ-структуре. Ванадий и вакансии слабо взаимодействуют, но влияют на параметры решетки и объемные модули. Комплексы дефектов могут захватывать водород, что важно для понимания диффузии и термоводородной обработки титановых сплавов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 25-22-20062

## Литература

1. Sibum H. // Adv. Eng. Mater. - 2003. - V. 5. - P. 393-398.
2. Tepper T. D. //Materials Letters. -1997. -V.33. - P. 181-184.
3. Hong D.H. // Scripta Mater. – 2013 - V. 69. - P.405-408.
4. Han G., Wang Q., Sun D., Zhang H. // J. Alloys Compd. - 2018. - V. 748. - P. 943-952.
5. Sliwko V.L., Mohn P., Schwarz K., Blaha P. // J. Phys.: Condens. Matter. - 1996. - V. 8. - P. 799-815.
6. Aguayo A., Murrieta G., de Coss R. // Phys. Rev. B. - 2002. - V. 65. - P. 1-4.
7. Tal-Gutelmacher E., Eliezer D. // JOM. - 2005. - V. 57. - P. 46-49.
8. Froes F.H., Senkov O.N., Qazi J.I. // Int. Mater. Rev. - 2004. - V. 49. - P. 227-245.
9. Vullum P.E., Pitt M., Walmsley J., Hauback B., Holmestad R. // Appl. Phys. A. - 2009. - Vol. 94. - P. 787-794.
10. Connétable D., Huez J., Andrieu E., Mijoule C. // J. Phys.: Condens. Matter. - 2011. - V. 23. - P. 405401.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.174

# ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОТЖИГОВ В РАЗНЫХ АТМОСФЕРАХ И ОБЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ НА СВОЙСТВА И ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ GAGG:$Ce^{3+}$

**Касимова В.М.[1], Козлова Н.С. [1], Забелина Е.В. [1], Бузанов О.А.[2], Лагов П.Б.[1,3], Павлов Ю.С.[3]**

[1]*НИТУ МИСИС, Москва, Россия,* kasimova.vm@misis.ru, kozlova_nina@mail.ru, zabelina.ev@misis.ru, lagov2000@mail.ru

[2]*АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия,* buzanov@newpiezo.ru

[3]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия,* rad05@bk.ru

В качестве сцинтилляционных материалов для применения в физике высоких энергий и космических исследованиях чаще всего используются оксидные монокристаллы высокого оптического качества с необходимым набором заданных характеристик. Перспективным кандидатом для таких применений [1, 2] является кристалл $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce^{3+}$ (GAGG:$Ce^{3+}$), относящийся к классу гранатов.

Фундаментальные оптические свойства и микротвердость GAGG:$Ce^{3+}$ в зависимости от высокотемпературного отжига и облучения электронами изучены недостаточно, остается невыясненным процесс дефектообразования в кристаллах после подобных обработок. В связи с этим, в данной работе исследуются кристаллы составов GAGG:Ce в исходном состоянии, после высокотемпературных отжигов в вакууме и на воздухе, после облучения электронами и совместных отжигов и облучения электронами.

Кристаллы выращены в АО «Фомос-Материалы». Исследования оптических свойств и микротвердости проводились в аккредитованной испытательной лаборатории «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС. Спектрофотометрическими методами на спектрофотометре Cary-5000 с приставкой UMA (Agilent technologies) получены спектральные зависимости коэффициентов пропускания, на основании которых рассчитаны показатели ослабления, оптическая ширина запрещенной зоны. Методом Виккерса на микротвердомере Aaffri DM 8 B Auto измерена микротвердость, которая переведена в твердость по Моосу.

Установлено влияние отжигов и облучения электронами на оптические и механические свойства в зависимости от способа обработки GAGG:$Ce^{3+}$, а также на дефектообразование в кристалле.

## Литература

1. Irradiation studies of a multi-doped $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$ scintillator / V. Alenkov, O. Buzanov, G. Dosovitskiy et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. – 2019. – Vol. 916. – P. 226-229.
2. The HERMES (High Energy Rapid Modular Ensemble of Satellites) Pathfinder mission / Y. Evangelista, F. Fiore, R. Campana et al. // Space Telescopes and Instrumentation 2024: Ultraviolet to Gamma Ray. – 2024. – Vol. 130931Z.

Исследования проводились в аккредитованной лаборатории полупроводниковых материалов и диэлектриков «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.175

# Варьирование геометрии, структуры и свойств диэлектрических кристаллитов при их формировании из растворов в электрическом поле

**Классен Н. В., Винокуров С.А., Цебрук И.С.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия а,*
klassen@issp.ac.ru

Формирование твердотельных материалов из растворов в электрическом поле хорошо изучено и широко применяется для нанесения гальваническим способом металлических покрытий. В этом случае на проводящую подложку, служащую катодом, из раствора осаждаются катионы растворенных там металлов [1]. Но формирование диэлектрических кристаллитов из растворов под действием электрического поля гораздо менее изучено и широкого применения пока не нашло. Между тем результаты, представленные в данном докладе, как и полученные нами ранее [2,3], показывают, что это направление актуально как для углубления знаний о взаимодействии жидких и твердых сред, так и для разработки новых прорывных технологий. Среди интересных заделов – рекордная скорость роста кристаллов игольчатых профилей (сотни микрон в секунду), обширные возможности регулирования поперечных профилей кристаллов и концентрациями в них легирующих добавок варьированием геометрии распределения и амплитуд электрического поля. В отличие от гальванического формирования металлических кристаллитов и покрытий процесс электрокристаллизации диэлектрических материалов отчетливо разделяется на несколько отдельных стадий, каждая их которых является сложной функцией составов раствора и растворителя, распределения направлений и амплитуд электрического поля, картинами дополнительных внешних воздействия (лазерного облучения, ультразвуковых вибраций и др.). Особое значение имеет наличие в растворе зародышей кристаллизации, их размеры и геометрии. Например, для устройств конфокальной рентгеновской микроскопии перспективна методика заполнения конической системы микрокапилляров, сходящихся своими осями в точке виртуальной вершины конуса, выращиваемыми электрокристализацией из водного раствора микроволокнами эффективных сцинтилляторов ( йодила или сульфата цезия и др.). В этой ситуации, например, представляют интерес два варианта заполнения: кристаллизующимися из водных растворов в слабом электрическом поле однокомпонентными неорганическими сцинтилляторами ,а также формируемыми в сильных электрических полях кластерно – полимерными композициями из неорганических сцинтилляторов и органических люминофоров (методика электроспиннинга [4]). Заполнение электрокристаллизацией из водных растворов микрокапилляров растительной природы со стенками из пьезоэлектрической целлюлозы тяжелыми неорганическими поглотителями рентгеновских квантов способно создать новый вид эффективных рентгеновских детекторов, когда поглощение этих квантов тяжелыми атомами будет моментально давать электрические сигналы за счет возбуждения электромеханических волн в стенках с сильным пьезоэлектричеством

, 4/ /

## Литература

1. Бобрикова И.Г., Липкин М.С., Селиванов В.Н. Т38 Технологические расчѐты процессов получения электрохимических покрытий: учеб. пособие/ Юж.-Рос. гос. техн. ун-т. – Новочеркасск: ЮРГТУ, 2008. – 141 с..
2. S. A. Vinokurov, I S Tsebruk, T D Betenina, N V Klassen; Modulation of structure and optical properties of micro-fibrils of plants by means of electrical, deformation and optical treatments. Journal of Physics: Conference Series 1560 012042 (2020)– С. 1-11.
3. Винокуров С.А., Классен Н.В., Орлов А.Д. “Structural transformations in the system lanthanum 4/ bromide- water – electrical field”, Journal of Physics C – 2021. – Vol. 2056, Iss. 1. – P. 12037,

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.176

# Эффекты памяти в магнитопластичности кристаллов

**Колдаева М.В.*, Петржик Е.А., Альшиц В.И., Кварталов В.Б.**
*Отделение "Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова" Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,* *E-mail: mkoldaeva@ns.crys.ras.ru

Магнитопластичность – широкий круг эффектов влияния магнитного поля на механические свойства разнообразных немагнитных кристаллов [1–3]. Существуют магнитостимулированные явления двух типов: эффекты *in situ*, когда наблюдаемые изменения происходят непосредственно в магнитном поле; и эффекты памяти, при которых модификация примесной подсистемы происходит в процессе экспозиции, а изменения механических свойств и реальной структуры наблюдаются после нее.

Для проявления эффектов памяти необходимо, чтобы система точечных дефектов кристалла была чувствительной к магнитному воздействию и была способной к трансформации в процессе экспозиции в достаточно долгоживущие метастабильные состояния [4]. Тогда макро-свойства кристалла на время изменятся, что скажется на подвижности свежевведенных дислокаций или микротвердости.

В настоящей работе мы показываем, что эффекты памяти в магнитопластичности могут ярко проявляться и в хорошо отожженных кристаллах. Изучалась серия кристаллов NaCl с различным примесным составом. Измерялись пробеги и относительная плотность подвижных дислокаций, а также микротвердость кристаллов после их экспозиции в постоянном магнитном поле или в скрещенных сверхнизких магнитных полях. Дислокации вводились в кристалл после магнитной экспозиции. Их положения выявлялись избирательным травлением. Варьировались как время магнитной обработки, так и временные интервалы между окончанием магнитной экспозиции и вводом дислокаций, а также паузы между травлениями.

В двух из четырех кристаллов разного типа обнаружено заметное релаксационное, без дополнительных внешних воздействий, перемещение дислокаций, введенных после экспозиции. В двух других кристаллах с меньшим содержанием примесей пробеги остаются на уровне фона, но в одном из них экспозиция вызывает увеличение плотности подвижных дислокаций. Введение дислокаций после магнитной экспозиции приводит к их релаксационным перемещениям из неустойчивых положений, а при сильно ослабленном пиннинге они сразу занимают практически отрелаксированные позиции.

Аналогичная магнитная экспозиция приводит также к уменьшению микротвердости кристаллов, но величина эффекта зависит от типа примеси. Интерпретация наблюдений сводится к спин-зависимой трансформации в магнитном поле примесных центров по механизму Бучаченко [5] $Me^{2+} \rightarrow Me^{+}$, что пластифицирует кристалл, а дальнейшие изменения происходят диффузионно.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ "Курчатовский институт", частично с использованием оборудования ЦКП "Структурная диагностика материалов" КККиФ НИЦ "Курчатовский институт".

## Литература

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Кристаллография. – 2003. – Т. 48. – № 5. – С. 826.
2. Alshits V.I., Darinskaya E.V., Koldaeva M.V., Petrzhik E.A. In: Dislocations in Solids. 2008. V. 14, Ch. 86, Ed. J.P. Hirth, Elsevier, Amsterdam . pp. 333–437.
3. Головин Ю.И. // ФТТ. – 2004. – Т. 46. – № 5. – С. 769.
4. Моргунов Р.Б., Бучаченко А.Л. // ЖЭТФ. – 2009. – Т. 136. – № 3. – С. 505.
5. Бучаченко А.Л. // УФН. – 2019. – Т. 189. – № 1. – С. 47.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.177

# Структура и свойства нового литейного сплава Al-Zn-Mg-Cu-Y с высоким содержанием примесей

**Коновалова С.М.[1], Главатских М.В., Марданшина Т.М.**
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, Россия, konovalova@edu.misis.ru*

Для улучшения литейных свойств и жаропрочности алюминиевых сплавов применяется легирование эвтектикобразующими элементами. Особое внимание следует уделить малым добавкам редкоземельных металлов, которые эффективно модифицируют зерно слитков и отливок. Неизбежные для алюминиевых сплавов примеси Fe и Si могут оказывать негативное воздействие на механические и коррозионные свойства материалов.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесей Fe и Si и скорости охлаждения при кристаллизации на структуру и свойства нового литейного жаропрочного сплава на основе системы Al-Mg-Zn-Cu-Y в литом состоянии и после гомогенизации.

Для реализации различных скоростей охлаждения было применено три способа получения образцов сплавов: кристаллизация сплава в стальной изложнице (скорость охлаждения – 10-15 градус/с), повторное расплавление сплава и последующее охлаждение вместе с печью (0,02 градус/с), поверхностное лазерное плавление ($10^7$ градус/с). При исследовании влияния скорости охлаждения на размер дендритной ячейки было выявлено, что уменьшение скорости приводит к росту размера ячейки с 1 мкм до 160 мкм.

Увеличение содержания примеси Si в сплавах, отлитых в стальную изложницу и закристаллизованных с печью, приводит к увеличению доли фазы $Mg_2Si$ и образованию игольчатых частиц фазы $Al_{5,5}Cu_{2,5}Y_2Si_2$ (рисунок 1).

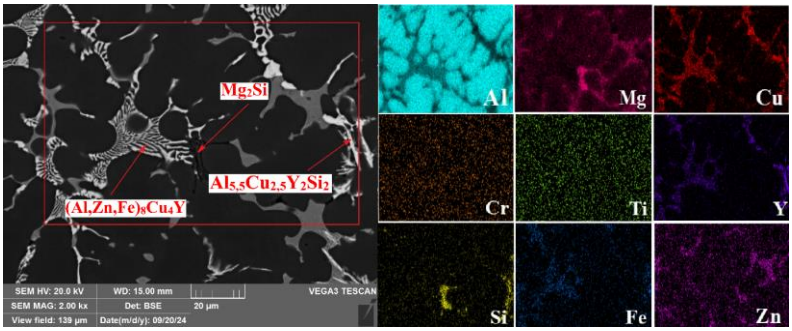



Рисунок 1 – Распределение элементов в сплаве с повышенным содержанием примесей, полученном литьем в стальную изложницу

Примесь Fe в сплавах, отлитых в стальную изложницу, полностью (0,15-0,5 %) растворяется в фазе $Al_8Cu_4Y$, в которой также растворяются атомы Zn до 5 %. В образцах, закристаллизованных с печью, в дополнение выявлено наличие отдельных частиц фаз $Al_{11}Fe_3$. Структура, сформированная после лазерного плавления, не позволяет провести идентификацию фаз. Однако в процессе гомогенизации на границах зерен происходит рост частиц $Al_8Cu_4Y$.

В процессе гомогенизации образцов, полученных кристаллизацией в печи и изложнице, фаза T (Al, Zn, Mg, Cu) частично растворяется и преобразуется в фазу S ($(Al,Zn)_2MgCu$). Изменений в морфологии фаз, содержащих Y, не происходит.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Project No. 22-79-10142), https://rscf.ru/project/22-79-10142/*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.178

# Применение метода непрерывного измерения жесткости (CSM) для анализа вязкоупругих свойств высокоупорядоченных природных полимеров в процессе наноиндентирования древесины сосны и ели

**Тюрин А. И.*, Коренков В. В., Юнак М. А., Самодуров А. А., Тюрин В. А.**
*Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Тамбов, Россия*
e-mail: tyurinalexander@yandex.ru

Более четверти века прошло с момента первого применения метода наноиндентирования (NI) для исследования механических свойств древесины [1] и других материалов [2-4]. Для расширения возможностей NI была разработана мода CSM (Continuous Stiffness Measurement) измерения модуля упругости *E* и твердости *H* в течение цикла нагружения, в которой на основную квазистатическую нагрузку накладывают дополнительные осциллирующие колебания на несколько порядков величины меньшей основной нагрузки с частотой до нескольких десятков герц и измеряют амплитуду и фазовый сдвиг деформации относительно гармонической компоненты силы [3,5,6]. Мода CSM принципиально эквивалентна динамическому механическому анализу (DMA), однако в отличие от него реализуется не в макро-, а в нанообъеме исследуемого материала [5,7]. Еще одно отличие CSM от традиционного NI заключается в непрерывной регистрации параметров нагружения, а не только в точке максимальной нагрузки.

Однако, не смотря на все эти достоинства, метод CSM довольно редко применяется для исследования механических свойств древесины [8,9]. Причина заключается в сложном характере и высокой изменчивости вязкоупругих свойств древесины, поскольку их поведение зависит от времени и проявляется в ползучести и релаксации. Тем не менее, в последнее время появились первые результаты исследований вязкоупругого поведения клеточных стенок хвойной древесины некоторых видов на микро- и наноуровнях в широком диапазоне частот как в поперечном, так и в продольном направлениях [8]. Поэтому целью данной работы было детальное выяснение и сравнение вязкоупругих свойств древесины таких распространенных пород как сосна обыкновенная (*Pinus sylvestris L.*) и ель европейская (*Picea abies*), их зависимости от частоты зондирующих гармонических осцилляций и твердости в процессе наноиндентирования.

В работе определен вклад структур различного масштаба в соотношение вязкоупругих свойств ранней и поздней древесины сосны и ели в составе одного годового кольца. Детально оценено влияние дополнительной осциллирующей нагрузки на динамические параметры древесины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-16-00231 (https://rscf.ru/project/23-16-00231/).

Литература

1. Wimmer R., Lucas B., Tsui T. et al. // Wood Sci. Tech. - 1997. - V. 31. - P. 131-141.
2. Springer Handbook of Nanotechnology / ed. B. Bhushan. Berlin: Springer-Verlag, 2007.1916 p.
3. Головин Ю.И. // ФТТ. - 2021. - Т. 63. - № 1. - С. 3-42.
4. Головин Ю.И., Иволгин В.И., Тюрин А.И., Хоник В.А.// ФТТ. - 2003. - Т. 45. - № 7. - С. 1209-1212.
5. Li X., Bhushan B. // Materials Characterization. - 2002. - V. 48. - P. 11-36.
6. Tze W., Wang S., Rials T. et al. // Composites: Part A. - 2007. - V. 38. - P. 945–953.
7. Oliver W.C., Pharr G.M. // J. Mater. Res. - 2004. - V. 19. - P. 3-20.
8. Erazo O., Jakes J. et al. // Forests. - 2023. - V. 14. - a. m. 1900.
9. Тюрин А.И., Коренков В.В., Гусев А.А. и др. // Российские нанотехнологии. - 2024. - Т. 19. - С. 483-492.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.179

# Влияние условий СВС на формирование MAX-фазы $Ti_2AlN$

**Ларионова Н. С.** [1], **Корепанова С. Н.** [2]
[1] *НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия,* E-mail: larionova_n@udman.ru
[2] *УдГУ, Ижевск, Россия,* E-mail: sofyacorepanowa@gmail.com

MAX-фазы представляют собой тройные слоистые на уровне кристаллической решетки соединения, которые описываются общей формулой $M_{n+1}AX_n$ (где n = 1, 2, 3, …; M – переходный d-металл; A – p-элемент; X – углерод или азот). Существуют различные методы получения MAX-фазы $Ti_2AlN$: горячее изостатическое прессование, искровое плазменное, реакционное, микроволновое спекание и спекание в вакууме. Синтез осуществляют с использованием, как нитридов, так и газообразного азота. В зависимости от условий получения и исходных компонентов разными авторами показано формирование до ~ 20-100 масс.% $Ti_2AlN$. Однако данные методы требуют дорогостоящего оборудования, значительных затрат энергии и времени, им характерны сложность и многостадийность технологических циклов. Перспективным способом получения $Ti_2AlN$ является метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Целью настоящей работы является исследование влияния исходных материалов и режимов СВС на формирование MAX-фазы $Ti_2AlN$.

В качестве исходных материалов использовали порошки титана марки ПТМ-1 (99%, 5–15 мкм), алюминия марок ПА1 (99%, ~ 315 мкм) и АСД-1 (99,7%, 20-30 мкм), нитрида алюминия AlN. СВС осуществляли согласно следующим реакциям в режиме теплового взрыва:

$$2Ti + AlN \rightarrow Ti_2AlN \quad (1)$$

и послойного горения:

$$4Ti + 2Al + N_2 \rightarrow 2Ti_2AlN \quad (2).$$

В первом случае исходные порошки медленно нагревали в печи Таммана до температуры 1300 ºС в проточном аргоне, затем выдерживали 40 минут при 1500 ºС. Синтез в режиме волнового горения проводили в реакторе РВС-10 объемом 10 л, изготовленном в НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, в атмосфере азота ($P_{N2}$ = 70 атм).

Фазовый состав полученных образцов определяли на основе рентгеноструктурных данных (дифрактометр ДРОН-6, CuKα-излучение). Структуру поверхности изломов исследовали методом растровой электронной микроскопии (Termo Fisher Scientific Quattro S, с возможностью энергодисперсионного микроанализа на основе спектометра EDAX Octane Elect Plus EDS System).

В образце, полученном в режиме теплового взрыва по реакции (1), формируются MAX-фаза $Ti_2AlN$ и нитрид титана TiN. Количество $Ti_2AlN$ составляет ~ 93 масс.%. В результате волнового горения по реакции (2) образуются MAX-фаза $Ti_2AlN$, нитриды титана $TiN_x$ и алюминия AlN, алюмонитрид $Ti_3AlN$ и интерметаллид $Ti_3Al$. Проанализировано влияние дисперсности алюминия на качественный и количественный фазовый состав получаемых образцов. Использование алюминия меньшей дисперсности приводит к увеличению содержания MAX-фазы (от ~ 42 до ~ 47 масс.%). Методом растровой электронной микроскопии выполнен детальный анализ морфологии образцов. Обсуждается механизм формирования $Ti_2AlN$ в условиях сравниваемых режимов СВС.

Исследование выполнено в рамках госзадания (№ 1022040701106-8-2.5.1;2.5.3;2.5.4) с использованием оборудования ЦКП "Поверхность и новые материалы" УдмФИЦ УрО РАН.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.180

# МАГНИТНЫЕ, ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК (CoFeB+SiO2) С РАЗНОЙ СТРУКТУРОЙ

**Котов Л. Н.[1,*], Уткин А. А. [1], Лебедев С. В. [2], Королёва А. В.[2], Калинин Ю. Е.[3], Ситников А. В. [3]**

[1]*Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, 198904, Санкт-Петербург*
[3]*Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж*

**e-mail: kotovln@mail.ru*

Интенсивное развитие технологий искусственного интеллекта (ИИ) стимулирует разработку новой электронной компонентной базы [1]. Создание новых электронных устройств ИИ на основе композитных плёнок невозможно без контроля параметров состава и структуры. Для этих задач можно использовать метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) [2]. Цель данной работы состояла в нахождении связи между параметрами РФЭС и структурой композитных плёнок ($CoFeB+SiO_2$) с уникальными магнитными и проводящими свойствами. Магнитная структура изучалась на основе изображений магнитного фазового контраста (МФК) плёнок, полученных с помощью ACM NTEGRA PRIMA (NT-MDT, Россия) [3]. Анализ изображений МФК, показал, что для плёнок с концентрацией металлов *CoFe* $x$=0.48-0.56 характерна гранулярно-перколяционная структура. А для плёнок с $x$=0.57-0.78 была характерна магнитная полосовая структура. Средняя ширина магнитных полос увеличивалась с ростом $x$ от 0.14 до 0.33 мкм. Снятие РФЭС проводились на спектрометре Escalab 250 Xi ресурсного центра «Физические методы исследования поверхности» Научного парка (НП) СПбГУ [2]. Как показали исследования РФЭС плёнок, значения концентраций электронов $n_e$ остовных уровней в плёнках с разной структурой отличаются от 29 до 50%. Кроме того, для плёнок с полосой магнитной структурой имеются отличия в $n_e$ для разных областей: 29% - Co2p, 26 % - Fe2p, 9%-O1s,19% - B1s, 11% - Si2p. Анализ параметров РФЭС говорит о том, что в плёнках с магнитной полосовой структурой соседние гранулы должны иметь квазиферромагнитное упорядочение. Измерения магнитного момента и электрического сопротивления композитных плёнок проводились в НП СПбГУ. Исследования показали, что намагниченность и проводимость плёнок с гранулярно-перколяционной структурой линейно растёт с увеличением $x$ от 0.48 до 0.56. А для плёнок, имеющих магнитную полосовую структуру с $x$ от 0.64 до 0.83, они выходят в насыщение. Такое поведение намагниченности и проводимости плёнок от $x$ свидетельствует о том, что магнитные и проводящие свойства композитных плёнок определяются не только $x$, но и сильно зависят от структуры плёнок.

**Исследования проведены за счёт гранта РНФ, проект № 25-72-20063**

Список литературы

1.Калинин Ю.Е., А.В. Ситников, В.А. Макагонов и др. // ФТТ, 2024, том 66, вып. 11. С.1941-1949. DOI: 10.61011/FTT.2024.11.59331.305
2.Лебедев М.В., Львова Т.В., Дементьев П.А. at al // Физика и техника полупроводников. 2024. Т. 58. № 11. С.636-643. doi: 10.61011/FTP.2024.11.59487.7104
3. Kotov L. N., Utkin A. A., Semyashkin I. V., Kalinin Yu. E. and Sitnikov A. V. // Bull. RAS: Physics, 2025, Vol. 89, No. 4, pp. 516–521. DOI: 10.1134/S1062873825710736

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.181

# Исследование свойств углеродных нанослоев, легированных железом

**А.С. Кравченко[1], Ю.А. Данилов[1,2], О.В. Вихрова[2], Д.А. Здоровейщев[1], Р.Н. Крюков[1,2], В.П. Лесников[2], А.В. Нежданов[1]**

*[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия, alina272002@mail.ru*

*[2]Научно-исследовательский физико-технический институт ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

Углеродные пленки представляют значительный практический интерес. Они могут применяться как активные и пассивные материалы в приборах спиновой и оптической электроники. Важной является задача разработки методов нанесения углеродных слоев на различные поверхности, а также их модифицирования.

В настоящей работе представлены результаты исследования свойств углеродных слоев (С-слоев), изготовленных методом импульсного лазерного нанесения (ИЛН) в вакууме. Для распыления мишени (пирографита) использован АИГ:Nd лазер, работающий на второй гармонике (532 нм), с длительностью импульса 10 нс, частотой повторения 15 Гц и плотностью энергии в импульсе 250 мДж. Лазерное излучение сфокусировано на мишени в пятно площадью ~1.5 мм$^2$. Образовавшийся поток лазерной плазмы попадает на подложку, которая обычно нагревается до $T_g$ = 200–500°С. Скорость нанесения С-слоев составляет ~0.2 нм/с. В качестве подложки использованы монокристаллические пластины Si, Ge или GaAs, а также структуры $SiO_2$/Si. Для изучения свойств С-слоев использованы методы комбинационного рассеяния света (КРС), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, измерения эффекта Холла.

Изготовлены и исследованы две серии образцов. Для получения первой серии использовали распыление составной мишени пирографит/Fe, в которой пирографит занимает сектор ~90° окружности, описываемой лазерным лучом на мишени. Принимая во внимание низкую скорость распыления Fe (менее 3 нм/с) и скорость вращения мишени ~ 20 об./мин, можно предположить почти однородное легирование растущего С-слоя железом. Вторая серия образцов представляла собой периодические структуры С/Fe, включающие 5 повторений С(50 с)/Fe(90 с) с покровным С-слоем (50 с).

Исследование КРС нелегированного С-слоя ($T_g$ = 500°С). позволяет идентифицировать его как пленку, состоящую из графеновых зерен. Однородно легированный железом С-слой, выращенный при 500°С, показывает узкие пики G (1601 см$^{-1}$) и D (1382 см$^{-1}$), а также хорошо разрешимые пики 2D (2754 см$^{-1}$) и D+D' (2976 см$^{-1}$). Очевидно, что легирование Fe при повышенной до 500°С температуре не привело к ухудшению структуры С-слоя (расчетные значения числа графеновых слоев в зерне равно 4–5, а размер зерна составляет 7 нм). Введение железа при нанесении периодической структуры при 400°С также не привело к ухудшению структуры по сравнению с нелегированным С-слоем. Магнитополевая зависимость коэффициента Холла для периодической структуры является нелинейной, причем выход на линейный участок (на насыщение намагниченности) происходит при полях 7–8 кЭ. Показано, что легированные Fe углеродные структуры, выращенные при температурах 400–500°С являются ферромагнитными. Механизм магнетизма в структурах С/Fe требует дальнейшего исследования в связи с перспективами их применения в системах записи информации.

Работа была выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования РФ (госзадание FSWR-2023-0052).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.182

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ МИКРОТРЕЩИН В ОБРАЗЦАХ ГОРНЫХ ПОРОД В ПРОЦЕССЕ ПОЭТАПНОГО НАГРУЖЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

**Ю.С. Кривоносов[1], А.В. Бузмаков[1], Е.Е. Дамаскинская[2], В.Л. Гиляров[2], В.Е. Асадчиков[1]**

[1] *НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,*
E-mail: Yuri.S.Krivonosov@yandex.ru

[2] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,*
E-mail: Kat.Dama@mail.ioffe.ru

В работе проведены исследования зарождения и развития микротрещин в образце горной породы под действием постепенно увеличивающейся одноосной нагрузки. В качестве материала был выбран песчаник Berea, образец имел цилиндрическую форму с диаметром 10 мм и высотой 20 мм. Для визуализации трехмерной структуры дефектов в образцах использовали лабораторную конусно-лучевую микротомографию [1] при ускоряющем напряжении 80 кВ. Пространственное разрешение микротомографа составляет 10 мкм.

Образец нагружали в три этапа, постепенно увеличивая давление сжатия. На первом этапе образец подвергался сжатию в ячейке до нагрузки 5.5 кН. На втором этапе нагрузку увеличивали до 6.7 кН. На третьем этапе образец выдерживали 24 часа под нагрузкой 6.7 кН, после чего при повторении нагрузки образец разрушился. На каждом этапе делали томографическое сканирование образца. Особенность данного эксперимента заключается в том, что при проведении томографии нагрузку с образца не снимали. Для этого была изготовлена специальная нагрузочная ячейка, устанавливаемая в томограф. Эта ячейка обеспечивает необходимое давление сжатия на образец и обладает достаточной прозрачностью в рентгеновском диапазоне, что позволяет осуществлять томографические исследования.

На основе полученных томографических данных построена трехмерная модель образовавшихся дефектов и рассчитана фрактальная размерность микротрещин. Установлено, что фрактальная размерность в начальной стадии формирования трещин составила 1.8 и увеличилась до 2.6 к моменту разрушения образца. Дополнительно, на основе модели дискретных элементов [2] были проведены численные эксперименты, направленные на исследование разрушения образцов гетерогенных материалов. Расчеты проводили с помощью открытого программного пакета MUSEN [3]. В ходе компьютерного моделирования были выявлены детали формирования фрактальных структур в зонах разрушения. Результаты компьютерного моделирования продемонстрировали согласие с данными, полученными в ходе томографических экспериментов.

*Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части проведения и обработки томографических экспериментов. Работа выполнена в рамках государственного задания ФТИ им. А.Ф. Иоффе в части постановки задачи, анализа результатов и компьютерного моделирования.*

## Литература

1. Ю. С. Кривоносов, А. В. Бузмаков, М. Ю. Григорьев, А. А. Русаков, Ю. М. Дымшиц, В. Е. Асадчиков // *Кристаллография*, 2023, Том 68, № 1, с. 160–165.
2. В.Л. Гиляров, Е.Е. Дамаскинская. ФТТ 64, 6, 676 (2022)
3. M. Dosta, V. Skorych. SoftwareX **12**, 100618 (2020)

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.183

# Исследование зернограничной сегрегации примесей в серебре методом гибридного квантово-механического/молекулярно-механического моделирования (QM/MM)

**Кузнецов Ф.К.[1], Марчий Г.В.[1], Самсонов Д.С.[1], Терещенко И.Б.[1]**
[1]*Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,* f.k.kuznetsov@mail.ioffe.ru

Сегрегация примесных атомов на границах зерен существенно влияет на механические и функциональные свойства нанокристаллических материалов. Сегрегация примеси может быть рассчитана аналитически, если известно распределение энергий сегрегации. Для расчета энергий сегрегации могут быть использованы полуэмпирические молекулярно-механические (MM) потенциалы межатомного взаимодействия, однако точность таких расчетов зависит от конкретной параметризации потенциала. Первопринципные квантово-механические (QM) расчеты же обладают большой вычислительной сложностью и на практике не могут быть применены для расчета произвольных границ зерен. Ограничения обоих методов могут быть преодолены с помощью гибридного метода QM/MM [1], который сочетает точность QM со скоростью MM расчетов.

В QM/MM методе система разделяется на две области: в наиболее важной области (вокруг атома примеси) межатомные взаимодействия рассчитываются с помощью QM методов, в оставшейся области используются MM методы, позволяющие корректно учесть дальнодействующие упругие взаимодействия [1, 2]. Такие расчеты на много порядков медленнее, чем чистое MM моделирование, однако расчет энергий сегрегации может быть ускорен с помощью методов машинного обучения [3].

Вычисленные энергии позволяют моделировать сегрегацию различных примесей в границах зерен поликристаллического серебра определить способность к подавлению роста зерен. На основании полученных первопринципных результатов оценена пригодность использования полуэмпирических EAM и UNEP[4] потенциалов для моделирования зернограничной сегрегации в серебре. Найдены перспективные примеси для подавления роста зерен.

## Литература

1. Bernstein, N. Hybrid Atomistic Simulation Methods for Materials Systems / N. Bernstein, J. R. Kermode, G Csányi // Reports Prog. Phys. — 2009. — т. 72.— С. 026501.
2. Wagih, M. Learning Grain-Boundary Segregation: From First Principles to Polycrystals / M. Wagih, C Schuh // Phys. Rev. Lett. — 2022. — т. 129, №4.— С. 046102.
3. Matson, T. P. A “bond-focused” local atomic environment representation for a high throughput solute interaction spectrum analysis / T. P. Matson, C. A. Schuh. // Acta Materialia. — 2024. — т. 278.— С. 120275.
4. Song, K. General-purpose machine-learned potential for 16 elemental metals and their alloys / K. Song, R. Zhao, J. Lui // Nature Communication. — 2024. — т. 15, №1.— С. 10208.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.184

# Прямое определение структуры сверхпроводящего порядка ферроселенидов натрия, калия и рубидия с изовалентным замещением

**Кузьмичева Т. Е.[1], Кузьмичев С. А.[2,1], Ильина А. Д.[1], Никитченков И. А.[1,2], Шилов А. И.[1], Рахманов Е. О.[3,1], Морозов И. В.[3]**

*[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия,*
*[2]Физический факультет, МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*
*[3] Химический факультет, МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*
**kuzmichevate@lebedev.ru*

Селениды $A_xFe_{2-y}Se_2$ (т.н. семейство 122-Se) представляют собой естественные композиты, содержащие кристаллы антиферромагнитной диэлектрической фазы $A_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$, на границах которых растут кристаллиты сверхпроводящей (СП) фазы $A_{0.3}Fe_2Se_2$. Различный тип изовалентного замещения по-разному влияет на $T_c$: даже малое замещение щелочного металла вызывает скачкообразное изменение $T_c$ [1], при этом при замещении (Se,S) $T_c$ плавно снижается, образуя «полуколокол» [2]. Из-за естественного фазового расслоения и быстрой деградации свойств на открытом воздухе (в течение нескольких минут) селениды $A_xFe_{2-y}Se_2$ по сей день остаются наименее изученными среди железосодержащих сверхпроводников.

Методом «раствор в расплаве» мы вырастили крупные (до 8–10 мм) кристаллы $K_{0.8}Fe_{1.7}(Se_{0.73}S_{0.27})_2$, $(K_{0.8}Na_{0.2})_{0.8}Fe_{1.7}Se_2$ и $Na_{0.2}K_{0.33}Rb_{0.26}Fe_{1.7}Se_2$ с тремя типами изовалентного замещения и диапазоном $T_c \approx 25$–34 К [3,4]. С помощью техники планарного «break-junction» [5] в образцах были созданы SnS-контакты, в которых наблюдался эффект многократных андреевских отражений и туннельные ScS-структуры (*S* — сверхпроводник, *n* — тонкий нормальный металл, *c* — сужение).

В исследованных селенидах тремя способами однозначно показана одношелевая сверхпроводимость, что представляется довольно необычным по сравнению с родственными СП-ферропниктидами, в которых ниже $T_c$ сосуществуют несколько СП-конденсатов. Напрямую определена амплитуда и характеристическое отношение СП-щели $2\Delta(0)/k_BT_c \approx 4.1$–$4.6 > 3.5$ (что указывает на сильную связь в куперовской паре), а также БКШ-образная температурная зависимость $\Delta(T)$. Показана объемная природа наблюдаемой СП-щели, воспроизводимость ее амплитуды и независимость от геометрических параметров SnS-контакта.

Полученные температурные зависимости избыточного андреевского тока $I_{exc}(T) \equiv I(T, eV) - I(T_c, eV) \propto \Delta(T)$ при $eV >> 2\Delta$ и сверхтока $I_c(T)$ также хорошо описываются однозонной моделью с использованием экспериментального значения $2\Delta(0)/k_BT_c$.

Полученное $2\Delta(0)/k_BT_c$ практически не меняется в диапазоне $T_c \approx 25$–34 К, что говорит о единой эволюции СП-свойств исследованных селенидов, т.е. реализации единого механизма куперовского спаривания ниже $T_c$.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

## Литература

1. A. Krzton-Maziopa [et al.]. // J. Phys. Condens. Mat. – 2016. – V. 28.– P. 293002.
2. P. Mangelis [et al.] // Phys. Rev. B. – 2019. – V. 100. – P. 094108.
3. T.E. Kuzmicheva [et al.] // J. Supercond. Nov. Magn. – 2025. – V. 38. – P. 120.
4. Т.Е. Кузьмичева [et al.] // Письма в ЖЭТФ. – 2025. – V. 121. – P. 120.
5. С.А. Кузьмичев, Т.Е. Кузьмичева // Физ. Низк. Темп. – 2016. – V. 42. – P. 1284.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.185

# Экспериментальное определение роли спиновых флуктуаций в механизме сверхпроводимости пниктидов Na(Fe,Co)As

**С.А. Кузьмичев[1,2*], Т.Е. Кузьмичева[2], А.В. Муратов[2], С.Ю. Гаврилкин[2], И.В. Морозов[3], А.И. Шилов[2], Е.О. Рахманов[3,2]**

[1]*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

[3] *Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*kuzmichev@lt.phys.msu.ru

Методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений [1] на планарных контактах, полученных техникой «break-junction» [2], исследована структура сверхпроводящего (СП) параметра порядка монокристаллов пниктидов $NaFe_{1-x}Co_xAs$ (семейство 111) недо- и передопированных составов с $x$ = 0.02–0.05 и диапазоном критических температур $T_c \approx$ 18–21 К (также см. миниобзор [3]). Ниже $T_c$ в объеме образцов обнаружено сосуществование двух СП-конденсатов. Показана анизотропия в $k$-пространстве большой СП-щели $\Delta_L$ (расширенный $s$-волновой тип симметрии без точек нулей) и напрямую определены ее экстремумы: минимальная $\Delta_L^{in}$ и максимальная $\Delta_L^{out}$ энергии связи куперовских пар в зависимости от направления импульса в $k_xk_y$-плоскости. Для малой СП-щели анизотропия не наблюдалась, и определено ее характеристические отношения $2\Delta_S(0)/k_BT_c \approx$ 1.5–2.0, оказывающееся меньше БКШ-предела слабой связи 3.53.

Напрямую измерены температурные зависимости $\Delta_i(T)$, показано умеренное межзонное взаимодействие. Зависимости экстремумов большой СП-щели $\Delta_L^{in}(T)$ и $\Delta_L^{oit}(T)$ имеют схожее температурное поведение. Малая СП-щель $\Delta_S(T)$ закрывается с температурой чуть быстрее.

Нами наблюдалось заметное изменение степени анизотропии большой СП-щели с допированием [4,5]. Характеристическое отношение $2\Delta_L^{out}(0)/k_BT_c \approx 5.9$ оставалось примерно постоянным в исследованном диапазоне электронного допирования $x$ = 0.02–0.05, при этом характеристическое отношение для СП-параметра порядка $\Delta_L^{in}$ примерно линейно увеличивалось от $2\Delta_L^{in}(0)/k_BT_c \approx 3.6$ в недодопированных составах до $2\Delta_L^{in}(0)/k_BT_c \approx 4.4$ в передопированных составах [4], что соответствовало уменьшению анизотропии от в среднем 40% до 25%. Линейная экстраполяция полученной зависимости $A_L(x)$ предсказывает изотропизацию большой СП-щели в сильно передопированных составах $NaFe_{0.91}Co_{0.09}As$ с $T_c \approx 8$ К и, напротив, появление нулей углового распределения $\Delta_L(\theta)$ вблизи стехиометрического состава NaFeAs [5].

Наблюдаемое усиление анизотропии СП-щели в $k$-пространстве в недодопированных составах при приближении к антиферромагнитной фазе указывает на сильное влияние спиновых флуктуаций на свойства СП-подсистемы пниктидов $NaFe_{1-x}Co_xAs$, в частности, на важность учета спин-флуктуационного канала в процессе образования куперовских пар. Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

## Литература

1. Kümmel R., Gunsenheimer U., Nikolsky R. // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 42. – P. 3992.
2. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // ФНТ. – 2016. – № 11. – С. 1284–1310.
3. T.E. Kuzmicheva, S.A. Kuzmichev // JETP Lett. – 2021. – V. 114. – P. 630.
4. S. Kuzmichev, A. Muratov, S. Gavrilkin, I. Morozov [и др.]. // Eur. Phys. J. Plus. – 2024. – V. 139. – 1. – P. 74.
5. S.A. Kuzmichev, I.V. Morozov, A.I. Shilov, Ye.O. Rakhmanov, T.E. Kuzmicheva. // JETP Lett. – 2024. – V. 120. – 2. – P. 125.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.186

# Исследование спектров импеданса структур $[(CoFeB+SiO_2)/ZrO_2]_{50}$/ситалл в диапазоне частот 10 Hz−10 MHz и в интервале температур 120−420 K

**Ласёк М.П.[1], Котов Л.Н.[1], Якимов М.В.[1], Ситников А.В.[2], Калинин Ю.Е.[2]**
*[1]Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия*
*[2]Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*
e-mail: mplasek@yandex.ru

Для разработки миниатюрных устройств с контролируемыми высокочастотными свойствами представляют значительный научный интерес исследования электрических высокочастотных свойств структур: магнитный композит/диэлектрик/ситалл [1, 2]. В работе исследовались многослойные плёнки $[(CoFeB+SiO_2)/ZnO]_{50}$, сформированные на подложках из ситалла методом ионно-лучевого напыления в атмосфере аргона [2]. Каждая плёнка состояла из 50 последовательно нанесенных пар композитного слоя ($CoFeB+SiO_2$) и слоёв ZnO. Толщина нанослоев составляла от 2 до 4 нм. Исследования температурных и частотных зависимостей импеданса ситалла с многослойным покрытием проводились методом импеданс спектроскопии в диапазоне частот от 10 до $10^7$ Гц и в интервале температур от 120 до 420 К. Образцы устанавливались между электродами: один электрод прижимался к поверхности многослойного покрытия, а второй к поверхности ситалла. Эксперименты показали, что спектры импеданса исследуемых структур преимущественно обладают ёмкостным характером. Экспериментально обнаружено влияние многослойного покрытия на спектры импеданса структуры. Была предложена эквивалентная электрическая схема для структур, в которых композитные слои имеют концентрацию металлической фазы до порога перколяции. В схеме композитные слои представлены специальным искусственно частотно-зависимым элементом, обозначенным как CPE - элементом постоянной фазы с параллельно подключенной ёмкостью, импеданс которого определяется по формуле $1/Q(i\omega)^n$, где Q- коэффициент, i – мнимая единица, ω - циклическая частота, n – показатель степени, который формально характеризует неоднородную структуру. Этот специфический элемент учитывает неоднородное распределение металлических частиц по объему диэлектрической матрицы, может учитывать индуктивные свойства. Слои ZnO представлены конденсатором, с параллельно включённым резистором, учитывающий ток утечки. Ситалл – почти идеальный конденсатор. Проведён численный расчёт импеданса эквивалентной схемы структуры. Рассчитанные параметры CPE ($n\approx0.23$) соответствуют разорванной металлической сетке с доминированием туннельного механизма проводимости [3].

**Исследования выполнены за счёт гранта РНФ, проект №25-72-20063**

**Список литературы**

1. Ю.Е. Калинин, А.В. Ситников, В.А. Макагонов, В.А. Фошин, М.Н. Волочаев Прыжковая проводимость в многослойных наноструктурах {[(Co40Fe40B20)34(SiO2)66]/[ZnO]}n // Физика твердого тела, 2024, том 66, вып. 11. С.1941-1949. DOI: 10.61011/FTT.2024.11.59331.305
2. Котов Л.Н., Уткин А.А., Калинин Ю.Е., Ситников А.В., Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика, 15(4), 85-92 (2023)
3. J. Bisquert, Phys. Chem. B, **106**, 325 (2002). DOI: 10.1021/jp011941g

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.187

# ДИХАЛЬКОГЕНИДЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ

**Латыпов Р. М.[1], Бескачко В. П.**

*Южно-Уральский государственный университет* (национальный исследовательский университет), *Челябинск, Россия,* [1]latypovrm@susu.ru

Двумерные слоистые (ван-дер-ваальсовы) материалы активно исследуются в связи с перспективой использования в устройствах квантовой информатики и наноэлектроники. Их структура и свойства позволяют непосредственно интегрировать такие материалы с периферийными компонентами интегральных схем – резонаторами и волноводами, а также создавать на их основе источники одиночных фотонов (ОФ) – критически важные устройства квантовой фотоники. Способность к генерации ОФ возникает в данных материалах из-за локальных напряжений и/или дефектов решетки, точная идентификация которых является пока предметом исследований [1], проводимых в том числе и методами компьютерного моделирования. В частности, в работе [2] были исследованы размерные эффекты в гексагональном нитриде бора (h-BN), выявившие роль взаимодействия между дефектами в формировании дискретной энергетической структуры в запрещенной зоне h-BN. Эта зависимость дает дополнительную возможность для настройки параметров источника ОФ. Однако пределы, в которых возможна эта настройка, зависят от природы материалов. В связи с этим целесообразно рассмотреть и другие слоистые материалы, в частности дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), где способность к генерации ОФ была уже обнаружена экспериментально, как, например в $WS_2$, $MoS_2$ и $MoSe_2$ [3-5].

В настоящей работе моделирование монослоев упомянутых выше соединений проводилось в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в пакете VASP, в приближении обобщённых градиентов (GGA) для обменно-корреляционного функционала. Энергия отсечки базиса плоских волн составляла 600 эВ, а обратное пространство было покрыто сеткой 10×10 ×1 из *k*-точек. Выполненные таким способом расчеты свойств совершенных (бездефектных) материалов согласуются с опытными данными в пределах ~1% для структурных параметров и ~9% для ширины запрещенной зоны, что для последнего является хорошим результатом для данного обменно-корреляционного функционала со стандартной погрешностью в 40% [6]. Отметим, что данные материалы являются прямозонными полупроводниками, что также воспроизводится нашими расчетами. Хорошее согласие отмеченных характеристик бездефектных материалов литературными данными позволило нам изучить соответствующие им дефектные структуры. В частности, они были исследованы на предмет их равновесных конфигураций, энергии образования дефектов, зонной структуры и зависимости последней от расстояния между дефектами.

## Литература

1. Turunen M. et al. // Nature Reviews Physics. – 2022. – V. 4. – №. 4. – P. 219-236.
2. Latypov R. M., Sozykin S. A., Beskachko V. P. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – V. 18. – №. 1. – P. 63-68.
3. Palacios-Berraquero C. et al. // Nature Communications. – 2016. – V. 7. – №. 1. – P. 12978.
4. Klein J. et al. // ACS Photonics. – 2021. – V. 8. – №. 2. – P. 669-677.
5. Yu L. et al. // Nano Letters. – 2021. – V. 21. – №. 6. – P. 2376-2381.
6. Borlido P. et al. // Journal of chemical theory and computation. – 2019. – V. 15. – №. 9. – P. 5069-5079.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.188

# ПУТИ СНИЖЕНИЯ ТЕРМОДЕФОРМАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СВАРИВАЕМЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПРИ ДИФФУЗИОННОЙ СВАРКЕ

**Люшинский А.В.**

*ООО «Авиационно-космические технологии»*
*Россия, г. Москва, Сколково* E-mail: nilsvarka@yandex.ru

Технология диффузионной сварки металлических материалов в вакууме обладает рядом существенных недостатков [1], в частности, длительным временем процесса образования соединения: цикл, включающий вакуумирование свариваемых деталей, нагрев до температуры сварки, выдержку при этой температуре и охлаждение до комнатной температуры, занимает до 3-4 часов. Кроме того, в большинстве случаев для обеспечения получения равнопрочного соединения приходится пластически деформировать соединяемые детали, а после сварки проводить дополнительную их механическую обработку.

Для исключения вышеуказанных недостатков предложены два метода снижения параметров режима диффузионной сварки – температуры, сварочного давления и времени выдержки: 1-й = применение промежуточных слоев на основе ультрадисперсного порошка (УДП) никеля; 2-й = предварительная обработка поверхностей, подлежащих диффузионной сварке, лазерным излучением [2,3].

Образование соединения через порошковый промежуточный слой происходит за счет спекания порошковых частиц между собой и их припекания к поверхности компактного материала. Исследования показали, что чем меньше размер частиц порошка и выше их удельная поверхность, тем активнее этот порошок спекается при более низких температурах. Минимально приложенное усилие при спекании интенсифицирует процессы спекания и припекания. Установлено, что наибольшей активностью обладает УДП никеля, получаемый термическим разложением формиата никеля $Ni(COOH)_2 \cdot 2H_2O$. Дисперсность его основной фракции < 0,1 мкм; удельная поверхность > 17 $м^2/г$.

Объяснение, почему интенсифицируется развитие физического контакта и активация объемного взаимодействия на микровыступах, сформированных лазерным излучением, заключается в следующем. Лазерное излучение создает большие градиенты температур (быстрый нагрев тонкого поверхностного слоя металла до температур плавления и не менее быстрое охлаждение до комнатной температуры), что способствует образованию новых наноструктур с повышенной дефектностью. В кристаллической решетке повышается уровень напряжений, увеличивается плотность дислокаций. Происходит измельчение исходного зерна, тем самым облегчается пластическая деформация в ультрамелкозернистом материале. Коэффициент диффузии по границам зерен на порядки превышает соответствующие значения в объеме зерен. Все это в итоге приводит к активации объемного взаимодействия в диффузионной зоне.

1.Казаков Н.Ф. Диффузионная сварка материалов. М.: Машиностроение, 1976, 312с.
2. Люшинский А.В. Диффузионная сварка разнородных материалов. М.: ИЦ «Академия», 2006, 208 с.
3.Люшинский А.В. Влияние лазерной обработки свариваемых поверхностей на формирование диффузионно-сварных соединений. Сварочное производство, 2022, №4, с.27-33.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.189

# ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В $CdGa_2Se_4$ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР 4-300К

**Мамедова И. А.[1], Максимов А. А.[2], Тартаковский И. И.[2], Абдуллаев Н. А.[1,3]**

[1] *Институт физики МНО Азербайджана, Баку*, irada_mamedova@yahoo.com

[2] *Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия,* maksimov@issp.ac.ru

[3] *Бакинский Государственный Университет, Баку*, abnadir@mail.ru

Монокристаллы $CdGa_2Se_4$ с пространственной группой $I\bar{4}$ относятся к группе кристаллов $A^2B^3{}_2C^6{}_4$, являющихся кристаллохимическими аналогами соединений, кристаллизующихся в структуре сфалерита и халькопирита. Исследования показали, что этим кристаллам присущи особые свойства, такие как оптическая анизотропия, двулучепреломление, значительные величины коэффициентов нелинейной восприимчивости, высокая фоточувствительность, яркая люминесценция, что предопределяет их в роли перспективных материаллов для оптоэлектроники и нелинейной оптики [1]. В последнее время широкозонные полупроводники $CdGa_2Se_4$ позиционируются ещё и как материалы для солнечных батарей [2].

В работе выполнены подробные температурные исследования спектров комбинационного рассеяния в кристаллах $CdGa_2Se_4$ в широкой области температур 4.2-300К. На рисунке 1a приведены спектры комбинационного рассеяния света кристаллов $CdGa_2Se_4$ при температурах 4.2, 90, 200 и 300К Отдельно на рис.1b приведено положение и уширение спектральной линии $A_3$ [3].

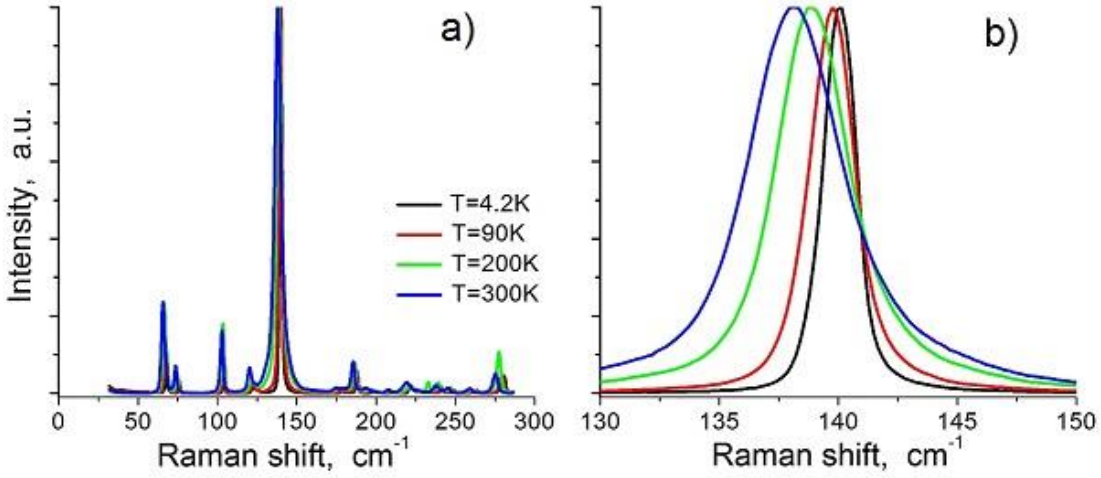



Рис.1. Спектры комбинационного рассеяния света кристаллов $CdGa_2Se_4$ при температурах 4.2, 90, 200 и 300К.

Зависимость частот фононов от температуры обсловлена фонон-фононным взаимодействием и деформацией кристаллической решётки вследствие теплового расширения. Зависимость полуширины спектральной линии (FWHM) от температуры (рис.1b) хорошо описывается с учётом трёхфононных процессов взаимодействия.

## Литература

1. Reshak A.H., Khan S.A. // J. All. Comp. – 2014. – Vol. 595**.** - P. 125–130.
2. Kumar P., Sahariya J., Soni A., Bhamu K.C. // Mater. Sci. For. – 2017. – Vol. 900. - P. 69-73.
3. Jahangirli Z.A., Kerimova T.G., Abdullayev N.A., Mamedova I.A. and Mamedov N.T. // Semiconductors. – 2017. - Vol. 51. - № 5. P. 556–558.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.190

# Динамическая поляризация спинов носителей заряда в полупроводниковых структурах пониженной размерности

**Манцевич В. Н.[1], Маслова Н. С.[1], Аверкиев Н.С.[2], Арсеев П.И.[3]**
*[1]МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия, vmantsev@gmail.com*
*[2]ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
*[3]ФИАН им. П.Н. Лебедева, Москва, Россия*

Задача формирования спиновой поляризации носителей заряда традиционно является привлекательной как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения [1]. Современные эксперименты продемонстрировали возможность создания не только статической, но и динамической спиновой поляризации, которая возможна в отсутствие внешнего магнитного поля, что вызывает значительный интерес с прикладной точки зрения [2]. В докладе предполагается обсудить нетривиальную кинетику спиновой поляризации в полупроводниковых гетероструктурах с резонансно-туннельной связью при наличии обменного расщепления и кулоновских корреляций [3]. Будет рассмотрен механизм создания динамической спиновой поляризации и циркулярно поляризованной фотолюминесценции в гибридных полупроводниковых гетероструктурах магнитный слой – квантовая яма. С прикладной точки зрения особый интерес представляет возможность управление циркулярной поляризацией фотолюминесценции в таких структурах, причем характерный временной масштаб изменения поляризации определяется скоростью туннелирования электронов, значительно превышающей скорость излучательной рекомбинации. Это создает возможность быстрого управления оптической поляризацией, используемой для передачи информации [4]. Также будет рассмотрена динамическая спиновая поляризация в полупроводниковых гетероструктурах, возникающая за счет отщепленных дискретных уровней, формирующихся при туннельной гибридизации локализованных магнитных центров с континуумом двумерных состояний в квантовой яме. Отщепленные состояния являются спин-поляризованными, а их ключевой особенностью является экспоненциальная чувствительность энергии уровня к параметру туннельной гибридизации, что позволяет рассматривать фотолюминесцентный отклик этих состояний чрезвычайно привлекательным с практической точки зрения [5]. В докладе будет обсуждена возможность сверхбыстрого управления величиной и знаком спиновой поляризации и циркулярной поляризации фотолюминесценции излучения из квантовой ямы за счет изменения параметров лазерного излучения оптической накачки, а также за счет модификации процессов туннелирования при изменении управляющим напряжением параметров туннельного барьера.

## Литература

1. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004)
2. V. Korenev, I. Akimov, S. Zaitsev, et. al., Nat. Commun. 3, 959 (2012).
3. N.S Maslova, V.N. Mantsevich, I.V. Rozhansky et. al., Phys. Rev.B 97, 195445 (2018)
4. I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova et. al., JMMM 565, 170303 (2023)
5. I. V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, N.S Maslova et. al., Phys. Rev. B 101, 045305 (2020)

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.191

# Исследование механических свойств и кинетики распада твёрдого раствора в алюминиевых сплавах системы Al-Mn-Cu-Zr-Er

**Марданшина Т.М.[1], Яковцева О. А.[1], Рыжакова О. М. [1].**

*[1]Университет МИСИС, Россия, Москва*

*t.mardanshina@mail.ru*

Современная промышленность предъявляет высокие требования к жаропрочности алюминиевых сплавов, которые, несмотря на хорошие прочностные характеристики при комнатной температуре, демонстрируют недостаточную устойчивость при повышенных температурах. В связи с чем ученые всего мира проводят исследования направленые на повышения свойств алюминиевых сплавов. Стоит задача разработки новых композиций сплавов, в работе исследуются сплавы системы Al-Mn-Cu легированные переходными металлами. В работе рассмотренно формирование структуры с дисперсными и квазикристаллическими фазами в сплавах Al-Mn-Cu-Zr-Er, проанализирован распад пересыщенного твёрдого раствора и проведена оценка их влияние на механические свойства материалов.

В качестве объектов исследования были выбраны сплавы системы Al-Mn-Cu с добавками Zr, Ti, Er, Be которые были получены со скоростью охлаждения при литье в медную изложницу порядка 100 К/с. Выбраны сплавы составов Al-Mn-Cu-Er-Be, Al-Mn-Cu-Zr-Er-Be, Al-Mn-Cu-Zr-Ti-Er-Be. Для сравнения структурных изменений при отжиге в аналогичных условиях получены слитки Al и Al-0.7%Zr. Литые и прокатанные при комнатной температуре с 67% обжатием образцы подвергали отжигу для анализа процессов распада пересыщенного переходными элементами твердого раствора и кинетики рекристаллизации.

Микроструктурный анализ литых, прокатанных и отожженных образцов сплавов выполнен с использованием оптического микроскопа Zeiss в режиме поляризованного света.

Исследование кинетики распада пересыщенного алюминиевого твердого раствора проводили, анализируя изменения твердости в температурном диапазоне 300-400°С при продолжительности отжига до 100 часов. В ходе эксперимента отслеживали динамику изменения состава твердого раствора, процессы растворения неравновесных фаз, образовавшихся при кристаллизации, и последующего выделения дисперсных частиц.

Выявлено, что отжиг приводит к росту твердости в сплавах после ~100ч при 300 °С и 16–32 ч при 350–400 °С в виду формирования частиц дисперсоидов алюминидов переходных металлов (I-фаза, $Al_6Mn$, T-$Al_{20}Cu_2Mn_3$, $Al_3ErZr$). Предварительная деформация обеспечивает максимальные значения твердости при отжиге ввиду ускорения распада пересыщенного твердого раствора с формированием преимущественно нерекристаллизованной зеренной структуры. Рекристаллизация происходит только в сплаве сравнения - чистом алюминии.

Механические свойства сплавов оценены на образцах на одноосное растяжение при комнатной температуре и скорости $5 \cdot 10^{-3} с^{-1}$.

Максимальные значения прочностных характеристик с пределом текучести 300–310 МПа и пределом прочности ~340 МПа получены в сплавах Al-Mn-Cu-Zr-Er-Be с добавкой циркония и без после отжига деформированных образцов при 350 °С в течение 4 часов.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00791, https://rscf.ru/project/ 23-19-00791/*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.192

# Атомистическое моделирование сегрегации и преципитации никеля в поликристаллическом серебре

**Марчий Г. В.[1], Самсонов Д. С.[1], Кузнецов Ф. К.[1]**
[1]*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия, georgiy.marchiy@mail.ioffe.ru*

Нанокристаллические материалы обладают уникальными функциональными свойствами, но их применение часто осложняется неустойчивостью к росту зерен. Аналогичные проблемы возникают с поликристаллическими пленками серебра, которые часто используются в качестве основы для отражающих покрытий в случаях, когда необходим высокий показатель отражения в широком диапазоне длин волн. Серебро легкоплавкий металл, что затрудняет использование серебряных покрытий в системах, эксплуатируемых даже при умеренно высоких температурах 200-300 °C. Повышение температуры приводит к быстрому росту зерен, провоцирующему, с одной стороны, ухудшение отражения за счёт увеличения шероховатости и образования пустот. С другой стороны, рост зерен приводит к возникновению напряжений, которые могут негативно сказываться на адгезии пленки, а также на целостности барьерного покрытия, применяемого для защиты серебра от атмосферной коррозии.

Нами была разработана модель, показывающая, что сегрегация никеля в границы зерен серебра способна подавить рост зерен [1]. Однако сегрегированный никель находится в метастабильном состоянии: при повышенных температурах он может покидать границы зерен и образовывать кристаллические преципитаты [2]. Преципитацию можно подавить с помощью введения дополнительной примеси. Моделирование преципитации в системах с несколькими примесями может быть выполнено с помощью атомистических методов, таких как молекулярная динамики (МД) и Монте-Карло (МК). Для таких расчетов необходимы полуэмпирические потенциалы межатомного взаимодействия. Металлические системы часто хорошо описываются с помощью метода погруженного атома (EAM потенциала [3]). Однако на данный момент существует лишь ограниченное число таких потенциалов для систем с несколькими примесями, а разработка новых потенциалов является трудоемкой задачей, а значит не рассматривается нами для поиска подходящих примесей. В последнее время активно развивается новый класс потенциалов, основанный на машинном обучении. Одним из таких потенциалов является универсальный потенциал UNEP [4] для 16 металлических элементов, включая Ag и Ni. К сожалению, производительность МК расчетов с этим потенциалом очень мала. В данной работе мы исследуем способы увеличения производительности МК расчетов, а также обсуждаем возможные комбинированные МД/МК схемы моделирования преципитации.

## Литература

1. G. Marchiy, D. Samsonov, and E. Mukhin. // SSRN. - 2024.
2. H. G. Zolla and F. Spaepen. //*Acta Materialia. - 1999*. - vol. 47. - no. 8. - pp. 2391–2400.
3. Z. Pan, V. Borovikov, M. I. Mendelev, and F. Sansoz. // *Modelling Simul Mater. Sci. Eng. - 2018.* - vol. 26. - no. 7. - p. 075004.
4. K. Song *et al. // Nature Communications. - 2024.* - vol. 15. - no. 1. - p. 10208.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.193

# ОБРАЗОВАНИЕ ТЕРМОСТАБИЛЬНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРЕМНИИ ПРИ СОПРЯЖЕННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ТЕМПЕРАТУРЫ И ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОНАМИ

**Махкамов Ш.[1], Ташметов М.Ю.[1], Эрдонов М.Н.[1], Тиллаев Т.С.[1], Холмедов Х.М.[2], Сабиров С.С.[2]**

*[1]Институт ядерной физики АН РУз, г.Ташкент, Узбекистан, e-mail: makhkamov@inp.uz*
*[2]Ташкентский университет информационных технологий имени аль-Хорезми, г. Ташкент, Узбекистан*

Модификация электрофизических параметров полупроводниковых материалов и характеристик приборов на их основе путём введения в базовую область кристалла радиационных дефектных (РД) состояний является одним из управляемых способов, применяемых в технологических целях. Однако образованные РД центры проявляют низкую термостабильность и определяются типом и составом формируемого РД комплекса. Термостабильность РД центров можно изменить, регулируя температуру, режим облучения и состав образованных дефектных комплексов.

Целью данной работы является изучение эффективности формирования термостабильных РД комплексов в кремниевых диодных структурах в зависимости от температуры электронного облучения.

В экспериментах использовались диффузионные $p^+$-n-$n^+$ структуры, изготовленные из n-Si с концентрацией фосфора $2\cdot10^{15}$ $см^{-3}$ и содержанием кислорода $\sim4\cdot10^{17}$ $см^{-3}$. Облучение электронами с энергией ~4 МэВ проводилось флюенсом $5\cdot10^{16}$ $см^{-2}$ в интервале температур от 250 ℃ до 500℃. Концентрацию и энергию залегании глубоких РД центров контролировалось методом ёмкостной спектроскопии (DLTS). Анализ спектров DLTS образцов, облученных без нагрева, показало, что в них формируются известные РД центры с участием вакансий и примесей энергией ионизации $E_c$-0,17 эВ (V+O), $E_c$-0,23 эВ и $E_c$-0,39 эВ ($V_2$) а также $E_c$-0,44 (V+P). Повышение температуры облучения до 325℃ приводит к образованию РД центра с уровнем $E_c$-0,20 эВ, обусловленный комплексом $V_2O_2$, эффективность введения которого достигает максимума при $T_{обл}$=375℃. Установлено, что температура полного распада -V+O РД центра, и температура максимума, образованного РД комплекса $V_2O_2$ практически совпадают, что позволяет предположить, начиная с $T_{обл}$ ≥325℃ происходит трансформация уровня $E_c$-0,17 эВ по схеме $-VO+VO=V_2O_2$ в комплекс. Дальнейшее повышение температуры облучения от 375℃ до 450℃ приводит к понижению эффективности формированию РД центра с уровнем $E_c$-0,20 эВ с последующим распадом при $T_{обл}$≥475℃ комплекса $V_2O_2$. Определено, что в области температур облучения от 350℃ до 500℃ формируется еще один дополнительный РД центр с уровнем $E_c$-0,13 эВ обусловленный комплексом $V_3O_2$, концентрация которого возрастает с повышением температуры облучения и доходит до максимума при $T_{обл}$ ≥475℃, проявляя термостабильность до температуры 500℃. Учитывая, что начальная температура образования РД центра для комплекса с уровнем $E_c$-0,13 эВ совпадает с температурой отжига дивакансий $–V_2$ (РД центры $E_c$-0,23 эВ и $E_c$-0,39 эВ), можно предположить, что формированный РД центр с уровнем $E_c$-0,13 эВ, по всей вероятности, связан с образованием вакансионно-кислородного комплекса по схеме $-V_3O+O_i=V_3O_2$ с участием межузельного кислорода и подвижных при температуре облучения трёх вакансионо-кислородного комплекса. Предложен механизм формирования термостабильных РД комплексов $V_2O_2$ и $V_3O_2$ в кремнии при терморадиационном воздействии, и влияние их на рекомбинационные характеристики кремниевих диодов.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.194

# Наносекундная динамика разрушения твердых гетерогенных материалов и обоснование некоторых методов контроля прочности на основе регистрации эмиссионных явлений

**Х. Ф. Махмудов**

*ФТИ им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26*

**e-mail: h.machmoudov@mail.ioffe.ru*

В работе представлены усовершенствованные методы диагностики и анализа остаточного ресурса механизмов и оборудования с помощью алгоритмов акустоэмиссионных измерений. Также была создана лабораторная установка, на которой проводились прямые исследования триггерного эффекта при ударном разрушении в наносекундном временном диапазоне. В исследовании усовершенствована и теоретически обоснована микромеханическая модель акустоэмиссии. Кроме того, продемонстрирована возможность применения результатов лабораторных экспериментов в реальных условиях, что открывает перспективы для практического использования. Результаты исследования позволяют снизить погрешность в расчётах и более точно определить запас прочности и стабильность конструкций под воздействием внешних силовых нагрузок. Было установлено, что частотный диапазон влияет на энергетический диапазон разрушения, который необходимо контролировать. С другой стороны, учитывая сильную зависимость коэффициента затухания от частоты, частотный диапазон должен соответствовать характерным размерам объекта контроля. Проведён анализ возможности регистрации сигналов акустической эмиссии на фоне шумов. Были определены диапазоны частот и величины сигналов акустической эмиссии и шумов, что позволило оценить вероятность их выделения на общем фоне.

Проводимая акустико-эмиссионная диагностика базируется на регистрации упругого энерговыделения при разрушении [1]. Использование для этих целей метода акустической эмиссии, работающего в килогерцовом диапазоне, осложнено наличием техногенных акустических шумов, всегда присутствующих на промышленном предприятии. Амплитудно-частотные параметры технологических шумов на действующем предприятии и «полезных» сигналов сопоставимы, что делает их селекцию сложной задачей. В нашем случае общего решения, видимо, не существует. и требуется тщательный анализ фонового акустического режима каждого конкретного предприятия и оборудования [2].

Эксперименты и анализ остаточного ресурса механизмов и оборудования с использованием алгоритмов акустоэмиссионных измерений, а также создание лабораторной установки и прямые исследования триггерного эффекта при ударном разрушении в наносекундном временном диапазоне открывают новые возможности для учета таких параметров, как напряжения и триггерный эффект, при проектировании, расчётах и особенно в процессе эксплуатации сооружений.

1. *Щербаков И. П., Махмудов Х. Ф, Чмель, А. Е.* Инициация процесса накопления микротрещин в граните при сочетании статического и ударного нагружения. Триггерный эффект. ЖТФ, т.*94, 1, 2024, с. 48 – 52. https://doi.org/10.61011/JTF.2024.01.56900.86-23*4.
1. *Махмудов Х. Ф., Афанасьев П. И.* Фильтрация техногенных помех при акустико-эмиссионном мониторинге // Горная промышленность. 2023. (S1):142–149. https://doi.org/10.30686/1609-9192-2023-S1-142-149.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.195

# Моделирование эффекта частичного восстановления порядка в сплаве $Fe_3Al$ в процессе мегапластической деформации в рамках нестационарной эволюционной термодинамики

**Метлов Л.С.[1], Глезер А.М.[2]**
[1]*ФГБНУ ДОНФТИ, Донецк, Россия, lsmet@donfti.ru*
[2]*МИСиС, Москва, Россия*

В работе [1] после разрушения дальнего порядка в версии D03 на ранних стадиях мегапластической деформации сплава $Fe_3Al$ наблюдался принципиально новый эффект частичного восстановления порядка в версии B2/на более поздних стадиях. В рамках простейшей модели выражение свободной энергии можно принять в виде

$$f = \frac{1}{2}a_1(S_1)^2 + \frac{1}{4}c_1(S_1)^4 + \frac{1}{2}a_2(S_2)^2 + \frac{1}{4}c_2(S_2)^4 + gS_1S_2 \ , \qquad (1)$$

где $a_i$, $c_i$ (i – 1, 2), $g$ – феноменологические постоянные теории, $S_i$ – концентрационные параметры порядка [1]. Все постоянные теории могут зависеть от температуры и напряжения. Принципиальное значение имеет зависимость от температуры и напряжения параметров $a_i$. Выберем ее в явном виде

$$a_i = a_{0i}\left(\frac{T}{T_i} - 1 + \alpha_i\sigma\right), \qquad .(2)$$

где $a_{0i}$, $\alpha_i$ – новые постоянные теории, T – температура, $T_1$ – критическая температура перехода беспорядок – частичный беспорядок (в фазу B2), $T_2$ – критическая температура перехода частичный беспорядок – порядок (в фазу D03), σ – характерная компонента внешнего напряжения, развиваемого при мегапластической деформации.

Если в начальный момент времени система при $\sigma = 0$ находилась в области устойчивого существования фазы D03, то в момент включения большого внешнего напряжения на уровне предела пластического течения эффективные критические температуры резко понизятся, и материал может оказаться в области устойчивости неупорядоченной фазы. Параметр порядка при этом резко обратиться в нуль, что и наблюдается на первой стадии мегапластической деформации в [1].

Следующие стадии деформирования уместно описывать в рамках нестационарной эволюционной термодинамики (НЭТ) [2, 3]. В основе метода лежит потенциал внутренней энергии, который для данной задачи можно записать в виде

$$u = \frac{1}{2}a_1^*(S_1)^2 + \frac{1}{4}c_1(S_1)^4 + \frac{1}{2}a_2^*(S_2)^2 + \frac{1}{4}c_2(S_2)^4 + gS_1S_2 \ , \qquad (3)$$

где все коэффициенты не зависят явно от температуры.

Эволюционные уравнения типа Ландау-Халатникова стремятся к стационарным не равным нулю значениям параметров порядка, что обеспечивает частичное восстановление порядка в формате B2, что и наблюдается на второй стадии мегапластической деформации в [1].

## Литература

1. Glezer M.A. at al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2018. – V. 744. P. – 791-796.
2. Metlov L.S. // Phys. Rev. Let. – 2011. – V. 106. – P. 165506(4).
3. Metlov L.S. // Phys. Rev. E. – 2014. – V. 90. – P. 022124(8).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.196

# Делокализация электронов на поверхности нанокремния

**Мухтаров А.П., Усманова С.А.**
*Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан,* amukhtarov@gmail.com

Делокализация электронов на поверхности нанокремния представляет собой фундаментальный квантово-химический процесс, оказывающий определяющее влияние на электронные, химические и структурные свойства наноструктур кремния. В отличие от углеродных наноструктур, способных к устойчивому π-сопряжению, кремний из-за более низкой степени перекрытия p-орбиталей и большей длины связи Si–Si демонстрирует ограниченную способность к образованию π-связей. Однако исследования, выполненные методом функционала локальной плотности, показали, что в кремниевых нанотрубках и фуллереноподобных структурах всё же наблюдается частичная делокализация несвязанных p-электронов на поверхности, особенно в системах малого размера и высокой кривизны.

В нанотрубках типа (n,0) (зигзагообразных) выявлена более высокая степень π-делокализации по сравнению с нанотрубками типа (n,n) (кресельного типа), что подтверждается уменьшением энергетического зазора между уровнями HOMO и LUMO, а также увеличением порядка связей по Вайбергу-Майеру. Установлено, что гладкость поверхности и симметрия нанотрубки способствуют равномерному распределению электронной плотности и снижению локализации валентных электронов на отдельных атомах.

В случае кремниевых фуллеренов было показано, что степень делокализации π-электронов зависит от размеров кластера: с увеличением количества атомов до 60 степень делокализации и число несвязанных электронов снижаются, что ведёт к большей термодинамической стабильности. Однако дальнейшее увеличение размера снова сопровождается ростом π-делокализации, что может вызывать антиароматические эффекты и снижать устойчивость кластера. Показано также, что наличие дефектов и примесей на поверхности нанокремния существенно влияет на характер локализации: атомы фосфора усиливают делокализацию, а бора — локализацию электронов.

## Литература

1. Иванов И.И., Иванов И.И., Иванов И.И., Иванов И.И. // ИВА. – 2021. – № 2. С. – 16-23.
2. Иванов И.И., Иванов И.И., Иванов И.И., Иванов И.И. // Изв. Вузов. Физика. – 2020. – Т. 01. – № 1. – С. 1-11.
3. Усманова С.А., Мухтаров А.П., Акбаров Х.И. // Вестник СамГУ. 2020.
4. Mayer I. // J. Comput. Chem., 2007.
5. Szczepanik D. W. et al. // Chem. Phys. Lett., 2014.
6. Janesko B.G. et al. // J. Chem. Phys., 2014.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.197

# Проводимость кристаллов силиката висмута, легированных примесью кобальта

**Набиуллина Л.А.[1], Ильинский А.В.[2], Кастро Р.А.[3], Кононов А.А.[3], Тимофеева И.О.[3] Шадрин Е.Б. [2]**

*[1] Пожарно-спасательный колледж и Центр подготовки спасателей, Санкт-Петербург, Россия*
*[2]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт Петербург, Россия*
*[3]Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт Петербург, Россия*

Кристаллы силиката висмута $Bi_{12}MeO_{20}$ (Me=Ti,Ge,Si) характеризуются высокой фоточувствительностью в видимом спектральном диапазоне и находят широкое применение в качестве управляемых оптических транспарантов, а также при создании адаптивных голографических интерферометров [1,2]. Сказанное определило цель предлагаемой работы, которая достигалась путём выявления методом диэлектрической спектроскопии (ДС) особенностей низкочастотных процессов переноса заряда в кристаллах $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO), легированных кобальтом Co.

Низкочастотные ДС спектры выявили в указанных кристаллах наличие в широком интервале температур (100<T<400 K) дисперсии удельной проводимости, подчиняющейся закону $\sigma \sim \omega^s$, где $\omega$ – круговая частота, **s** – показатель степени. Оказалось, что с увеличением температуры имеет место уменьшение показателя **s** в пределах **0.92…0.84**, что является признаком существования в кристаллической системе **BSO:Co** прыжкового механизма проводимости. Установлено, что перенос заряда является термически активированным процессом, описываемым экспоненциальным законом Аррениуса.

Этот факт не вызывает удивления, поскольку известно, что на величину проводимости электрической значительное влияние оказывает легирующая примесь, глубина залегания энергетических уровней которой определяет её энергию активации [3]. В предлагаемой работе с целью конкретизации данного утверждения проведен расчет таких микропараметров системы**,** как функция плотности состояний $dN/dE$ в запрещённой зоне, средняя длина $R_\omega$ прыжка носителей заряда в процессе проводимости, величина энергии активации $\Delta E_\sigma$ проводимости. Кроме того, в работе обсуждаются возможные структурные изменения кристаллической решётки, сопровождающие процесс легирования кобальтом кристалла силиката висмута, а также детально рассматривается их влияние на процесс электрической проводимости материала.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 50-ВГ).

## Литература

1. Kamshilin .A., Romashko R.V., Kulchin Y.N. // J. Appl. Phys. – 2009. – V. 105(3). P. 031101.
2. Колего, А.А., Кабанова Л.А. // Физика твердого тела: Сборник материалов XII Российской научной студенческой конференции. – Томск: ТГУ. – 2010. – С. 163-166.
3. Ilinskiy A.V., Castro R., Nabiullina L.A., Shadrin E.B. // Physics of the Solid State. – 2024. – V. 66(88). – P. 1280-1286.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.198

# Формирование и исследование Холловских датчиков магнитного поля на основе тонких плёнок InSb/GaAs

**Дорохин М.В.[1], Кудрин А.В.[1], Яковлева А.А[1], Лесников В.П.[1], Здоровейщев А.В.[1], Жидяев К.С.[1], Дёмина П.Б.[1], Здоровейщев Д.А.[1], Маник И.М.[1], Горбунова Н.А.[1], Мухина О.В.[1]**

[1]*ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия,* dorokhin@nifti.unn.ru

В настоящее время активно развиваются технологии построения датчиков и сенсоров для носимой и компактной электроники. Значительной части характеристик приборов можно достичь при использовании датчиков, работающих на основе эффекта Холла (так называемые датчики Холла) [1,2].

В данной работе представлены результаты исследований тонкоплёночных датчиков Холла. Датчики сформированы на базе слоёв InSb, нанесённых на поверхность подложек i-GaAs методом импульсного лазерного осаждения. Температура роста варьировалась в диапазоне 150-350 °C. Использование тонких (менее 100 нм) плёнок позволяет существенно уменьшить рабочие токи по сравнению с датчиками на основе объёмных материалов [1]. Выбор InSb обусловлен его свойствами, подходящими для построения высокочувствительных датчиков: низким удельным сопротивлением, высокой подвижностью электронов, возможностью получения слоёв вырожденного InSb, что обеспечивает широкий рабочий температурный диапазон.

Для измерения характеристик датчиков Холла методами фотолитографии и химического травления производилось формирование меза-структур в топологии вида «Холловский крест».

По измерениям магнитополевой зависимости Холловского напряжения были рассчитаны значения коэффициента магнитной чувствительности ($K_m$) для исследованных структур, которые линейно изменялись от 1 мкВ/Гс (для температуры роста 150 °C) до 9 мкВ/Гс (для температуры роста 350 °C). Температурный коэффициент магнитной чувствительности, определённый как разница между максимальным и минимальным значением $K_m$, делённая на разницу между минимальной и максимальной температурой измерений составил не более 0,03 %/К, что вполне сопоставимо с коммерчески доступными датчиками на эффекте Холла [3].

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о возможности использования сформированных тонкоплёночных структур InSb для измерения величины магнитного поля с коэффициентом чувствительности не хуже, чем 9 мкВ/Гс. Для получения структур впервые использован метод импульсного лазерного осаждения. Для указанного метода была продемонстрирована возможность управления величиной магнитной чувствительности путём изменения концентрации носителей заряда за счёт варьирования ростовой температуры, однако при повышении магнитной чувствительности ухудшается температурная стабильность.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках гос. Задания (проект FSWR-2023-0037).

## Литература

1. Ramsden E. Hall effect sensors. Theory and applications. Elsevier. - 2011. - 249 P.
2. Bolshakova I. // Nuclear Rad. Nanosensors Nanosensory Syst. - 2016. - V.19 -P.32.
3. https://www.lakeshore.com/products/categories/magnetic-products/hall-(magnetic)-sensors

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.199

# ИЗУЧЕНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПОКРЫТИЙ ИЗ БЫСТРОРЕЖУЩИХ СТАЛЕЙ

**Невский С. А., Бащенко Л. П., Филяков А. Д.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк,*
E-mail: Luda.baschenko@gmail.com

При использовании концентрированных потоков энергии (плазменной наплавки, электронно-пучковой или магнитно-импульсной обработки) актуальной задачей является выбор режимов обработки, при которых формируется оптимальная геометрия поверхности раздела. Соответственно, необходимо проведение расчетов термоупругих напряжений в поверхностном слое и на границе раздела покрытия и подложки.

Методами конечных элементов решена задача о распределении напряжений в зоне контакта покрытия из стали Р2М9, полученного электродуговой наплавкой, с подложкой из конструкционной стали 30ХГСА. Решение этой задачи проведено в две стадии. На первой стадии решалась задача о распределении напряжений при охлаждении от температуры 1573 К до температуры 293 К. После завершения охлаждения к поверхности покрытия была приложена статическая растягивающая нагрузка. Морфология границы раздела была определена с помощью сканирующей электронной микроскопии, которая показала, что граница раздела имеет криволинейную форму и в первом приближении может быть описана с использованием гармонической функции [1].

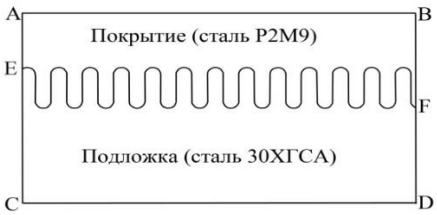



Рис. 1. Схема расчетной области

Форму границы раздела покрытия и подложки можно представить в виде «синусоиды» со средним расстоянием между «горбами» 37 мкм и «амплитудой» ~30 мкм.

Результаты исследования демонстрируют, что на стадии самопроизвольного охлаждения от 1573 до 293 К волнообразная граница между покрытием и подложкой является наиболее эффективным барьером для предотвращения образования трещин, перераспределяя зоны опасных растягивающих напряжений в подложке. Приложение растягивающей статической нагрузки к покрытию после его охлаждения показало, что при значении модуля упругости подложки на порядок меньше модуля упругости покрытия пластическое течение протекает в основном в покрытии, тогда как при соотношении модулей упругости 0,94 материал покрытия находится в области упругих деформаций. Если модуль упругости подложки будет на порядок выше модуля упругости покрытия, то пластическое течение материала будет проходить только в подложке.

***Финансирование*:** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, https://rscf.ru/project/23-19-00186

1. Невский С.А., Бащенко Л.П., Громов В.Е., Филяков А.Д. // Деформация и разрушение материалов. 2024. – № 6. – С. 2-10.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.200

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПОКРЫТИЙ ИЗ БЫСТРОРЕЖУЩИХ СТАЛЕЙ

**Невский С. А., Бащенко Л. П., Филяков А. Д.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк,*
E-mail: Luda.baschenko@gmail.com

Перспективными от износа оборудования металлургической и горнодобывающей промышленности являются получаемые плазменной наплавкой покрытия из быстрорежущих сталей [1], обладающие высокой износостойкостью, адгезией и т.п. Плазменный способ не ограничен размерами и формой изделий, однако его недостатком является образование холодных трещин. Необходим поиск режимов наплавки, которые позволяют избежать образования данных трещин и сохранить высокие механические и трибологические свойства покрытий без применения дополнительных термических обработок [2]. Решение этой задачи требует знаний о распределении механических напряжений в покрытии и на границе его раздела с подложкой в различные моменты времени после окончания воздействия плазменного потока и приложения к покрытию импульсной сжимающей нагрузки.

Изучена эволюция напряженно-деформированного состояния покрытия из молибденовой быстрорежущей стали, полученного плазменной наплавкой. Установлены распределения компонент тензора напряжений в покрытии и подложке, а также на их границе раздела. При самопроизвольном охлаждении после окончания плазменного воздействия в покрытии и на его криволинейной границе раздела с подложкой происходит перераспределение растягивающих и сжимающих напряжений, а также напряжений Мизеса. Значения этих напряжений, а также размеры их областей концентрации по мере уменьшения температуры снижаются, таким образом предотвращая развитие трещин в покрытии на данном этапе.

Поведение нормальных компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}$ и $\sigma_{yy}$ на расстоянии h/2 от поверхности покрытия является немонотонным. В момент времени t = 0 по центральной оси наблюдается экстремум $\sigma_{xx}$ в области сжимающих напряжений, значение которого составляет -355 МПа, при $t \geq 10$ с происходит смена знака напряжений на растягивающие. Компонента $\sigma_{yy}$ и интенсивность напряжения по Мизесу ведут себя несколько иным образом. При t = 0 в диапазонах $0 < x < 0{,}7$ см и $2{,}25 < x < 3$ см наблюдается два минимума зависимости $\sigma_{yy}$ и $\sigma_M$, которые находятся в области сжимающих напряжений и один максимум наблюдается при x = 1,5 см в области растягивающих напряжений. При $t \geq 10$ с в вышеуказанных диапазонах наблюдаются максимумы растягивающих напряжений $\sigma_{yy}$, экстремум напряжений Мизеса, наоборот, исчезает.

При амплитудном значении внешнего напряжения, равном удвоенному пределу текучести, происходит перераспределение напряжений Мизеса между покрытием и подложкой. При времени T/4 и 3T/4, когда $\sigma_{ext} = 0$, пластическое течение протекает в основном в подложке, тогда как при T/2 как в покрытии, так и в подложке.

***Финансирование*:** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, https://rscf.ru/project/23-19-00186

1. Мозговой И.В., Шнейдер Е.А. Наплавка быстрорежущей стали. Омск: Изд-во ОмГТУ, 2016. 200 с.

2. Малушин Н.Н., Романов Д.А., Ковалев А.П., Осетковский В.Л., Бащенко Л.П. // Известия вузов. Физика. 2019. Т. 62. - № 10(742). – С. 106-111.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.201

# ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДИОКСИДЕ КРЕМНИЯ

**А.И. Непомнящих, А.П. Жабоедов, А.М. Федоров**
*Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск, Россия*
*e-mail: ainep@igc.irk.ru*

Особо-чистый природный кварц имеет широкое промышленное применение. Он является исходным материалом для получения кварцевых концентратов высокой и ультравысокой степени чистоты. На основе кварцевых концентратов производится оптическое кварцевое стекло для видимой и ближней инфракрасной областей спектра, а также термостойкая кварцевая керамика самого широкого применения, включая радиопрозрачные обтекатели ракет. Диоксид кремния, благодаря своим свойствам, широкая область прозрачности от вакуумного ультрафиолета до ИК области, термостойкость, низкий коэффициент температурного расширения получил широкое промышленное применение в качестве оптического материала, термостойкой кварцевой керамики и других применений.

Полиморфные превращения кварц-кристобалит, а также температура и кинетика кристаллизации стекла во многом определяют особенности процессов обогащения кварцевого сырья и получения кварцевых концентратов. Институтом геохимии выявлен и достаточно детально изучен новый тип особо-чистого кварцевого сырья – высокочистые кварциты Восточного Саяна [1-4]. На базе этого сырья кварцевые концентраты высокой степени чистоты и получено «сухое» кварцевое стекло.

Устойчивость кварцевого стекла к кристаллизации является одной из важнейших характеристик кварцевого стекла, определяющая возможности его использования для изготовления термостойкой кварцевой керамики. Склонность стекол к кристаллизации определяются исходным кварцевым материалом, их химическим составом и внешними параметрами, такими как температура и давление. Границы раздела фаз, участки соприкосновения с огнеупорами, газовые пузыри в стекломассе, инородные твердые включения способствуют кристаллизации стекла. В целом, механизм кристаллизации стекол включает две стадии: образование центров кристаллизации (зародышей) и рост кристаллов на них [5-6].

В результате исследования кристаллизации кварцевого стекла, полученного на основе кварцевых концентратов из природного кварцевого сырья разного генезиса. Показано, что температура начала и кинетика кристаллизации кварцевого стекла зависит не только от чистоты кварцевых концентратов, из которых наплавлено кварцевое стекло, а также определяются генезисом исходного кварца.

1. Е.И. Воробьев, А.М. Спиридонов, А.И. Непомнящих, М.И. Кузьмин. Сверхчистые кварциты Восточного Саяна (Республика Бурятия, Россия) // ДАН. 2003,т. 390, № 2, с. 219-223.
2. А.М.Федоров, В.А.Макрыгина, А.Е.Будяк, А.И.Непомнящих. Новые данные о геохимии и механизме формирования кварцитов месторождения Бурал-Сарьдаг (Восточный Саян) // ДАН. 2012, т. 442, № 2, с.244-249.
3. А.И. Непомнящих, А.М. Федоров, А.П. Жабоедов, М.Г. Волкова. Высокочистые кварциты Восточного Саяна // Геология и геофизика. 2023. 8, стр. 1205-1215
4. Д.Ц. Аюржанаева, А.М. Федоров, А.М. Мазукабзов, А.И. Непомнящих, Э.А. Очирова, В.Ф.Посохов. Механизмы формирования химически чистых кварцитов Бурал-Сардыкского месторождения// Геология и геофизика, 2020, N 10, стр. 1316-1330
5. Müller, R., Zanotto, E. D., and Fokin, V. M. Surface crystallization of silicate glasses: nucleation sites and kinetics// J. Non-Cryst. Solids. 2000. V. 274. P. 208–213
6. F.E. Wagstaff. Crystallization Kinetics of Internally Nucleated Vitreous Silica // J. Am. Ceram. Soc. 51 (8) (1968) 449

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.202

# РАЗРАБОТКА ОТЕЧЕСТВЕННОГО ОБОРУДОВАНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ SIC ДИАМЕТРОМ 150 ММ

**Бородин А.В.[1,2], Бородин В.А.[1,2], Юдин М.В.[1], Смирнов К.Н.[2], Мошаров Т.А.[2], Оганесян В.А.[1]**

*[1]ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*

*[2]АО "ЭЗАН" Черноголовка, Россия*

Благодаря уникальному сочетанию электрофизических характеристик карбид кремния (SiC) широко применяется в силовой электронике для производства приборов (диоды Шоттки, MOSFET, IGBT) с существенно более высокими характеристиками по сравнению с приборами на основе монокристаллов кремния. Объем мирового рынка силовых приборов на основе SiC растет с темпом более 30% в год и к 2028 году составит более $8 млрд. [1]. Монокристаллы SiC получают методом ЛЭТИ (PVT), в основе которого лежит конденсация пересыщенного пара шихты SiC на монокристалл-затравку SiC [2].

АО «ЭЗАН» разработал установку «Ника-SiC-6M», для выращивания монокристаллов SiC диаметром 150 мм и совместно с ИФТТ РАН проводит НИОКР по отработке технологических режимов выращивания, совершенствованию конструкции теплового узла и повышению качества монокристаллов. Созданная установка индукционного нагрева обладает рядом технологических преимуществ и высоким уровнем автоматизации технологического процесса, а именно:

– автоматизированной системой сухой вакуумной откачки, состоящей из спирального и турбомолекулярного насосов, обеспечивающих вакуум до $10^{-5}$ торр;

– автоматизированной системой поддержания динамического вакуума в диапазоне от 0,1 до 750 торр;

– системой вертикального перемещения индуктора, обеспечивающей оптимальное распределение температуры в тепловом узле и равномерный выход паров из источника в процессе выращивания монокристалла;

– системой пирометрического измерения температуры в верхней и нижней точках теплового узла, обеспечивающей непрерывный мониторинг температурного градиента между монокристаллом-затравкой и источником паров;

– системой вертикального перемещения нижнего пода реактора для быстрой и безопасной загрузки-выгрузки теплового узла, и при необходимости кварцевого реактора.

– возможностью работы в протоке рабочих газов Ar, $N_2$ или их смеси в заданном соотношении, которое поддерживается в автоматическом режиме;

– форвакуумным баллоном, поддерживающим рабочее давление в реакторе до 0,1 торр без использования вакуумных насосов, что увеличивает ресурс работы вакуумных насосов и упрощает поддержку необходимого давления.

На установке «Ника-SiC-6M» выращены тестовые монокристаллы SiC диаметром 156 мм, из которых подготовлены пластины диаметром 150 мм и толщиной 0,8 мм. На пластинах проведены исследования структурного совершенства и электрофизических характеристик полученных кристаллов.

Работа выполняется в рамках Соглашения № 020-11-2023-1603 с Минпромторгом России.

## Литература

1. Power SiC 20213 // YOLE Group. – August 2023.

2. Афанасьев А.В., Ильин В.А., Лебедев А.О., Лучинин В.В., Таиров Ю.М. // Биотехносфера. – 2011. – № 1-2 (13-14). – С. 11-19.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.203

# ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ ЛЮДЕРСА В СПЛАВЕ AL-MG СО СТРУКТУРНОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ

**Орлова Д.В., Горбатенко В.В., Шляхова Г.В.**
*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*
E-mail: dvo@ispms.ru

Ранее было показано, что локализация пластического течения реализуется в моно- и поликристаллических материалах на всех стадиях нагружения от упругопластического перехода до разрушения и на всех пространственных, временных и структурных уровнях. Существование активных очагов локализованного пластического течения на макроскопическом уровне и данные о закономерностях их рождения и развития привели к введению понятий об автоволновой природе локализованного пластического течения [1]. Причем генерация различных автоволновых режимов локализованной пластичности начинается непосредственно с упруго-пластического перехода в процессе нагружения. Пробелом автоволновой концепции является ограниченное количество работ по установлению механизмов развития локализации деформации в структурно неоднородных материалах. В связи с этим, целью настоящей работы является исследование кинетики макроскопических полос локализованной деформации на упругопластическом переходе в сплаве на основе алюминия со структурной неоднородностью в виде сварного шва.

Кинетика фронтов исследовалась методом корреляции цифровых изображений (DIC). Исследования проводили на сплаве АМг5 со структурной неоднородностью в виде сварного шва, сформированного сваркой трением с перемешиванием. Зона шва располагалась перпендикулярно оси растяжения на средине рабочей части образцов типа «dog bone» с размерами 50×10×2 мм. Ширина зоны шва составляла 12 мм. Образцы подвергались отжигу при T = 673 K, $t$ = 3 часа в атмосферной печи. В таком случае на деформационной кривой растяжения проявляется площадка текучести. Нагружение растяжением проводилось при скоростях 0,02-0,2 мм/мин.

В работе было установлено, что сложное структурное состояние в виде сварного шва, полученного сваркой трением с перемешиванием разбивает образец на участки основного металла, где протекает деформация Людерса и зону перемешивания, где не происходит локализация деформации на протяжении площадки текучести. Причем, зоны термомеханического влияния, обладающие повышенной микротвердостью по сравнению с основным металлом и зоной перемешивания, являются источниками деформационных фронтов Людерса. В зависимости от скорости деформирования деформационные фронты Людерса могут двигаться дискретно в фазе падения скачка напряжения или монотонно на гладкой площадке текучести. Если фронт деформации движется дискретно, он представляет собой автоволну возбуждения локализованной пластичности, период рефрактерности которой равен $t_a$. Если $t_a >> t_w$, фронт движется монотонно и является автоволной переключения локализованной пластичности.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 24-29-00580, https://rscf.ru/project/24-29-00580/.*

## Литература

1. Zuev L. B., Barannikova S. A., Danilov V. I., Gorbatenko V. V. // Prog. Phys. Met. – 2021. – №22. – P. 3–57.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.204

# Модификация электронных свойств $V_2$ $O_5$ путем деформаций структуры

**Орлов Л. Ю., Степанов Р. С., Третьяков Т. М., Кононов А. А.**

*Научно-исследовательский институт физических исследований, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

*Email: leonorlov2023@gmail.com*

Пентаоксид ванадия — это слоистый материал с запрещенной зоной порядка 2,2 эВ, который широко используется в качестве катализатора в химических батареях, умных окнах, оптических детекторах и переключателях [1]. Особое значение имеет разработка методов регулирования ширины запрещённой зоны и, как следствие, электронных характеристик этого материала. Одним из таких методов является приложение давления.

Расчеты проводились при помощи обобщенного градиентного приближения в параметризации PBE с применением пакета Quantum ESPRESSO[2]. Был использован уьтрамягкий полностью релятивистский псевдопотенциал. Энергия отсечки была установлена 640 эВ. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием сетки из k точек размером 4×3×2. Для учета корреляционных эффектов использовался подход DFT + U (Ud=5.7 эВ). Дальнодействующие дисперсионные взаимодействия учитывались поправкой DFT+D2. Работа была выполнена на базе вычислительного центра МРЦКП РГПУ им. А.И. Герцена

К слоям $V_2O_5$ прикладывались одноосное вдоль оси Z (до 30 ГПа) и гидростатическое (до 70 ГПа) давления с шагом 2 ГПа. Также, исследовались теоретические структуры с искусственно измененными валентными углами.

Выявлено, что в $V_2O_5$ основной вклад в изменение электронной структуры вносит не изменение межслойного расстояния, как в большинстве других слоистых материалов, а изменение длины связей и валентных углов внутри слоя. Для осевого давления вдоль оси Z удалось добиться уменьшения ширины запрещенной зоны в 2 раза при давлении 12 ГПа. Для гидростатического давления, такого результата удалось достичь при 46 ГПа, при этом, уменьшилась эффективная масса носителей заряда. Результаты расчета теоретических структур подчеркивают влияние валентных углов и длин связей. Так, было выявлено, что выравнивание валентных углов в плоскости XY позволяет уменьшить ширину запрещенной зоны до 93 мэВ. Комбинированное выравнивание валентных углов вдоль оси Z и в плоскости XY позволяет получить бесщелевое состояние.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 43-ВГ)

## Литература

1. Raja S., Subramani G., Bheeman D., Rajamani R., Bellan C. // Optik - International Journal for Light and Electron Optics. – 2016. – V. 127. – № 1. – P. 461-464.
2. The Quantum ESPRESSO Team // Quantum ESPRESSO (Open-Source Package for Quantum Modeling of Materials) – 2023 – URL: https://www.quantum-espresso.org/

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.205

# ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ СТАРЕНИЯ НА ПАРАМЕТРЫ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ В95пч

**Осинская Ю. В., Уразов Р.Р.**

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара, Россия, ojv76@mail.ru*

Температура старения играет критическую роль в формировании микроструктуры и механических свойств алюминиевых сплавов [1]. Процесс старения включает в себя выдержку материала при определенной температуре, что приводит к образованию и росту частиц вторичных фаз, влияющих на подвижность дислокационной структуры и, соответственно, на пластические свойства сплава. В связи с этим целью данной работы является экспериментальное исследование температурных зависимостей микротвердости, параметра решетки и фазового состава алюминиевого сплава В95пч, состаренного в постоянном магнитном поле.

В качестве объекта исследования был выбран алюминиевый сплав В95пч. Искусственное старение проводили в течении 4 ч при температурах старения от 80 до 200 °С в постоянном магнитном поле (ПМП) напряженностью 7кЭ и в его отсутствие.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

наложение ПМП на старение алюминиевого сплава В95пч всегда приводит к увеличению микротвердости до 21 % при всех исследованных температурах. Наблюдается, так называемый, отрицательный магнитопластический эффект (МПЭ) [2-4].

старение в ПМП приводит к уширению всех дифракционных линий, наблюдаемых на дифрактограммах состаренного сплава, по сравнению со старением без поля. Данный факт указывает о искаженности кристаллической решетки, связанной с процессами старения и перестройкой структуры в магнитном поле.

– с ростом температуры старения параметр кристаллической решётки сплава практически не изменяется, все значения лежат в пределах ошибки измерения.

- ПМП также не приводит к значительному изменению параметра кристаллической решетки по сравнению со случаем старения без поля во всем исследованном интервале температур.

## Литература

1. Алюминий: свойства и физическое металловедение: Справ. изд. пер. с англ. / Под ред. Хэтча Дж. Е. - М.: Металлургия, 1989. 422 с.

2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Кристаллография. - 2003. - Т. 48. - № 5. С. 838-867.

3. Головин Ю.И. // ФТТ. - 2004. - Т. 46. - № 5. - С. 769-803.

4. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Дивинский С.В., Магамедова С.Г. // Известия РАН. Серия физическая. - 2022. - Т. 86. - № 11. - С. 1545-1552.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.206

# ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕННОСТИ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС СТАРЕНИЯ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА В95пч

**Осинская Ю.В., Нуретдинова Д.Р.**
*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, ojv76@mail.ru*

Алюминиевые сплавы широко используются в различных отраслях, включая автомобильную и аэрокосмическую промышленность, благодаря своим уникальным физико-механическим свойствам, таким как малый удельный вес, высокая коррозионная стойкость и пластичность [1]. Однако для достижения оптимальных эксплуатационных свойств этих сплавов необходимы эффективные методы их обработки, одним из которых является процесс искусственного старения. В последние годы активно изучается влияние магнитных полей на физико-механические свойства различных материалов, в частности металлических сплавов, подвергнутых искусственному старению. Исследования показывают, что под действием магнитного поля изменяются микротвердость, внутреннее трение, предел прочности и другие макро- и микроскопические свойства металлических сплавов [2-4].

Целью данной работы является экспериментальное исследование влияния напряженности постоянного магнитного поля (ПМП) на микротвердость и формирование фазового состава алюминиевого сплава В95пч в процессе его старения.

Образцы из алюминиевого сплава В95пч после выдержки в течении 1 ч при температуре 470 °С закалили в воду 20 °С, а затем искусственно старили при температуре 140 °С длительностью 4 ч в ПМП напряженностью 2.5, 5 и 7 кЭ, а также в его отсутствие.

Установлено, что при старении алюминиевого сплава В95пч в ПМП значения микротвердости всегда больше, чем в его отсутствие. Наблюдается отрицательный магнитопластический эффект, величина которого достигает 21 %. Результаты рентгенофазового анализа показали, что наложение ПМП на старение сплава приводит к смещению дифракционных линий в сторону больших углов и увеличению их полуширины, что свидетельствует об искаженности кристаллической решетки.

## Литература

1. Белов Н.А., Савченко С.В., Хван А.В. Фазовый состав и структура силуминов: Справочное издание. – М.: МИСИС. – 2008. – 283 с.

2. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2022. - № 2. - С. 80-84.

3. Ziyu Xi, Qiong Wu, Jiahui Yan, Jiaoli Liang, Hongliang Ge. // International Journal of Electrochemical Science. – 2023. - V. 18. – P. 3564-3574.

4. Zhenqiao Zhang, Hu Huang, Zhijie Zhang, Yingying Wang, Bo Zhu, Hongwei Zhao. // Journal of Materials Research and Technology. – 2024. – V. 30. – P. 9285-9317.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.207

# ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ СИГНАЛА ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПАРАМЕТРЫ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ Al-Li

**Осинская Ю. В., Магамедова С. Г., Еремеева М. А.**
*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Самара, Россия, ojv76@mail.ru*

В данной работе проводилось экспериментальное исследование влияния импульсного магнитного поля (ИМП) амплитудой напряженности 557.2 кА/м и частотой импульсов 2 Гц с формой сигнала типа синус и меандр на микротвердость в алюминиевом сплаве Al-Li, состаренном при температуре старения 120 °С длительностью от 2 до 8 ч Предварительно сплав подвергали закалке: образцы одновременно выдерживали в печи в атмосфере воздуха при температуре 500 °С в течение 1 ч, затем охлаждали, быстро погружая в воду температурой 20 °С.

Микротвердость по методу Виккерса определяли с помощью микротвердомера HAUSER при нагрузке 100 г. Каждое значение микротвердости получали путем усреднения по 30 измерениям. Относительная ошибка среднего значения микротвердости исследуемого материала составила 2–3 %.

В закаленном состоянии микротвердость алюминиевого сплава Al-Li составила 83 кГ/мм$^2$. Старение без наложения магнитного поля приводит к увеличению микротвердости сплава до 113 кГ/мм$^2$. Это можно объяснить тем, что при старении металлического сплава выделяются упрочняющие фазы (в частности, $Al_3Li$), которые являются стопорами и тормозят движение дислокаций и тем самым, приводят к возрастанию прочностных свойств сплава.

Наложение ИМП с формой сигнала типа синус и меандр на старение сплава всегда приводит к уменьшению микротвердости до 37 и 3 % соответственно, что подтверждает зависимость эффекта от формы сигнала. Наблюдается, так называемый, положительный МПЭ. Данное уменьшение микротвердости сплава при старении в ИМП можно объяснить формированием более однородной и менее искаженной структурой сплава, вследствие этого, движущие дислокации встречают на своем пути меньшее количество препятствий (фазы, границ зерен и т.д.), и сплав становится более пластичным.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.208

# ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО И ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК9 ПРИ ИСКУССТВЕННОМ СТАРЕНИИ

**Осинская Ю. В., Магамедова С. Г., Воронин С. В., Четверкин А. А.**
*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Самара, Россия, ojv76@mail.ru*

В настоящей работе представлены результаты измерения микротвердости и твердости алюминиевого сплава АК9, искусственно состаренного в постоянном и импульсном магнитных полях (МП). Сплав после выдержки 2 ч и последующей закалки от 535 °С в воду 20 °С старили длительностью 4 ч при температурах 140, 175 и 200 °С при наложении постоянного МП напряженностью 2,5 и 7 кЭ и импульсного МП амплитудой напряженности 2,5 и 7 кЭ и частотой 2 и 5 Гц.

Измерения твердости проводили методом Бринелля на твердомере Novotest ТС-БРВ с нагрузкой 187,5 кГ, индентор – шарик диаметром 2,5 мм, время нагружения 30 с, в свою очередь микротвердость измеряли методом Виккерса на микротвердомере HAUSER, индентор – алмазная пирамидка, время нагружения 7 с, нагрузка 100 г.

При анализе экспериментальных данных было установлено следующее:

- наложение постоянного МП на старение сплава приводит к уменьшению микротвердости до 23 % и твердости до 20 %, при этом пластические свойства сплава возрастают, наблюдается положительный магнитопластический эффект (МПЭ). Увеличение напряжённости постоянного МП с 2,5 до 7 кЭ приводит к усилению МПЭ, что связано с избыточной активацией диффузионных процессов и коагуляцией выделяющихся частиц;

- наложение импульсного МП также приводит к уменьшению микротвердости, в данном случае до 25 % и твердости до 22 % по сравнению с отжигом без поля. Попрежнему наблюдается положительный МПЭ;

- увеличение температуры старения приводит к росту прочностных свойств сплава, максимум достигается при температуре старения 175 °С при всех режимах термической и термомагнитной обработок, а затем наблюдается их снижение из-за коагуляции выделений в результате перестаривания. Максимальные значения твердости и микротвердости при температуре 175 °С составляют 105 и 115 кГ/мм$^2$, соответственно.

Полученные результаты исследования позволяют сделать вывод о том, что наложение постоянного и импульсного МП на старение алюминиевого сплава АК9 приводит к существенному изменению его физико-механических свойств.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.209

# НАСТРОЙКА ПРОВОДИМОСТИ ПУТЕМ ДЕФОРМАЦИИ РЕШЕТКИ

**Д.К. Палчаев, Ж.Х. Мурлиева, Рабаданов М.Х, Гаджимагомедов С.Х., Исхаков М.Э., Эмиров Р.М., Мурлиев Э.К., Рабаданова А.Э., Фараджев Ш.П.**
*Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*
E-mail: dairpalchav@mail.ru

На основе прямых исследований установлена корреляция сопротивления $\rho(T)$ и термической деформации решетки $\beta(T) = \mathrm{d}V(T)/V(T)\mathrm{d}T$ металлических и неметаллических проводников. Показано, что модифицированные выражения Друде–Блоха (*D-B*) и Максвелла (М) одинаково хорошо позволяют понять суть такой связи, наличие которой способствует количественной интерпретации проводимости материалов, в том числе вновь создаваемых путем модификации их структуры. Объектами исследования являются классические металлы, интерметаллиды и оксиды, в том числе ВТСП. Проводимость интерметаллидов носит промежуточный характер между классическими металлами и ВТСП. У металлов концентрация электронов постоянная, а в ВТСП имеются лишь зарядовые возбуждения, как с отрицательным, так и с положительным знаком. Интерметаллиды, как и ВТСП, демонстрируют насыщение удельного сопротивления и смену знака температурного коэффициента сопротивления. Эти эффекты рассматриваются как аномалии, определяемые пределом Иоффе-Регеля. При этом все проводники демонстрируют наличие корреляции температурных зависимостей сопротивления, обусловленных как возбуждением зарядов, так и их релаксацией, с термической деформацией решетки. В докладе представлены выражения, полученные путем модификации формул *D-B* и М, из которых следует эта корреляция для проводников с разным типом проводимости:

$$\rho_{D-B}(T) = \frac{m}{n(T)e^2\,\tau(T)_{D-B}} = \frac{m\,\beta(T)T}{n(T)e^2\,\tau^*} \qquad (1)$$

$$\rho_M(T) = \frac{n_0\tau(T)_M}{n(T)\varepsilon_0} = \frac{n_0\tau^*(T)\beta(T)T}{n(T)\varepsilon_0}\ , \qquad (2)$$

где $n_0$ – постоянная концентрация, характерная для классических металлов. При $n(T) = n_0$ эти выражения переходят в обычные формулы для классических проводников. Для металлов показано, что представление времен релаксации в виде $\tau_{D\text{-}B} = \tau_{D\text{-}B}^*/\beta(T)\cdot T$ и $\tau_M = \tau_M^*\cdot\beta(T)\cdot T$, которые в выражениях (1) и (2) обратно и прямо пропорциональны сопротивлениям соответственно, примеряет концепции *D-B* и М. Время релаксации при $\beta(T) \approx 1$ в обеих концепциях примерно равно $\tau^* \approx 10^{-16}$с. Для неметаллических проводников, в которых при деформации решетки заряды не только релаксируют, но и возбуждаются, корреляция наблюдается между температурными коэффициентами сопротивления $\mathrm{d}\rho(T)/\rho(T)\mathrm{d}T$ и теплового расширения $\beta(T)$. Логарифмируя выражение (2), а затем, дифференцируя его по температуре, имеем:

$$\mathrm{d}\rho(T)/\rho(T)\mathrm{d}T = \mathrm{d}\tau(T)/\tau(T)\mathrm{d}T - \mathrm{d}n(T)/n(T)\mathrm{d}T = \mathrm{d}V(T)/V(T)\mathrm{d}T + \mathrm{d}\tau(T)/\tau(T)\mathrm{d}T \qquad (3)$$

Здесь учтено, что $n(T) \sim 1/V(T)$, а $\mathrm{d}n(T)/n(T)\mathrm{d}T = -\mathrm{d}V(T)/V(T)\mathrm{d}T$. Правая часть (3) характеризует вклады от относительных значений возбуждения зарядов при сжатии решетки и их релаксации. В зависимости от типа превалирующего вклада, неметаллические проводники могут проявлять как металлический, так и полупроводниковый характер проводимости. При их сравнивании зависимость $\rho(T)$ выходит на насыщение.

Работа выполнена при поддержке ГЗ FZNZ-2025-0003

## Литература

D K Palchaev et al 2020. //J. Phys.: Conf. Ser. 1686 012051

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.210

# Численное решение уравнения Линдблада для модели Дике

**Пан В. И.[1], Сеидов С. С.[2]**

*[1]НИТУ МИСИС, Москва, Россия, vincelsky@yandex.ru*
*[2]НИТУ МИСИС, Москва, Россия, alikseidov@yandex.ru*

Целью работы было наблюдение эволюции спиновой системы, взаимодействующей с фотонным полем, под влиянием процесса диссипации с помощью модели Дике [1].

Стохастическая эволюция квантового состояния моделировалась с помощью метода квантовых траекторий Монте-Карло, что позволило исследовать влияние диссипации на коллективное поведение спиновой системы, связанной с фотонной модой. Применение метода квантовых скачков оправдано его математической эквивалентностью решению уравнения Линблада в пределе большого числа траекторий. При усреднении по ансамблю таких стохастических квантовых траекторий метод точно воспроизводит динамику открытой квантовой системы, описанную уравнением Линблада [2], что делает его удобным инструментом для численного моделирования диссипативных процессов.

Для симуляции модели Дике использовался эффективный гамильтониан [3], который учитывает диссипацию, позволяя описать динамику открытой квантовой системы. Сама диссипация была введена добавлением оператора Линдблада описывающего разрушение полярона.

В процессе изучения действия диссипации на кубитную цепь была исследована эволюция квантовых наблюдаемых таких как энергия, спин и четность.

## Литература

1. Hepp K., Lieb E. H. On the superradiant phase transition for molecules in a quantized radiation field: the Dicke maser model. — Annals of Physics. — 1973. — Т. 76, № 2. — С. 360–404.
2. Breuer H.-P., Petruccione F. // The Theory of Open Quantum Systems. — Oxford: Oxford University Press, 2002. — С. 368-370.
3. Jäger S. B., Schmit T., Morigi G., Holland M. J., Betzholz R. Lindblad Master Equations for Quantum Systems Coupled to Dissipative Bosonic Modes. — Phys. Rev. Lett. — 2022. — Т. 129. — № 063601. — С. 2.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.211

# DFT моделированиие низкоразмерных материалов в атомноподобном базисе

**Переходюк А. Я.[1], Аникина Е. В.[2]**
[1]*ЮУрГУ (НИУ), г. Челябинск, Россия,* alexander.perehodyuk@yandex.ru
[2]*ЮУрГУ (НИУ), г. Челябинск, Россия,* anikinaev@susu.ru

Численные эксперименты с применением теории функционала электронной плотности, как правило, ограничены системами с размерами ~200 атомов из-за высоких требований к вычислительным ресурсам. Использование определенных подходов, например, представление волновой функции системы в базисе атомноподобных орбиталей, позволяет облегчить моделирование структур с высокой долей вакуума в ячейке моделирования (например, слоистые системы или сорбционные комплексы). В программном пакете SIESTA [1] как раз имплементирован такой подход. Но для получения адекватных результатов при использовании атомноподобного базисного набора пользователю необходимо проводить целую серию подготовительных расчетов, с помощью которых будут определяться оптимальные параметры базиса.

Для облегчения проведения таких подготовительных расчетов было создано программное обеспечение, разработанное на языке Python, предназначенное для автоматизации обработки и визуализации данных. Пользователь сможет сконецентрироваться на самом важном: анализе результатов и отборе оптимальных параметров.

Ключевые функциональные возможности разрабатываемого ПО:

- автоматизированная обработка выходных файлов SIESTA, извлечение ключевых параметров из данных файлов;
- визуализация результатов (построение графиков зависимостей полученных параметров с использованием библиотеки matplotlib, сохранение графиков для последующего использования в отчетах);
- автоматическое создание Excel-отчетов с интегрированными графиками и таблицами данных.

Использование этой программы позволит снизить количество ошибок при рутинной работе над подготовительными расчетами.

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

## Литература

1. Soler J.M. et al. // J. Phys. Condens. Matter. – 2002. – V. 14. – № 11. – P. 2745–2779.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.212

# Резонансная магнитопластичность с импульсной накачкой

**Петржик Е.А., Альшиц В.И.**
*Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия,* e-mail: Epetrzhik@mail.ru

Обнаружено резонансное уменьшение микротвердости кристалла NaCl:Ni после его экспозиции в сверхнизких скрещенных магнитных полях: постоянном поле 50 мкТл и импульсном поле с амплитудой ~18 мкТл и регулируемой длительностью в диапазоне 0.5 - 0.74 мкс.

Впервые импульсный магнитопластический эффект в поле Земли при длительности импульса ~ 0.5 мкс был обнаружен в подвижности дислокаций [1] в кристалле NaCl:Ca. В настоящей работе использовалась аналогичная схема эксперимента, но измерялась макро-характеристика кристалла. Импульсное магнитное поле создавалось в соленоиде, на который от генератора подавался одиночный импульс напряжения квази-прямоугольной формы, регулируемых длительности и амплитуды. За длительность импульса принималась его ширина на полувысоте. Постоянное магнитное поле создавалось с помощью двух пар катушек Гельмгольца. Соленоид помещался в кольца Гельмгольца так, чтобы векторы магнитной индукции постоянного и импульсного полей были взаимно ортогональны. Измерения микротвердости проводились методом Виккерса. Микротвердость измерялась до магнитной экспозиции, сразу после нее, через каждый час в течение первых 5–6 часов и при необходимости по нескольку раз в последующие сутки. Максимальное изменение микротвердости наблюдалось через 3-5 часов после экспозиции. Контрольные измерения влияния по отдельности постоянного и импульсного полей, показали, что эффект наблюдается только при их совместном действии.

Показано, что магнитостимулированное изменение микротвердости происходит резонансным образом - максимальное уменьшение микротвердости зависит от длительности импульса при его постоянной амплитуде. Найдены три резонансных пика: двойной минимум при 0.512 и 0.520 мкс, а также одиночный пик при 0.724 мкс. Обнаружен порог эффекта по амплитуде импульса накачки, ~16 мкТл, ниже которого не наблюдается изменения микротвердости после магнитной экспозиции.

Проведено сравнение резонансного разупрочнения одного и того же кристалла в случаях импульсной и гармонической [2] накачек. Оказалось, что форма, положение и даже амплитуды найденных трех пиков соответствуют аналогам в спектре микротвердости, полученном в идентичной схеме эксперимента, но с гармонической 30-минутной накачкой при амплитуде переменного магнитного поля ~3 мкТл [2]. Показано, что наилучшее совпадение положений пиков реализуется в двойных шкалах $\nu \div k/\tau$ при $k = 0.994$.

Таким образом, повысив амплитуду накачки в 6 раз, получен тот же макрорезультат при экспозиции в $\sim 10^9$ раз короче.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

## Литература

1. Альшиц В. И., Даринская Е. В., Морозов В. А., Кац В. М., Лукин А. А. // ФТТ. 2013. Т. 55. № 11. С. 2176-2182.
2. Петржик Е. А., Альшиц В. И. // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т. 113. – № 10. – С. 678-682.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.213

# Регулирование свойств функциональных материалов приповерхностным деформационным легированием

**Покидов А.П., Классен Н. В., Цебрук И.С., Кедров В.В., Чекмазов С.В.**
*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия а,*
klassen@issp.ac.ru

Приповерхностное деформационное легирование (ПДЛ) , разработанное в ИФТТ РАН [1], основано на внедрении в твердые тела инородных веществ посредством обкатывания их поверхностей шариком или роликом, когда внедряемое вещество располагается между обкатывающим инструсментом и обрабатываемой поверхностью. Адекватным подбором параметров процесса (давления на инструмент и скорости его движения, морфологии внедряемого вещества и др.) удается достичь необычно высоких скоростей внедрения. При комнатной температуре за время обработки менее часа глубина легирования достигает десятков микрон, что на порядок больше глубин широко применяемого термодиффузионного легирования, хотя оно производится в течение нескольких часов при температуре порядка 1000°С. Важное преимущество деформационного легирования в том. что оно может производиться непосредственно на месте службы обрабатываемого устройства – например, под водой для антикоррозионной защиты корпусов кораблей и других металлоконструкций. Регулирование основных параметров ПДЛ в сочетании с дополнительными факторами (электрическими, магнитными, оптическими, ультразвуковыми воздействиями) позволяет получать в приповерхностных слоях твердых тел многообразные вариации сверхструктур с требуемыми для тех или иных практических применений пространственными распределениями химического состава и свойств [2]. В докладе представлены конкретные примеры таких применений. Внедрение шариковой обкаткой наночастиц кремния и углерода в приповерхностные слои изделий из алюминия, стали и других металлов, чему способствует образование локальных силицидов и карбидов. С другой стороны, обкаточное внедрение в керамику из карбида кремния локально пластифицирующих веществ способно повысить ее трещинностойкость с сохранением при оптимальном подборе режима жаропрочности изделия.

Применительно к функциональным материалам для оптических или электронных устройств большой интерес представляют приповерхностные сверхструктуры с перидоами микронных масштабов. Например, в разработках сцинтилляционных материалов для радиационных детекторов серьезному улучшению чувствительности способствует периодическое распределение активаторов люминесценции, обеспечивающее самостимулированное излучение сцнтилляционных фотонов с повышенным квантовым выходом в заданном направлении. Для электронных устройствах могут быть интересны микро-периодические распределения p-n переходов, формируемые в полупроводниковых матрицах вкатыванием веществ, изменяющихющих тип проводимости.

## Литература

1. Классен Н.В. Классен Е.Н., Кобелев Н.П., Колыванов Е.Л. Мышляев М.М., Кулак М.М., Клубович В.В. , «Способ поверхностного легирования», Патент РФ RU 2 735 303 C1 от 29.10. 2020.
2. Цебрук И.С., Покидов А.П., Кедров В.В., Классен Н.В. “Self-concentrated mass – transfer during deformation treatments of organic – inorganic compositions” , Journal of Physics C, 2021. – Vol. 2056, Iss. 1. – P. 12039

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.214

# Пайерлсовский переход как следствие спонтанного проскальзывания фазы волны зарядовой плотности

**Покровский В.Я., Зайцев-Зотов С.В.**
*ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия,* vadim.pokrovskiy@mail.ru

Хотя в простейшем случае образование волны зарядовой плотности (ВЗП) описывается моделью аналогичной теории БКШ, её применение к реальным квазиодномерным проводникам затруднено из-за одномерных флуктуаций. Температуры перехода, $T_P$, оказываются в разы ниже, чем предсказывает БКШ ($T_P=\Delta(0)/1.76$, где $\Delta$ – полуширина пайерлсовской щели), а зависимости $\Delta(T)$ не соответствуют БКШ.

Для описания пайерлсовского перехода была предложена полуэмпирическая модель спонтанного проскальзывания фазы (ПФ) ВЗП, то есть рождения-исчезновения единичного периода ВЗП в результате локального подавления ВЗП [1]. Модель обоснована экспериментально наблюдением случайного телеграфного сигнала в наноразмерных образцах $TaS_3$ [2], а также максимума флуктуаций сопротивления чуть ниже $T_P$ в макроскопических образцах [3]. При этой температуре исчезают метастабильные состояния, что означает, что барьер для ПФ преодолим за разумное время и без деформации ВЗП. Из предыдущего изучения ПФ при движении ВЗП и релаксации метастабильных состояний установлено, что частота ПФ описывается активационным законом и характеризуется энергией $W\sim10^4$ K.

В экстраполяции частоты спонтанного ПФ по закону $f_{sps} \propto \exp(-W/T)$ в область $T \gtrsim T_P$ и состоит модель пайерлсовского перехода. Она оказалась плодотворной для описания размытия порогового поля вблизи $T_P$ и особенностей в сопротивлении, тепловом расширении, теплоёмкости, термоЭДС и модуле Юнга.

Важным экспериментом, подтвердившим реальность модели, стало изучение синхронизации скольжения ВЗП с ВЧ полем в соединении $NbS_3$ вблизи $T_{P1}$=360-370 K [4]. В условиях синхронизации плотность заряда, переносимого ВЗП, можно определить из отношения тока ВЗП к частоте поля $f$. Оказалось, что вблизи $T_P$ плотность заряда растёт с ростом $f$ и выходит на насыщение выше характерной частоты $f_0$. Чем выше $T$, тем выше $f_0$. Этот результат имеет простой физический смысл: если за время жизни флуктуация ВЗП успеет сдвинуться хотя бы несколько своих периодов, её движение удастся синхронизовать, а если нет – то нет. Значит, $f_0$ представляет собой оценку обратного времени жизни флуктуации ВЗП, и $f_0\sim f_{sps}$. Зависимость $f_0(T)$ при 355 K<$T$<369 K (при $T_{P1}$=367 K) описывается как $\exp(-11000\ \text{K}/T)$ [4]. Но $W\sim10^4$ K – энергия активации ПФ в $NbS_3$, известная из независимых экспериментов. Таким образом, мы подтвердили, что в области $T_P$ спонтанное ПФ описывается активационным законом, нами получена оценка $f_{sps}$.

В докладе планируется также рассмотреть модели, описывающие ПФ, в частности, – как расширение-сжатие дислокационных петель. Будет рассмотрено и более общее утверждение, согласно которому фазовый переход II рода, температура которого понижена из-за флуктуаций, имеет вид размытого перехода I рода [5].

## Литература

1. Зайцев-Зотов С.В., Покровский В.Я. // Труды XXV Всесоюзной конференции по физике низких температур, Ленинград. – 1988. – Ч.3. С. – 112.
2. Pokrovskii V.Ya. and Zaitsev-Zotov S.V. // Europhys. Lett. – 1990. – V. 13. – P. 361.
3. Pokrovskii V.Ya., Zaitsev-Zotov S.V. // Synth. Metals. – 1991. – V. 41-43. – P. 3899.
4. Zybtsev S.G, Nikonov S.A., Pokrovskii V.Ya. // Phys. Rev. B. – 2020. – V. 102. – P. 235415.
5. Покровский В.Я. // Радиотехника и электроника. – 2020. – Т. 65. – С. 1015.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.215

# Короткие аналитические выражения для учета пространственного распределения электронной плотности лиганда в теории нечетного кристаллического поля на редкоземельных ионах

**Попов Д. В.[1], Ликеров Р. Ф.[1], Еремин М.В.[1], Еремина Р. М.[1]**

[1]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

[2]*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

Используя гауссовы разложения потенциальной энергии электронов и волновых функций 4f и 5d электронов, получены короткие аналитические формулы для расчета параметров нечетного кристаллического поля на редкоземельных ионах. Расширенные зарядовые вклады в собственные параметры $a^{(1)}$, $a^{(3)}$ и $a^{(5)}$ проведены на волновых функциях Хартри-Фока пар $Pr^{3+}$ - $O^{2-}$ и $Tm^{3+}$ - $O^{2-}$. Рассчитанные зависимости от расстояния между ионами сравниваются с ожидаемыми в полуэмпирической модели обменных зарядов на связи редкоземельный ион-лиганд.

$$a_2^{(1)}(pc) = -\int_0^1 \sum_{i,j} \frac{ZRy^2 C_i S_j}{2\alpha^3} e^{-\alpha R^2 y^2} \left(\frac{45}{4}(1-y^2)^2 + 21(\alpha R^2 y^4)(1-y^2) + 3(\alpha R^2 y^4)^2\right) dy$$

$$a_2^{(3)}(pc) = 7\int_0^1 \sum_{i,j} \frac{ZRy^2 C_i S_j}{2\alpha^3} e^{-\alpha R^2 y^2} \left(-\frac{9}{2}(\alpha R^2 y^4)(1-y^2) - (\alpha R^2 y^4)^2\right) dy$$

$$a_2^{(5)}(pc) = -\frac{11}{4}\int_0^1 \sum_{i,j} \frac{ZRy^2 C_i S_j}{2\alpha^3} e^{-\alpha R^2 y^2} (\alpha R^2 y^4)^2 dy$$

$$a_2^{(1)}(ec) = -\int_0^1 \sum_{i,j,k} \frac{3C_i S_j p_k}{2\varkappa^4} b \left(\frac{35}{4}(1-y^2)^2 + \frac{7b^2}{\varkappa}(1-y^2) + \frac{b^4}{\varkappa^2}\right) e^{-\left(\frac{\gamma R}{\varkappa}-R\right)^2 \varkappa y^2} e^{-\gamma R^2} e^{\frac{\gamma^2 R^2}{\varkappa}} dy$$

$$a_2^{(3)}(ec) = -\frac{7}{4}\int_0^1 \sum_{i,j,k} \frac{3C_i S_j p_k}{2\varkappa^4} b^3 \left(-\frac{18}{\varkappa}(1-y^2) - \frac{4b^2}{\varkappa^2}\right) e^{-\left(\frac{\gamma R}{\varkappa}-R\right)^2 \varkappa y^2} e^{-\gamma R^2} e^{\frac{\gamma^2 R^2}{\varkappa}} dy$$

$$a_2^{(5)}(ec) = \int_0^1 \sum_{i,j,k} \frac{11C_i S_j p_k}{2\varkappa^6} b^5 e^{-\left(\frac{\gamma R}{\varkappa}-R\right)^2 \varkappa y^2} e^{-\gamma R^2} e^{\frac{\gamma^2 R^2}{\varkappa}} dy$$

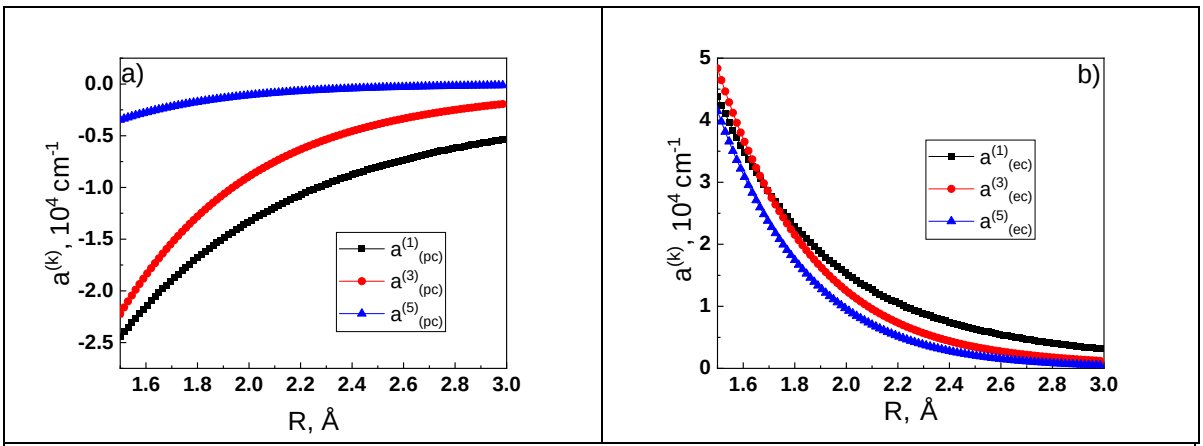



Рис. 1. Результаты расчетов a) Точечные заряды b) Вклад «плотность-плотность»

Данная работа выполнена при поддержке Фонда «Базис» № 22-1-1-59-1.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.216

# Исследование дефектов в кремнии, имплантированном цинком

**Привезенцев В.В.[1], Фирсов А.А.[1], Куликаускас В.С.[2], Затекин В.В.[2], Терещенко А.Н.[3]**

[1]*НИЦ «Курчатовский институт» - НИИСИ, 117218 Москва, Нахимовский просп., 36-1, Россия,* E-mail: v.privezentsev@mail.ru

[2]*НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына, МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия,* E-mail: vskulikauskas@gmail.com

[3]*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, 142432 Московская обл., Россия,* E-mail: tan@issp.ac.ru

В последнее время широко исследуются свойства нанокластеры (НК) металлов и их окислов в различных матрицах, поскольку такие материалы могут быть использованы в устройствах нано- и оптоэлектроники. Среди них важную роль играют НЧ цинка. В подложке Si они могут быть изготовлены, в частности, путем ионной имплантации Zn с последующей обработкой термически, импульсным лазерным облучением или с помощью ионного пучка. Здесь мы представляем исследование распределения концентрации имплантированного Zn в подложке Si и радиационных дефектов, а также их изменения во время отжигов.

Пластины CZ-Si(100) n-типа были имплантированы ионами $^{64}Zn^{+}$ с дозой $D=7\times10^{16}/см^2$ и энергией E=40кэВ. Затем образцы были отожжены в инертной среде в температурном диапазоне от 400 до 1000°C с шагом 100ºC в течение 1 часа на каждом шаге.

Распределения имплантированного цинка и радиационных дефектов в подложке исследовались методом резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов $He^{2+}$ с энергией 700 кэВ с использованием техники каналирования. Морфология поверхности изучалась с помощью растрового электронного микроскопа Coxem EM-30 PLUS в сочетании с энерго-дисперсионным анализом. Для идентификации образующихся после имплантации фаз цинка и дефектов использовалась фотолюминесценция (ФЛ) при 6К в диапазоне длин волн 350-800 нм с накачкой He-Cd лазером с длиной волны 325 нм.

Из экспериментальных спектров РОР с помощью программы SIMNRA были получены профили распределения концентрации имплантированного цинка. Из них следует, что концентрации цинка при проектном радиусе $R_p$=34 нм в максимуме распределения составляют около 15 ат.%, что гораздо выше предельного равновесного значения, потому цинк выпадает в преципитаты. Установлено, что при низких температурах отжига (400-600ºC) распределение цинка смещается вглубь кремния, т.н. наблюдается восходящая диффузия. При более высоких температурах (700-1000ºC) профили цинка смещаются к поверхности образцов, которая является для них неограниченным стоком. Из спектров РОР также получены профили вакансий и распределения смещенных атомов кремния в междоузлиях. После имплантации вблизи поверхности наблюдается аморфизованная область толщиной около 60 нм. С увеличением температуры отжига радиационные дефекты пропадают, эта область сокращается и совсем исчезает после отжига при 1000ºC. Спектры ФЛ показали наличие линии люминесценции на длине волны 380 нм, что свидетельствует об экситонной люминесценции от фазы ZnO.

Полученные результаты указывают на формирование в имплантированном слое преципитатов цинка и его оксида ZnO, причем в процессе отжигов фазовый состав имплантированного слоя изменяется.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.217

# Структура и свойства нанокомпозитных покрытий, осажденных из ускоренных ионов $C_{60}$ при наклонном падении пучка

**Пуха В. Е.[1,2], Кабачков Е.Н.[1] Ходос И.И. [3], Лукина И.Н.[4], Дроздова Е.И. [4], Черногорова О.П.[4]**

[1]*ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, Россия* E-mail: pve@icp.ac.ru

[2]*ООО "Центр Водородной Энергетики" (ПАО АФК «Система»), Черноголовка, Россия*

[3]*ИПТМ РАН, Черноголовка, Россия*

[4]*ИМЕТ РАН, Москва, Россия,*

Осаждение из ускоренных ионов $C_{60}$ с энергией 5 и 7 кэВ при температуре подложки 300-400°С приводит к формированию нанокомпозитных (НК) покрытий, состоящих из нанонокристаллов графита (НГ) размером 1-2 нм, заключенных в алмазоподобную матрицу [1]. При нормальном угле падения ионов $C_{60}$ возникает аксиальная текстура роста, когда графеновые плоскости НГ перпендикулярны поверхности подложки. Изменение угла падения ионного пучка изменяет направления роста графеновых слоев [2]. В докладе рассмотрена возможность управления ориентацией базовых плоскостей в зернах нанографита в процессе роста покрытия.

Покрытия осаждались в вакуумной камере с гетероионной откачкой и базовым давлением $10^{-8}$ Торр на Si подложках. Температура подложек Ts варьировалась от 300 до 400ºС. В качестве рабочей среды для ионного источника использовались пары фуллерена $C_{60}$. После выхода из источника пучок фокусировался и ограничивался системой электростатических линз и щелей и направлялся в магнитный спектрометр (индукция магнитного поля 0.9 Тл), где отсекались ионы малых масс и энергий, а также пространственно разделялись ионы $C_{60}$ различного типа (димеры, одно-, двух- и трехзарядные молекулы). Угол падения пучка определялся наклоном подложки и составлял 90, 45 и 70°. Покрытия формировались при энергии $C_{60}$ ионов 5 и 7 кэВ. Структура, состав и химические связи покрытий исследовались методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), нанотвердость H и модуль Юнга E определялись наноиндентированием, рельеф АСМ.

При 90° падении пучка в НК покрытии проявлялась сильная аксиальная текстура, когда нормаль к базовым плоскостям графита параллельна поверхности подложки. При наклоне ионного пучка эта текстура сохранялась, но появлялась дополнительная преимущественная ориентация НГ базовые плоскости, которых располагались вдоль направления ионного пучка. Графит является анизотропным материалом, и ориентация базовых плоскостей влияет на механические свойства пленок и уровень сжимающих напряжений. Мы полагаем, что такая ориентация нанокристаллов должна проявляться в электрических свойствах покрытий, что может быть использована в наноэлектронике. Исследование выполнено частично в рамках госзадания ФИЦ ПХФ и МХ РАН (№ государственной регистрации 124013000692-4) и госзадания ИМЕТ РАН (№ 075-00319-25-00).

## Литература

1. Pukha, V. E., Zubarev, E. N., Drozdov, A. N., Pugachov, A. T., Jeong, S. H., & Nam, S. C.//Journal of Physics D: Applied Physics. – 2012. – Т. 45. – №. 33. – С. 335302 D:
2. Pukha, V. E., Pugachov, A. T., Churakova, N. P., Zubarev, E. N., Vinogradov, V. E., & Nam, S. C. //Journal of nanoscience and nanotechnology. – 2012. – Т. 12. – №. 6. – С. 4762-4768.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.218

# Замедление и ускорение диффузии в высокоэнтропийном сплаве тугоплавких металлов с ОЦК решёткой

**Разумовский М. И. [1], Бокштейн Б. С. [2], Логачёва А. И. [1], Логачев И. А. [1]**

*[1]АО «Композит», г. Королёв, Россия, тел.: (+7 495) 513 20 75, факс: (+7 495) 516 06 17, e-mail: info@kompozit-mv.ru;*

*[2]Кафедра физической химии, НИТУ МИСИС, г. Москва, Россия*

*тел.: (+7 495) 955 00 32, факс: (+7 499) 236 21 05, e-mail: bokstein@mail.ru*

На первых этапах исследований высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) предполагалось, что эти сплавы характеризуются замедлением диффузии (sluggish diffusion). Однако опубликованные в последнее время результаты, по-видимому, не подтверждают эту гипотезу. Отметим, что большинство экспериментальных исследований относится к сплавам с ГЦК решёткой. Исследований ВЭС с ОЦК решеткой – единицы (или очень мало).

В настоящей работе методом рентгеноспектрального микроанализа исследована взаимная диффузия в диффузионных парах Ti-Ta и Ti-ВЭС (эквиатомный сплав 6 тугоплавких металлов Zr-Hf-Ta-Nb-Mo-Ti с ОЦК решеткой) при температурах 1473, 1573 и 1673 К. Для приготовления диффузионных пар использована методика низкотемпературной сварки пластин титана и цилиндрических образцов ВЭС. Определены методом Хэлла коэффициенты диффузии в Ti всех компонентов, как в отдельности, так и в составе сплава и сравнены между собой.

Результаты исследования приведены в таблице. Для проверки справедливости или несправедливости гипотезы о замедлении диффузии в высокоэнтропийном сплаве тугоплавких металлов с ОЦК решеткой получены коэффициенты взаимной диффузии каждого из элементов сплава в паре Ti/ВЭС в области Ti (с близким к нулю содержанием всех элементов кроме титана) и проведено их сравнение с коэффициентами диффузии тех же элементов в парах Ti/Hf, Ti/Nb, Ti/Ta, Ti/Mo, Ti/Zr, Ti/Ti. Для каждой температуры и для каждого элемента – компонента сплава в верхней строчке соответствует коэффициенту диффузии (наши данные) для области титана, а в нижней строчке – для тех же элементов, но в отдельности (не в составе сплава) – в чистом титане (выделены курсивом в таблице) по литературным источникам.

**Таблица. Коэффициенты диффузии**

| **Элемент** | **Hf** | **Nb** | **Ta** | **Mo** | **Zr** | **Ti** |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Температура (К)** | $D \cdot 10^{-13}$ ($м^2/с$) | | | | | |
| 1673 | 17,0 | 8,4 | 15,0 | 8,0 | 8,2 | 3,3 |
| ***по литературным данным*** | ***30,8*** | ***5,7*** | ***0,16*** | ***5,7*** | ***0,22*** | ***29,9*** |
| 1573 | 8,5 | 5,5 | 3,6 | 3,1 | 3,2 | 2,4 |
| ***по литературным данным*** | ***18,2*** | ***1,4*** | ***0,04*** | ***1,4*** | ***0,05*** | ***16,5*** |
| 1473 | 2,2 | 1,1 | 1,3 | 0,9 | 1,6 | 0,33 |
| ***по литературным данным*** | ***10,0*** | ***0,29*** | ***0,01*** | ***0,29*** | ***0,01*** | ***8,4*** |
| Сравнение с диффузией элемента в Ti | *Замедл.* | *Ускор.* | *Ускор.* | *Ускор.* | *Ускор.* | *Замедл.* |

При анализе результатов видно, что изменение диффузионной подвижности различных элементов при переходе от диффузии в паре Ti / ВЭС к области Ti в парах Ti / Hf, Ti / Nb, Ti / Ta, Ti / Mo, Ti / Zr, Ti / Ti неоднозначно. Для Nb, Ta и Mo диффузия ускоряется, а для Hf и Ti − замедляется примерно в 2 - 4 раза. Исключение составляет цирконий, подвижность которого ускоряется более чем на порядок. Zr также обладает очень низким значением энергии активации и, заметим, что ускоряются элементы, которые медленнее движутся при самодиффузии при сходственных температурах.

Таким образом, результаты исследования свидетельствуют скорее об отсутствии эффекта замедления диффузии в ВЭС на основе тугоплавких металлов с ОЦК решеткой.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.219

# Исследование гашения фотолюминесценции в пористом кремнии, вызванного иммерсионным осаждением Cu и Ag

**Рустамов Ф. А., Дарвишов Н. Х., Мамедов М. З., Боброва Е.Ю., Гасанова Р. С.**

*Бакинский Государственный Университет, НИИ Физических Проблем, Отдел Физики Конденсированного Состояния, Баку, Азербайджан,*
farhad.rustamov@bsu.edu.az

Исследовано влияние иммерсионного осаждения металлов Cu и Ag на фотолюминесцентные свойства тонкого слоя пористого кремния (ПК). Формирование образцов ПК проводилось чисто химическим травлением в растворе HF : $HNO_3$ : $CH_3COOH$ в объемном отношении 1200:1:800. Инкубационное время составляло 2 мин, а реакция формирования ПК проводилась в течении 9 мин. Толщина таких пленок составляет примерно 150 nm и имеет пористость свыше 70%. Далее проводилось осаждение металлов Cu и Ag из водных растворов солей $CuCl_2$, $CuSO_4$ и $AgNO_3$ ($10^{-3}$M) жидкостным химическим, т.е. безэлектродным иммерсионным осаждением в течении 1 мин. Проанализированы Фурье спектры и спектры фотолюминесценции образцов до и после осаждения. Установлено, что осаждение этих металлов приводит к гашению фотолюминесценции. При этом удаление этих металлов кислотным травлением не востонавливает эту фотолюминесценцию. Анализ Фурье спектров показывает, что гашение фотолюминесценции коррелирует с исчезновением полосы поглощения в диапазоне 2000-2300 $см^{-1}$, соответствующей колебаниям водорода, которые пассивируют болтающие связи на поверхности пористого кремния и блокируют появление уровней приводящих к безизлучательных переходов. Кроме этого гашение фотолюминесценции коррелирует с появлением нехарактерного для пористого кремния нового пика поглощения в Фурье -спектре при 1221 $см^{-1}$. Установлено, что этот пик поглощения появляющийся под воздействием осажденного металла и сохраняется даже после удаления осажденного металла кислотным травлением. Т.е. осажденный метал способствует появлению этого пика поглощения, но сам не участвует в соответствующих связях. Способность пористого кремния мгновенно растворяться в разбавленном HF после осаждения металла, а также близость этого пика при 1221 $см^{-1}$ к валентным колебаниям Si-O-Si при 1172 $см^{-1}$, предполагает связь этого пика с колебаниями кислорода. Корреляция гашения фотолюминесценции с возникновением пика поглощения при 1221 $см^{-1}$ указывает на деформированный характер этих кислородных связей. Деформированные связи приводят к образованию центров безызлучательной рекомбинации, которые вызывают гашение фотолюминесценции.

## Литература

1. F.A. Rustamov, N.H. Darvishov, V.E. Bagiev, M.Z. Mamedov, G.M. Eyvazova, E.Y. Bobrova, H.O. Qafarova. J. Lumin. 195 (2018) 49-53.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.220

# Спин-орбитальное взаимодействие и магнетизм в эпитаксиальном графене

**Рыбкина А. А.[1], Тарасов А. В.[1], Гогина А. А.[1], Пудиков Д. А.[1], Шикин А. М.[1], Рыбкин А. Г.[1]**

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия,* a.rybkina@spbu.ru

Управление спиновой структурой в графене, т.е. спиновым расщеплением его электронных состояний и топологически нетривиальной запрещенной зоной в точке Дирака – одна из важнейших проблем материаловедения на сегодняшний день, которую необходимо решить для использования графена в спинтронике, особенно для реализации бездиссипативного транспорта. Ранее в теоретических работах были предсказаны квантовый спиновый эффект Холла [1] и квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [2,3] в графене. Для того чтобы перейти в графене к квантовым версиям эффекта Холла без внешнего воздействия (магнитного поля или электромагнитного излучения) требуется модификация его электронной структуры, например, с помощью эффекта близости с тяжелыми и магнитными металлами.

В данной работе показана возможность одновременного усиления спин-орбитального и обменного взаимодействий в графене в результате контакта с атомами тяжелых и магнитных металлов. Исследования проводились с использованием широко набора методов: ARPES, XPS, STM и DFT. Так, было показано, что интеркаляция атомов Au или Pt под эпитаксиальный графен, выращенный на металлической или полупроводниковой подложках, приводит к гигантскому спиновому расщеплению по типу Рашбы дираковского конуса электронных состояний в графене. При этом в системе графен на подложке (монослой Au)/Co(0001) удалось достичь одновременного влияния спин-орбитального и магнитного обменного взаимодействий подложки на электронную структуру графена и получить материал, названный магнитно-спин-орбитальным графеном [4,5]. Контакт с интеркалированным слоем Au приводит к усилению в графене спин-орбитального взаимодействия, а формирование периодической структуры петлевых дислокаций в поверхностном сплаве Au/Co приводит к индуцированию обменного взаимодействия в графене и ферримагнитному упорядочению на атомах углерода двух его неэквивалентных подрешеток. Показано, что система Au/Co со структурными дислокациями как покрытая графеном, так и без него характеризуется спин-поляризованными дираконодобными коническими состояниями в Г точке, исследование которых представляет отдельный интерес. А наличие дополнительных адатомов золота под графеном не только не разрушает ферримагнитный порядок в графене, но и усиливает индуцированное спин-орбитальное взаимодействие Рашбы в графене.

Полученные результаты показывают перспективность экспериментальной реализации фазы КАЭХ в графене посредством эффекта близости.

Работа выполнена при поддержке гранта СПбГУ №125022702939-2. Авторы выражают благодарность Научному парку СПбГУ за помощь в проведении исследований и использование оборудования.

## Литература

1. Kane C.L., Mele E.J. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 95. – P. 226801.
2. Qiao Z., Yang S.A., Feng W. et al. // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 82. – P. 161414.
3. Offidani M., Ferreira A. // Phys. Rev. Lett. – 2018. – Vol. 121. – P. 126802.
4. Rybkin A.G., Rybkina A.A., Otrokov M.M. et al. // Nano Lett. – 2018. – Vol. 18. – P. 1564.
5. Rybkin A.G., Tarasov A.V., Rybkina A.A. et al. // Phys. Rev. Lett. – 2022. – Vol. 129. – P. 226401.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.221

# Структура и свойства новых электропроводных сплавов Al–Zr–Sm и Al–Sc–Sm

**Рыжакова О.М., Барков Р.Ю., Коновалова С.М.**
*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия,* ryzhakovaom@edu.misis.ru

Алюминиевые сплавы играют важную роль в современных технологиях, особенно в области электропередачи, благодаря невысокой плотности и коррозионностойким свойствам. Однако увеличение потребления электроэнергии требует от этих сплавов способности передавать большие токи, что приводит к повышению температуры и снижению механических свойств.

Скандий и цирконий повышают прочность алюминиевых сплавов благодаря образованию наноразмерных частиц $Al_3Sc$ или $Al_3Zr$. В работе рассматриваются новые электропроводные сплавы на основе Al–Zr и Al–Sc с добавлением редкоземельного элемента самария, который образует $L1_2$-дисперсоиды, состава $Al_3(Sc, Sm)$ или $Al_3(Zr, Sm)$, частично замещая в них скандий или цирконий.

В работе исследовано влияние добавки 0,3% самария на исходную структуру, фазовый состав и твердость сплавов Al – 0,2% Sc и Al – 0,3% Zr в исходном состоянии и в процессе термической обработки при температурах от 270 до 480 °C в течение разного времени до 100 часов.

В литой структуре сплавов наблюдаются дисперсные включения, расположенные по границам зерен и дендритных ячеек, обогащенные только самарием. Данные частицы идентифицированы как $Al_3Sm$ в соответствие с рентгеновскими исследованиями и фазовыми диаграммами. Скандий и цирконий полностью растворены в твердом растворе алюминия, также в нем определено 0,1–0,2% самария.

Установлено, что при увеличении времени выдержки, оба сплава упрочняются при всех температурах. Легирование 0,3 % самария привело к увеличению исходной твердости сплавов до 20 HV. Также, добавление 0,3% самария обеспечивает прирост твердости больший, чем в сплавах Al – 0,3%Zr и Al – 0,2%Sc, за счет выделения когерентных алюминиевой матрице дисперсоидов фаз $Al_3(Sc,Sm)$ или $Al_3(Zr,Sm)$.

Оптимальным режимом термообработки для сплава Al – 0,2Sc% – 0,3%Sm является выдержка в течение 3 часов при 300 °C, так как при ней было достигнуто максимальное значение твердости 64 HV. Для сплава Al – 0,3%Zr – 0,3%Sm – 100 ч при 360 °C, обеспечивает максимальную твердость равную 44 HV.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда 24-79-00036 (https://rscf.ru/en/project/24-79-00036/)

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.222

# МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ В ГЕТЕРОГЕННОЙ АМОРФНОЙ ФАЗЕ

**Чиркова В.В., Волков Н.А. Абросимова Г.Е.**
*ИФТТ РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черноголовка, Россия,* valyffkin@ispp.ac.ru

Известно, что формирование наноструктуры в аморфной фазе приводит к улучшению свойств сплавов. В связи с этим, огромное количество работ посвящено исследованию путей формирования наноструктуры с различными структурными параметрами (количеством, размером нанокристаллов). Одним из способов формирования наноструктуры является добавление легирующих компонентов (небольшое изменение состава). Этот способ хорошо продемонстрирован на сплавах типа Finemet. В таких сплавах формирование наноструктуры происходит при добавлении небольшого количества меди и ниобия. Медь образует неоднородности (кластеры), на которых происходит зарождение нанокристаллов, а ниобий препятствует их росту, что способствует образованию мелкокристаллической (нанокристаллической) структуры. Ряд исследований показывает, что возможен другой механизм облегченного образования нанокристаллов, который связан со структурой легирующих компонентов.

Показано, что легирующие компоненты могут образовывать упорядоченные области в аморфной фазе, на которых облегчается зарождение нанокристаллов со структурой, подобной структуре легирующих компонентов («наследование» структуры). Формирование нанокристаллов на упорядоченных областях (неоднородностях аморфной структуры) приводит к изменению размеров нанокристаллов.

Другим способом формирования наноструктуры является пластическая деформация. Аморфная фаза после деформации также является гетерогенной: аморфная фаза в полосах сдвига и в окружающей, практически недеформированной матрице. Аморфная фаза в полосах сдвига характеризуются пониженной плотностью (повышенным содержанием свободного объема) по сравнению с окружающей аморфной фазой.

Установлено, что образование нанокристаллов существенно облегчается в деформированных сплавах, то есть в сплавах с повышенным содержанием свободного объема. При одинаковых условиях термообработки доля нанокристаллов в предварительно деформированных образцах больше, чем в образцах без предварительной деформации.

Таким образом, в гетерогенной аморфной фазе образование нанокристаллов облегчено. В первом случае образование неоднородностей (областей облегченной кристаллизации) обусловлено образованием упорядоченных областей, обогащенных компонентами, нерастворимыми в основном металлическом компоненте сплава и являющихся местами потенциального зарождения кристаллов. Образующиеся нанокристаллы наследуют структуру упорядоченных областей, т.е. структуру легирующих компонентов. Во втором случае облегченное образование нанокристаллов обусловлено изменением плотности аморфной фазы в полосах сдвига, т.е. образованием областей с повышенным содержанием свободного объема. Облегченная кристаллизация в полосах сдвига и их окрестностях при этом обусловлена ускорением диффузионного массопереноса.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.223

# О МЕТОДЕ ОЦЕНКИ ИЗМЕНЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ СВОБОДНОГО ОБЪЕМА В АМОРФНОЙ ФАЗЕ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ

**Чиркова В.В. Абросимова Г.Е**
*ИФТТ РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черноголовка, Россия,* valyffkin@ispp.ac.ru

Наиболее распространенным методом получения аморфных сплавов является метод скоростной закалки расплава. Полученные таким методом аморфные сплавы имеют меньшую плотность по сравнению с их кристаллическими аналогами. Для описания структуры аморфной фазы используется термин «свободный объем» (увеличенное расстояние между атомами). Свободный объем является важной характеристикой структуры аморфной фазы, которая применяется при описании

(i) структурной релаксации аморфных сплавов (уменьшение содержания свободного объема в аморфной фазе при нагреве или вылеживании [1]);

(ii) структурного омоложения аморфных сплавов (перераспределение или увеличение содержания свободного объема при криотермоциклировании/ультразвуковой обработке [2]);

(iii) механизмов деформации аморфных сплавов и образования полос сдвига (увеличение содержания свободного объема в аморфной фазе при деформации [3]);

(iv) фазовых превращений, происходящих в аморфных сплавах (ускорение процессов кристаллизации в сплавах с повышенным содержанием свободного объема [4]);

(v) физических свойств аморфных сплавов (охрупчивание сплавов при уменьшении содержания свободного объема [5]).

Перечисленные примеры показывают, что при исследовании корреляции структуры и свойств аморфных сплавов важным моментом является определение изменения содержания свободного объема в аморфной фазе.

Работа посвящена оценке изменения содержания свободного объема при деформации аморфных сплавов на основе алюминия. Оценка изменения содержания свободного объема проводилась как по данным рентгеноструктурных исследований (изменение радиуса первой координационной сферы), так и по новой методике с использованием метода сканирующей электронной микроскопии (анализу ступенек, представляющих собой выходы полос сдвига на поверхность деформированных аморфных сплавов).

## Литература

1. Egami T. // Mater. Res. Bull. – 1978. – V. 13. – № 6. – P. 557-562.
2. Guan H., Li M. // Mater. Lett. – 2021. – V. 300. – 130195.
3. Astanin V., Gunderov D., Titov V., Asfandiyarov R. // Metals. – 2022. – V. 12. – 1278.
4. Abrosimova G., Chirkova V., Volkov N., Straumal B., Aronin A. // Coatings. – 2024. – V. 14. – 116.
5. Chen Z.Q., Huang L., Wang F., Huang P., Lu T.J., Xu K.W. // Mater. Des. – 2016. – V. 109. – P. 179-185.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.224

# Математическое моделирование образования конденсатогидратов

**Самарин М. А.[1], Шостак Н. А.[2]**
*ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет», г. Краснодар, Россия, [1]samarin1901@yandex.ru, [2]nikeith@mail.ru*

Представлена модель образования гидратов в системе фазовых состояний сжиженный газ – вода, находящейся в расслоенном состоянии или в виде эмульсий. Основным преимуществом данной модели является то, что она подходит для большинства известных гидратообразователей в сжиженном состоянии и имеет достаточную степень точности.

Равновесные термобарические условия образования гидратов индивидуальных (однокомпонентных) сжиженных газов находятся из параболической аппроксимации [1]. Согласно настоящей модели, в процессе образования конденсатогидратов вокруг молекулы сжиженного газа упорядочено группируются ассоциаты молекул воды, формируя кластер. В модели принимается, что внутри полости каждого кластера находится одна поглощенная молекула. В результате процесса формирования кластера его поверхность становится твердой.

Внутри кластера сохраняются термобарические условия, соответствующие газу, находящемуся в жидком состоянии. Распределение вещества между кристаллической и жидкой фазами должно происходить по закону, аналогичному распределению между газообразной и жидкой фазами (закон Генри – Дальтона) и между двумя жидкими фазами (закон Бертло – Нернста). Тогда компонентные составы будут связаны между собой посредством констант фазового равновесия. При этом необходимо учитывать, что процессы изоморфной кристаллизации в зависимости от условий могут приводить к гомогенному или гетерогенному распределению вещества между твердой и жидкой фазами. При этом гомогенным считают [2] распределение, которое характеризуется установлением термодинамического равновесия между кристаллической решеткой и системой.

Процесс поглощения кластером газа можно уподобить процессу классической адсорбции, в котором адсорбтив (сжиженный газ) поглощается адсорбентом (твердой поверхностью кластера), становясь внутри кластера адсорбатом. Такая аналогия дала возможность использовать константы Ленгмюра для определения степеней заполнения *i*-ым компонентом газа малых и/или больших полостей в кристаллических решетках из совмещенных уравнений И. Ленгмюра и Дж. Дальтона.

Полная энергия, выделяемая при образовании гидратов сжиженного многокомпонентного газа, рассчитывается как сумма энергии, выделяемой при поглощении компонентов сжиженного газа и паров воды полостями, и энергии образования кристаллической решетки гидратов.

Полученные расхождения данной модели с экспериментальными данными в среднем не превышают 2,7 %, что позволяет утверждать о корректности и адекватности разработанной модели.

## Литература

1. Шостак Н.А., Самарин М.А. Метод определения равновесных термобарических параметров существования гидратов сжиженных газов // Химическая физика и мезоскопия. 2025. Т. 27, № 1. С. 8-16.
2. Никитин Б.А. Избранные труды / Изд-во Акад. наук СССР. – 1956. – 349 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.225

# Перестройка атомной структуры в композите Cu-NbTi под действием пакетной гидроэкструзии

**Самойленко З.А.[1], Ивахненко Н.Н.[2,3,4]*, Пушенко Е.И.[1], Бадекин М.Ю.[5], Чернявская Н.В.[1], Мачнева Т.В.[3], Панков К.Н.[4]**

*[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение "Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина", Донецк, Россия*
*[2]Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева", Москва, Россия*
*[3]Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Российский Национальный Исследовательский Медицинский Университет им. Н.И. Пирогова", Москва, Россия*
*[4]Московский технологический университет связи и информатики "МТУСИ", Москва, Россия*
*[5]Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Донецкий государственный университет", Донецк, Россия*
**e-mail: yulduz19.77@mail.ru*

Сплавы меди, ниобия и титана представляют собой композиты, используемые в различных технических областях благодаря их уникальным механическим свойствам, таким как высокая прочность и устойчивость к деформации. Медь служит основным компонентом, обеспечивая хорошую проводимость, тогда как добавки ниобия и титана повышают твердость и механическую стабильность материала.

Методом рентгеноструктурного анализа [1] исследовали закономерности изменения атомной структуры в композиционных материалах Cu-NbTi при P=75 атм, скорости вращения подвижного Пуассона 0.5 об./мин. и числе оборотов вращения n=(0,5-5) об. в результате действия пакетной гидроэкструзии на образцы.

Для исследования эволюции атомной структуры многокомпонентных композитов Cu-NbTi были проанализированы дифракционные картины в интервале углов θ=(25-80)° от образцов. На дифракционных картинах обнаружено присутствие всех указанных компонентов материала, а именно медь, ниобий, титан. Наиболее интенсивные Дебаевские линии, образованные в результате когерентного рассеяния рентгеновских лучей от семейств кристаллографических плоскостей с дальним атомным порядком, соответствуют кристаллической фазе ГЦК-структуры меди [2].

Полученные результаты показывают, что небольшая пластическая деформация после гидроэкструзии привела к существенному изменению интерметаллидных фаз $Cu_3Ti_2$ и $NbTi_4$, размеров и разнообразию в кластерной структуре в виде увеличения наборов (hkl) в образце композита Cu-Nb-Ti. Эти результаты показывают, что пластическая деформация способствовала усилению химических сил межатомного взаимодействия благодаря усилению кристаллического поля, благодаря чему в образце Cu-Nb-Ti получили более дисперсную, но более разнообразную по химическим связям и при этом более гомогенную по размерам кластерных группировок среду композита, что благоприятно для его физических свойств.

## Литература

1. Самойленко З.А., Пушенко Е.И., Ивахненко Н.Н., Варюхин В.Н., Шемченко Е.И // Журнал технической физики. – 2005. – Т. 75 – № 8 – С. 132-135.
2. Самойленко З.А., Ивахненко Н.Н., Пушенко Е.И., Белоусов Н.Н., Чернявская Н.В., Бадекин М.Ю. // Неорганические материалы. – 2023 – Т. 59 – № 9 – С. 972-979.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.226

# Применение модифицированного метода молекулярной статики для изучения диффузии вакансий и атомов в системе Fe–Cr с ОЦК и ГЦК структурами

**Сергеев Г. В.[1], Назаров А. В.[2]**
[1] *НИЯУ МИФИ, Москва, Россия, sergeevgv99@mail.ru*
[2] *НИЯУ МИФИ, Москва, Россия, avn46@mail.ru*

Для изучения зависимостей диффузионных характеристик от состава в сплавах Fe-Cr используется модифицированный метод молекулярной статики (МММС) [1]. В МММС основная расчетная ячейка окружена атомами, внедренными в упругую среду. Смещения этих атомов находятся с помощью решений уравнений теории упругости для системы с вакансией, а положения атомов в основной расчетной ячейке определяются с помощью стандартной вариационной процедуры. При этом атомная структура в основной расчетной ячейки и смещения атомов в упругой зоне находятся самосогласованным образом в ходе нескольких итераций. Данная модель позволяет более точно рассчитывать диффузионные характеристики в металлах [2]. При моделировании использовались многочастичные потенциалы типа EAM для ОЦК [3] и ГЦК [4] структур. Вычисление высоты активационного барьера производилось при перетаскивании атома в направлении вакансии и нахождении максимального значения изменения энергии системы на этом пути. Результаты приведены на рисунке 1.

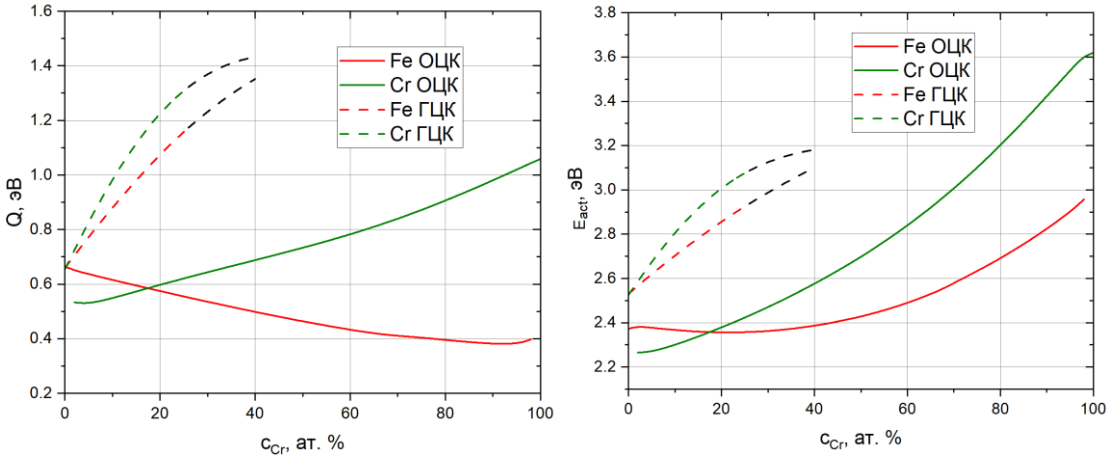



Рисунок 1 – Зависимость высот барьеров (слева) и активационной энергии (справа) от состава в сплаве Fe-Cr (Результаты моделирования, обозначенные черным цветом, соответствуют данным для метастабильной области).

Из результатов моделирования (рисунок 1) следует, что зависимость высот барьеров для атомов железа в ОЦК и ГЦК структурах отличается качественно – в первом случае при увеличении массовой доли хрома высота барьера уменьшается, во втором наоборот – увеличивается. Зависимости активационных энергий от состава схожи для обоих структур – быстрый монотонный рост с увеличением атомной доли атомов хрома. Причём, для атомов хрома эта энергия возрастает более чем в 1.5 раза.

## Литература

1. Valikova, I. V., and A. V. Nazarov. *Phys.Met.&Metallography* 105.6 (2008): 544-552.
2. Valikova, I. V., and A. V. Nazarov. *Phys.Met.&Metallography* 109 (2010): 220-226.
3. Bonny, Giovanni, Nicolas Castin, and Dmitry Terentyev. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 21.8 (2013): 085004.
4. Olsson, Pär, et al. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* 72.21 (2005): 214119.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.227

# О МЕХАНИЗМЕ СПАРИВАНИЯ В ДВУХЩЕЛЕВОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ $ZrB_{12}$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

**Случанко Н. Е.[1], Азаревич А. Н.[1], Богач А. В.[1], Болотина Н. Б.[2], Хрыкина О. Н.[2], Гаврилкин С. Ю.[3], Цветков А. Ю.[3], Габани С.[4], Флахбарт К.[4], Кузнецов А. В.[5]**

[1]*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия, nes@lt.gpi.ru*
[2]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия, nb_bolotina@mail.ru*
[3] *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия, gavrs@lebedev.ru*
[4]*Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия, gabani@saske.sk*
[5]*НИЯУ МИФИ, Москва, Россия, AVKuznetsov@mephi.ru*

Недавно было установлено, что в сверхпроводниках $LuB_{12}$ и $ZrB_{12}$ ян-теллеровская структурная неустойчивость борного каркаса приводит к возникновению динамических зарядовых страйпов [1-2]. Исследование транспортных, термодинамических свойств [1-2] и $\mu SR$-спектров [3] в $ZrB_{12}$ позволило авторам [1-3] сделать выводы: (*i*) о двухщелевой сверхпроводимости *s*-типа в грязном пределе, (*ii*) электронном фазовом расслоении наномасштаба (динамические зарядовые страйпы), (*iii*) возникновении псевдощели, (*iv*) анизотропии критических полей и (*v*) формировании волн зарядовой плотности [4]. Важным представляется выяснение причин огромных различий в сверхпроводящих характеристиках $ZrB_{12}$ ($T_c$~6K) и $LuB_{12}$ ($T_c$~0.4K) при сравнимых параметрах зоны проводимости и фононных спектров [1].

В настоящей работе впервые выполнены прецизионные рентгеноструктурные измерения при температурах 30-400K в сочетании с исследованиями теплоемкости, теплопроводности, сопротивления, коэффициентов Холла и Зеебека в $ZrB_{12}$ и $LuB_{12}$. Полученные результаты позволяют предложить новый нетрадиционный механизм сверхпроводимости в $ZrB_{12}$, в основе которого лежит формирование квази-одномерных (1D) цепочек динамических страйпов на 2*p*-состояниях бора. Коллективная ян-теллеровская мода с энергией ~50 мэВ синхронизует ответственные за спаривание носителей поперечные квазилокальные моды ионов Zr (см. рис. 1), приводя к реализации квази-1D сверхпроводимости с длиной когерентности $\xi$~740Å [2,4] в 3D металле $ZrB_{12}$ с *гцк* кристаллической структурой. В $LuB_{12}$ динамические зарядовые страйпы реализуются исключительно на 5*d*-2*p* состояниях Lu и бора, соответственно, что и является причиной принципиальных различий между данными сверхпроводниками.

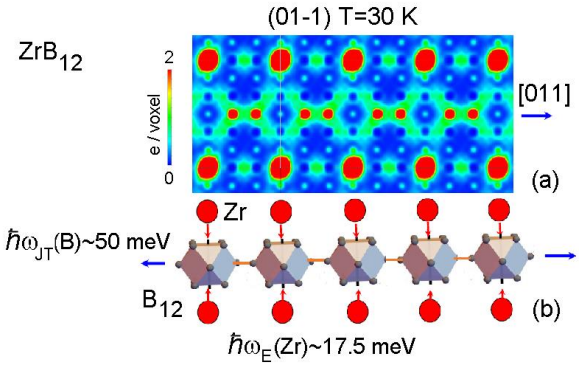



**Рис.1.** Распределение электронной плотности в $ZrB_{12}$, восстановленное методом максимальной энтропии при $T$=30 K, и схематическое изображение фрагмента структуры и колебаний атомов вдоль и поперек цепочек.

## Литература

1. Azarevich A., A. Bogach, V. Glushkov, et al. // Phys. Rev. B. – 2021. – V. 103. – P. 104515.
2. Bolotina N. B., O. N. Khrykina, et al. // Phys. Rev. B. – 2022. – V. 105. – P. 054511.
3. Kirschner F. K. K., N. E. Sluchanko, et al. // Phys. Rev. B. – 2018. – V. 98. – P. 094505.
4. Bolotina N. B., O.N. Khrykina, et al. // Solid St. Sci. – 2023. – V. 142. – P. 107245.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.228

# Магнетофононный резонанс в двумерных структурах с квантовой ямой

**Смирнов И. Ю., Дричко И. Л., Сафончик М. О., Шахов М. А., Чернов М. Ю., Соловьев В. А.**

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,*
ivan.smirnov@mail.ioffe.ru

Исследован магнетофононный резонанс (МФР) сопротивления, связанный с резонансным рассеянием электронов на оптических фононах при $T$ = (77-300) К в структурах $n$-GaAs/AlGaAs и $n$-$In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$ с квантовой ямой (КЯ). Если положение осцилляций МФР в магнитном поле в структурах $n$-GaAs/AlGaAs не зависит от их строения, то в структурах $n$-$In_xGa_{1-x}As$ с квантовой ямой положение осцилляций в магнитном поле зависит от величины x, размера квантовой ямы, концентрации носителей, а также от природы интерфейса (InP или InAlAs) [1].

В этой работе представлены результаты исследований двух структур $n$-GaAs/AlGaAs с КЯ и барьерами из короткопериодных сверхрешеток AlAs/GaAs. В 1-ой - ширина ямы - 26 нм, с двумя зонами пространственного квантования, в которых $n_1$= $6.2\times10^{11}$ см$^{-2}$ и $n_2$=$1.9\times10^{11}$ см$^{-2}$, а во 2-ой - ширина ямы 46 нм и концентрация $n$=$8.1\times10^{11}$ см$^{-2}$ с двумя энергетическими подзонами. Подвижность в структурах составляет ~$10^6$ см$^2$/Вс (4.2К). В обеих структурах в импульсном магнитном поле до 30 Тл длительностью ~ 12 мсек при $T$= (77-240) К наблюдались осцилляции сопротивления, соответствующие МФР, т. к. их положение в магнитном поле соответствовало условию $N\hbar\omega_c=\hbar\omega_0$, где $\omega_c$ - циклотронная частота, $\omega_0$=293 см$^{-1}$ – частота продольного оптического фонона, ($\hbar\omega_0$ =36.5 мэВ), $N$-номер осцилляции. Если амплитуды последних осцилляций с $N$=2÷4 уменьшаются в зависимости от роста магнитного поля, как $exp(-\gamma\omega_0/\omega_c)$, $\gamma\approx1.5$ из эксперимента для $T$=150 К, то осцилляция с $N$=1 ($B$=22 Тл) очень мала по амплитуде, что, по-видимому, связано с преобладанием неупругого рассеяния носителей над упругим в исследуемой температурной области.

Исследуемые метаморфные структуры $n$-$In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$ были выращены на подложке GaAs и легированы Te. Ширина ямы $In_{0.75}Ga_{0.25}As$ составляла 30 нм, $n$~$6\times10^{11}$ см$^{-2}$, подвижность ~$2\times10^4$ см$^2$/(Вс) ($T$=77 К). В магнитном поле в этих структурах наблюдались осцилляции МФР, что позволило определить энергию оптических фононов $\omega_0$ = (237±4) см$^{-1}$, если использовать в вычислениях значение эффективной массы $m^*/m_0$ =0.04. Однако в спектрах МФР этих структур при $T$=77 К наблюдались «дополнительные осцилляции», которые пропадали при повышении температуры. При выращивании структур с ямой $n$-$In_xGa_{1-x}As$ часто возникают слои с проводимостью, параллельные яме. Если полагать, что в исследованных структурах слой легирующего Te участвует в проводимости, то наиболее вероятным кажется, что «дополнительные осцилляции» связаны с МФР теллура. Если использовать результаты работы [2], в которой определено положение первой осцилляции MPR для 3-х мерного Te и положение 2-ой и 3-ей осцилляций, измеренных нами, то частота оптического фонона составляет $\omega_0$ = $1.3\times10^{13}$ сек$^{-1}$, что на 20 % отличается от величины $1.6\times10^{13}$ сек$^{-1}$ [2], при этом максимальные амплитуды в МФР наблюдались в [2] при $T$~77 К. Однако это объяснение требует дальнейших доказательств.

## Литература

1. Nicholas R.J. // Modern Problems in Condensed Matter Sciences ed. by G. Landwehr and E.I. Rashba - North-Holland. – 1991.- Т. 27.2. - С. 777-816.
2. Машовец Д.В., Шалыт С.С. // Письма в ЖЭТФ. – 1966. - Т. IV. - №9. - С. 362-364.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.229

# АДСОРБЦИЯ ВОДОРОДА НА ДЕКОРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

**Созыкин С. А.**[1]
[1]*Южно-уральский государственный университет, Челябинск, Россия, sozykinsa@susu.ru*

Водород выступает перспективным экологически безопасным источником энергии, но его практическое применение ограничено отсутствием безопасных, компактных и эффективных систем хранения водорода. В качестве одного из вариантов рассматривают адсорбцию водорода углеродными поверхностями, декорированными атомами металла [1]. Это связано с тем, что углеродные материалы (графен, углеродные нанотрубки, пористый углерод) обладают большой удельной поверхностью, но слабо связывают молекулярный водород. Декорирование этих материалов титановыми [2] или платиновыми [3] наночастицами улучшает их способность к адсорбции водорода. Представленная работа выступает продолжением исследования по адсорбции титана дефектными углеродными нанотрубками [4].

Моделирование выполнялось в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в пакете SIESTA. Использовались обменно-корреляционный функционал BH, DZP базисный набор и периодические граничные условия.

Адсорбцию молекулярного водорода вблизи атома титана или платины исследовали как на бездефектной поверхности УНТ (7, 7) и УНТ (11, 0), так и в присутствии дефектов типа одиночной и двойной вакансии, дефектов изомеризации. Самое сильное связывание атомов титана и платины ожидается вблизи дефекта моновакансии нанотрубки. При этом энергия связи по модулю оказывается больше энергии когезии, что означает отсутствие склонности к образованию кластеров металла на поверхности нанотрубок.

Химическое связывание водорода с металлом сопровождается переносом заряда с молекулы водорода на декорированную нанотрубку. Для УНТ (11, 0) с полупроводниковым типом проводимости, декорированных титаном или платиной, энергия адсорбции водорода в целом ниже, чем для УНТ (7, 7) с металлическим типом проводимости.

Энергия связи молекулы водорода с декорированной металлом нанорубкой на порядок превышает энергию связи с недекорированной нанотрубкой, но атомы титана и платины, адсорбированные на дефекте структуры нанотрубки, связывают молекулу водорода слабее, чем такие же атомы на поверхности бездефектной нанотрубки.

## Литература

1. Ghaderian N., Shokraneh Najafabadi M. H., Shabani-Nooshabadi M., Ziaie N. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Vol. 63. – P. 446-459.
2. Tan Y., Tao X., Ouyang Y. F., Peng Q. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Vol. 50D. – P. 738-748.
3. Yodsin N., Rungnim C., Promarak V. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2018. – Vol. 20. – № 32. – P. 21194-21203.
4. Созыкин С.А., Бескачко В.П. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2024. № 2. С. 26-35.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.230

# Электронная структура и динамика золотых нанокластеров

**Созыкина Е. Р.[1], Бескачко В. П.[2]**
[1]*Южно-уральский государственный университет, Челябинск, Россия,*
sozykinaer@susu.ru
[2] *Южно-уральский государственный университет, Челябинск, Россия,*
beskachkovp@susu.ru

Золотые нанокластеры находят широкое применение в катализе, медицине и сенсорике. Для построения реалистичных моделей процессов с участием золотых нанокластеров важно использовать квантово-химические методы, позволяющие корректно учитывать электронную подсистему и, следовательно, корректно описывать такие свойства как электронная структура и теплопроводность. Ранее нами было показано, что спин-орбитальное взаимодействие может оказывать заметное влияние на электронную структуру золотых нанокластеров [1]. В настоящем исследовании с учетом спин-орбитального взаимодействия изучены строение и электронная структура более сложных объектов: допированных медью или палладием золотых нанокластеров и тиолат-защищенных золотых нанокластеров. Интерес к этим объектам обусловлен тем, что допирование кластеров золота медью или палладием позволяет значительно модифицировать их электронные свойства, а органические лиганды тиолат-защищенных кластеров позволяют минимизировать агрегацию атомов золота и стабилизировать их в определенной конфигурации.

Моделирование проводилось методом DFT, реализованном в пакете VASP с использованием обменно-корреляционного функционала PBE и PAW псевдопотенциалов. Расчетная ячейка для кластеров имела размеры 3x3x3 нм. Оценка эффективных зарядов атомов проводилась при помощи программы chargemol по методу DDEC6.

При замене одного атома золота в кластере $Au_{25}$ происходят небольшие изменения геометрии из-за меньших по сравнению с золотом размеров замещающих атомов. Наиболее выгодными по энергии среди биметаллических кластеров оказались самые низкосимметричные конфигурации, возникающие в ходе оптимизации геометрии кластера, в котором замещался атом, не находящийся ни в центре кластера, ни на его поверхности. В случае наличия лигандов внедрение гетероатома на периферии золотого кластера оказывается самым энергетически невыгодным. Эффективный заряд внедренного в кластер атома меди больше, чем в случае внедрения атома палладия. В присутствии лигандов эффективные заряды гетероатомов металла уменьшаются.

Кроме этого был создан нейросетевой потенциал для моделирования немодифицированных золотых кластеров и тиолат-защищенных кластеров золота методом классической молекулярной динамики. Обучение потенциала проводилось в программе DeePMD-kit v3 на созданной нами базе данных результатов расчета VASP с использованием программы PDGen. При этом использовалась большая атомная модель DPA-2. Потенциал показал хорошую точность по сравнению с DFT, в том числе для золотых нанотрубок и двумерного золота.

## Литература

1. Созыкина Е. Р., Созыкин С. А. // Физика металлов и металловедение. – 2025. – Т. 126. – № 2. – С. 210-217.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.231

# Экспериментальное исследование структуры и свойств жаропрочного никелевого сплава системы Ni-Cr-Fe-Mo-Al-V-Ti-C, полученного методом селективного лазерного сплавления

**Строчко И.В.[1], Чеверикин В.В.[2], Сборщиков А.А.[3]**

*[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия, istrochko@icloud.com*

*2 Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, cheverikin@80rambler.ru*

*[3] АО «ЦАТ», Москва, Россия, Sbore@mail.ru*

Жаропрочные никелевые сплавы для применения в технологии селективного лазерного сплавления (СЛС) в основном представляют собой адаптированные деформируемые жаростойкие свариваемые сплавы с содержанием γ′-фазы до 15% с относительно невысокой жаропрочностью при температурах 800-900 ºС [1]. Работы по классическим литейным никелевым сплавам подтвердили не только известную проблематику в части образования трещин, но и выявили еще одну проблему: выраженную, практически неустранимую анизотропию механических свойств, в особенности в части жаропрочности. Компромиссным вариантом для создания материала с высоким уровнем длительной прочности на температуры 800-950 °С может стать адаптация свариваемого литейного малоуглеродистого сплава системы Ni-Cr-Fe-Mo-Al-V-Ti-C, не получившего широкого применения в классическом производстве по ряду причин. Однако для аддитивного производства он представляет несомненный интерес благодаря экономному легированию, хорошей свариваемости, высокой длительной прочности за счет относительно большого содержания γ′-фазы (40-45%) и потенциальной возможности получения при СЛС изотропного материала ввиду малого содержания углерода и зернограничных упрочнителей, сдерживающих рекристаллизацию для несвариваемых литейных сплавов.

Целью данной работы является исследование структуры и свойств сплава системы Ni-Cr-Fe-Mo-Al-V-Ti-Si-C-B, полученного методом СЛС, применительно к производству заготовок деталей горячего тракта ГТД из данного сплава.

Металлический порошок сплава системы Ni-Cr-Fe-Mo-Al-V-Ti-B был получен методом газовой атомизации. Определены технологические характеристик порошка, размер частиц и влажность. Структура частиц порошка исследована методом сканирующей электронной микроскопией, а фазовый состав – методом рентгеновской дифракции. Характеристические температуры сплава определяли методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Структуру синтезированного материала исследовали методом оптической микроскопии, количественный металлографический анализ проводили с использованием программного обеспечения Thixomet.

С использованием эмпирического уравнения [2] проведен расчет необходимой плотности энергии для процесса СЛС. По результатам проведения серии экспериментальных процессов синтеза элементарных кубических образов показано отклонение эмпирически определенной плотности энергии от расчетного значения в пределах 1,2 Дж, или 2,25% при обеспечении минимального уровня пористости (≤ 0,07%) максимальном размере выявленных несплошностей ≤40 мкм при синтезе по отработанному режиму для основного металла.

**Литература:**

1. Ngo T. D., Kashani A., Imbalzano G., Nguyen K. T., Hui D. Additive manufacturing (3D printing): a review of materials, methods, applications and challenges // Compos Part B: Eng. — 2018. — № 143. — P. 172–196.
2. Каблов Е.Н., Евгенов А.Г., Петрушин Н.В. и др. Селективное лазерное сплавление: материалы и технологии для синтеза ресурсных деталей: учебное пособие. М.: НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ. 2024. 504 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.232

# СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНО-КЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ ПРИ ВНЕДРЕНИИ АТОМА НИКЕЛЯ

**Н.Т. Сулайманов, Ш.М. Махкамов, М.Ю. Ташметов, Ш.М. Назармаматов, А.К. Рафиков, С.Р. Эгамов, М.Н. Эрдонов**

*Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан,*
nazarmamatov15@gmail.com

С развитием технологий формирования низкоразмерных структур становятся возможными эффективное управление структурными параметрами и модификация свойств материалов. Диффузия атомов элементов группы железа, в частности никеля, в кремниевые нанокластеры представляет перспективный путь регулирования их характеристик для микро- и наноэлектроники.

Настоящая работа направлена на исследование влияния никеля на формирование дефектов и определение структурных и зонных параметров нанокластеров кремния с помощью моделирования. Для анализа кластеров $Si_{28}H_{36}$ и $Si_{86}H_{70}$ с примесью никеля и вакансией использовался программный пакет ORCA.

По результатам оптимизации структуры, Ni в кластерах $Si_{28}H_{36}$:Ni и $Si_{86}H_{70}$:Ni, установлена наличие зависимость области симметрии от размера кластера: для $Si_{28}H_{36}$:Ni симметрия не снижается, а для $Si_{86}H_{70}$:Ni – симметрия изменяется от $T_d$ до $C_{2v}$. Выявлено что, при наличии вакансии в кластере атом примеси Ni и атомы Si третьей и четвертой координационных сфер кластера заряжается положительно, связанные с внедренным Ni, а ближайшие соседние атомы Si и поверхность кластера – отрицательно. При этом в водородосодержащих кластерах образуется сложный дефектный комплекс, включающий в себе междоузельный атом H одинаково связан с атомами $Si_s$ и $Ni_i$, а остальные первые соседние атомы $Si_s$ слабо связаны дефекты. Из-за наличия в этой же элементарной ячейке вакансии $V_{Si}$ формирование, дефект [$Ni_i$-$V_{Si}$] является более вероятным, чем дефект [Si-H-$Ni_i$]. В кластере $Si_{85}H_{70}$:[V-Ni] образуется другой тип дефекта – [$Si_3$-($Ni_i$-$V_{Si}$)]. Показано что, вероятность формирования стабильного [$Ni_i$-$V_{Si}$] дефекта в комплексе [Si-H-$Ni_i$] не зависит от размера нано-кластера кремния.

Проведенное моделирование структуры дефектных нанокластеров показало эллипсоидную форму формированных структур. Наличие вакансии увеличивает дипольный момент, что связано с поляризацией зарядов и снижением симметрии структуры из-за ограниченного числа атомов кремния в кластре.

Структурные параметры нано-кластеров кремния, содержащих атом никеля приведены в таьлице.

| | $D_{cluster}$ (Å) | $R_1$ (Å) | $R_2$ (Å) | $R_3$ (Å) | D (debay) |
|---|---|---|---|---|---|
| $Si_{28}H_{36}$+Ni → $Si_{24}H_{36}$:[$Si_4$-$Ni_s$] | 11.12 | 2.269; 2.268; 2.27; 2.267 | - | - | 0.03432 |
| $Si_{27}VH_{36}$+Ni → $Si_{23}H_{36}$:[$Si_2$-(Si-H-$Ni_i$)-$V_{Si}$] | 12.04 | 2.13; 2.25; 2.45 | 1.59 | 0.588 | 1.38899 |
| $Si_{86}H_{70}$+Ni → $Si_{82}H_{70}$:[ $Si_4$-($Ni_i$-$V_{Si}$)] | 17.55 | 2.314; 2.306; 2.304; 2.316 | - | 0.041 | 0.14642 |
| $Si_{85}VH_{70}$ +Ni → $Si_{82}H_{70}$:[$Si_3$-($Ni_i$-$V_{Si}$)] | 17.67 | 2.32; 2.28; 2.29 | - | 0.082 | 1.45763 |

$D_{cluster}$ – Расстояния между наиболее удаленными атомами H, нейтрализующими поверхностных атомов Si («диаметр» кластера); $R_1$ – Расстояния между атомом Ni и первыми соседними атомами Si; $R_2$ – Расстояния между атомом Ni и вовлеченным им атомом H; $R_3$ – Расстояния между атомом Ni и $V_{Si}$; D – магнитуда дипольного момента.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.233

# Исследование корреляции между формированием предзародышевых кластеров и анизотропией роста кристаллов KDP и DKDP.

**Суханов А.Е.[1], Конарев П.В.[1], Смирнова Е.С.[1], Писаревский Ю.В.[1], Алексеева О.А.[1], Ковальчук М.В.[1]**

[1]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, sukhanov.ae15@physics.msu.ru*

В физике конденсированного состояния бодьшой интерес представляет переход от жидкой к твердой фазе. В последней время установлены важные особенности предзародышевой стадии жидкой фазы, когда жидкость переходит в коллоидное состояние с образование наноразмерных супрамолекул, представляющих трехмерные фрагменты кристаллической структуры [1] (на примерах растворов белков).

В настоящей работе представлены результаты изучения формированием предзародышевых кластеров в кристаллизационных растворах KDP ($KH_2PO_4$) и DKDP ($KD_2PO_4$) и корреляции с образованием фаз и анизотропией роста этих кристаллов.

С помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) установлено, что строительной единицей кристалла KDP тетрагональной фазы является октамер – трехмерный фрагмент кристаллической структуры, состоящий из 8 молекул $(KH_2PO_4)_8$. Размер октамера составляет примерно 17.4 ×5.9Å.x5.9Å. Вычисления стабильности предзародышевых кластеров методом молекулярной динамики подтвердили полученный в рамках эксперимента результат. При нормальном росте кристаллов более важным обстоятельством является фактор размера ступени роста кристалла, который больше в направлении [001]. Размер ступени в этом направлении соответствует размеру октамера ≈17.4 Å, откуда следует, что именно октамер является предзародышевым кластеров-прекурсором.

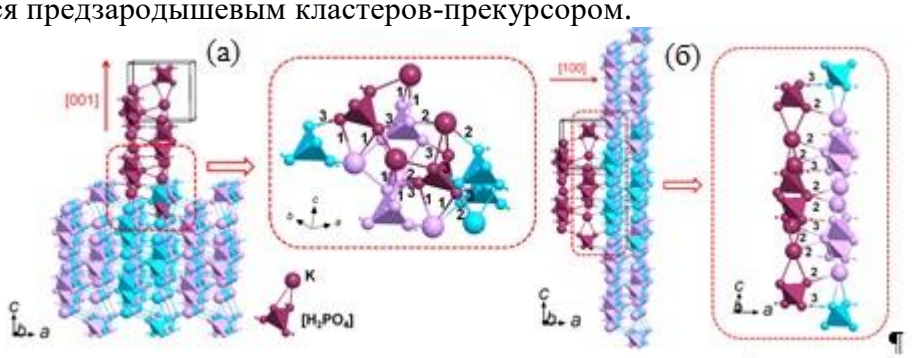



Рисунок 1. Присоединение октамера к кристаллу KDP. а) В кристаллографическом направлении [001]. Б) В кристаллографическом направлении [100]

Изучения растворов DKDP в широких интервалах температур и концентраций DKDP методом МУРР выявили три типа растворов: а) с октамерами; б) с тетрамерами и в) с смесью октамеров и тетрамеров. Из растворов типа а) вырастали кристаллы тетрагональной сингонии, тогда как из растворов типа б) кристаллы моноклинной сингонии, и из растворов типа кристаллы с) обоих сингоний.

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

## Литература

1. Марченкова М.А., Бойкова А.С., Ильина К.Б., Конарев П.В., Писаревский Ю.В., Дьякова Ю.А., Ковальчук М.В.// Acta Naturae. – 2023. – № 1. –С. 58-68.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.234

# РОСТ И ЭВОЛЮЦИЯ НАНОПРОВОДОВ IR НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКА GE(001)

**Сыромятников А.Г., Клавсюк А.Л., Салецкий А.М.**
*МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия,*
ag.syromyatnikov@physics.msu.ru

Развитие технологий создания металлических атомных проводов и изучение их свойств в последнее время стало одним из приоритетных направлений фундаментальных и прикладных исследований[1]. Привлекательность атомных проводов связана с их уникальными свойствами. Поэтому изучение условий формирования, упорядочения и стабильности атомных проводов является сегодня одной из актуальных задач.

Существует множество способов получения атомных проводов. Однако, для промышленного производства электронных устройств наиболее подходящим способом создания металлических атомных проводов на различных поверхностях является их эпитаксиальный рост. Ранее было продемонстрировано, что таким образом можно получить упорядоченные и однородные по размерам атомные провода с высокой плотностью[1].

Впервые формирование нанопроводов иридия на поверхности Ge(001) было исследовано с использованием теории функционала плотности и кинетического метода Монте-Карло[2]. Было обнаружено, что адатомы иридия погружаются в поверхностный слой. В нем же и происходит их диффузия. Были описаны основные диффузионные события, определяющие формирование атомных проводов и их форму. Обнаружена анизотропия диффузии атома иридия в поверхностном слое Ge(001). Выявлено, что отталкивание между атомом иридия и димером иридия приводит к формированию нанопроводов, состоящих из димеров, расположенных через один атомный ряд. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ). Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-22-00051).

## Литература

1. Сыромятников А Г, Колесников С В, Салецкий А М, Клавсюк А Л "Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов" *Успехи физических наук* **191** 705–737 (2021)
2. А. Г. Сыромятников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк. Моделирование процесса формирования нанопроводов Ir на поверхности Ge(001). *Письма в ЖЭТФ* **120**, 273–278 (2024).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.235

# Управление киральностью и завихренностью магнитных солитонов в наноструктурах «диск-нанопроволока»

**Татарский Д.А.[1,2,*], Скороходов Е.В.[1], Пашенькин И.Ю.[1], И.А. Федотов[1], В.Л. Миронов[1]**

[1]*Институт физики микроструктур РАН, дер.Афонино, г. Нижний Новгород, Россия*
[2]*ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия*

*tatarsky@ipmras.ru

В настоящее время активно исследуется возможность генерации субГГц излучения с помощью вихревых наноосцилляторов с передачей спинового момента (ВСТНО). Их идея состоит в том, что под действием постоянного тока, протекающего перпендикулярно цилиндрическому стеку с ферромагнитным слоем, имеющим вихревое распределение намагниченности, возбуждается гиротропная (трансляционная) мода колебаний магнитного вихря. Модуляция среднего момента намагниченности в плоскости при этом может привести к модуляции напряжения в цилиндрическом стеке благодаря эффекту гигантского или туннельного магнитоспоротивления. Для повышения мощности предлагается ряд решений, основанных на диполь-дипольной и обменной синхронизация ВСТНО. в массивах. Отметим, что для существование генерации необходимо правильное сочетание направления протекания тока, направления поляризации носителей заряда в нём и ориентации ядра магнитного вихря. На частоту же генерации влияет как величина плотности постоянного тока, так и направление закрученности оболочки вихря относительно вихревого магнитного поля, создаваемого самим током. Влияние со стороны магнитного поля тока настолько существенно, что требует учёта при проектировании массивов ВСТНО, которые планируется синхронизовать.

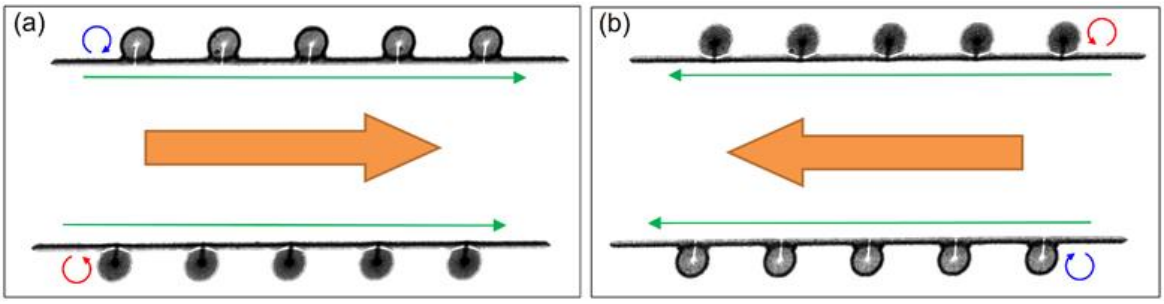



Рис. 1. ЛПЭМ изображения массивов «диск-нанопроволока» после намагничивания в магнитном поле. (a) Поле в плоскости образца прикладывалось в направлении слева направо (+X). (b) Поле прикладывалось в направлении справа налево (-X). Изменилось направление намагниченности НП и все магнитные вихри изменили направление закрученности оболочек на противоположное.

Таким образом, центральной задачей для правильной синхронизации массивов ВСТНО является такой их дизайн, который позволяет точно контролировать как направления поляризации ядра, так и направление закрученности оболочки вихрей в ВСТНО. В данной работе методами лоренцевой просвечивающей электронной микроскопии мы демонстрируем управление вихревым состояниями в системе «диск-нанопроволока».

Работы выполнена в рамках государственного задания FFUF-2024-0021.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.236

# Конкуренция октаэдрической и тетраэдрической координации интеркаланта в слоистых дихалькогенидах переходных металлов IV группы.

**Титов А. Н.**
*Институт Физики Металлов им. М.Н.Михеева УрО РАН, Екатеринбург, РФ, antitov@mail.ru*

Интеркалация слоистых материалов позволяет существенно расширить спектр их функциональных свойств. В случае слоистых дихалькогенидов переходных металлов IV группы интеркалированы могут быть щелочные, редкоземельные, благородные, переходные и некоторые пост-переходные металлы. При этом известны материалы, в которых интеркалированные металлы занимают позиции октаэдрически и/или тетраэдрически (окта- и/или тетра- ) координированные халькогеном. В настоящей работе предложена модель, связывающая выбор типа позиции с величиной потенциала ионизации металла решётки-хозяина $I_h$ и интеркалированного металла $I_G$ в наблюдаемом зарядовом состоянии. Показано, что в пределе высокой величины $I = (2I_h + I_G)$ стабильна окта- координация интеркаланта, в пределе же низкой величины I стабильна тетра- координация. Рассмотрен характер химической связи, обеспечивающий эту закономерность.

Обсуждаются возможности управления величиной I. Среди них замещение по подрешётке переходного металла решётки-хозяина, би-интеркалация двух металлов, один из которых является донором и модификация решётки-хозяина путём стабилизации Янус-слоёв.

Обсуждаются особенности материалов с тетра-координацией интеркаланта. Основное внимание здесь уделено возможности стабилизации нецентросимметричных структур. При интеркалации магнитных металлов такие материалы можно охарактеризовать как ван-дер-Ваальсовы мультиферроики. Излагаются экспериментальные доказательства справедливость предлагаемого подхода.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.237

# ИЗМЕНЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДА В СПЛАВАХ Nb-Mo-C В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

**Тлустенко А.С., Гнесин И.Б., Прохоров Д.В., Карпов М.И., Внуков В.И.**

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук (ИФТТ РАН), 142432 Черноголовка, Россия, e-mail: tlustal@issp.ac.ru*

Разработка новых жаропрочных сплавов вызвана необходимостью повышения технических характеристик современной авиационной и космической техники, а также различных видов энергетических установок. Одним из направлений исследования возможностей повышения жаропрочности конструкционных сплавов является изучение высокотемпературных систем на основе тугоплавких металлов с карбидным упрочнением. Сплавы системы Nb-Mo-C являются одними из перспективных для изучения в качестве жаропрочных материалов.

При изучении фазовых превращений и процессов структурообразования сплавов системы Nb-Mo-C одним из важных параметров является общее содержание углерода в сплаве. Одним из способов оценки содержания углерода является оценка по количеству закладываемых компонентов при синтезе материала. Однако в процессе синтеза сплавы подвергаются высокотемпературным термообработкам вплоть до температуры плавления и выше. При этом может происходить снижение содержания, как металлических компонентов, так и углерода. Поэтому оценка содержания углерода по количеству закладываемых материалов может быть использована лишь в первом приближении. Количественный анализ содержания углерода методами рентгеноспектрального анализа затруднен в виду относительно низкой энергии его характеристического излучения. В данной работе была произведена количественная оценка содержания углерода в сплавах Nb-Mo-C как с различным содержанием углерода (15, 20, 25, 30 ат.% по измерениям перед синтезом) так и с различным соотношением концентраций металлических компонентов. Экспериментальные данные были получены с помощью анализатора углерода и серы METAVAK CS-30 методом инфракрасной спектроскопии. Основной методической сложностью в процессе анализа было обеспечение полного сгорания навески в токе кислорода. Была произведена экспериментальная оценка воспроизводимости результатов при различной методике приготовления пробы: как путем электроэрозионной резки объемного образца, так и криомеханического размола разной степени. Определено, что для сплавов в широком интервале составов именно криомеханический размол позволяет обеспечить достаточную для получения в высокой степени воспроизводимых результатов измерений дисперсность пробы. Следует отметить, что для образцов с самым низким содержанием молибдена даже данным методом не удается получить препарат необходимой для корректного измерения дисперсности.

Во всех исследованных образцах обнаружено заметное снижение (на 15-25% от расчетной величины) уровня содержания углерода по сравнению с закладываемым. Учитывая, что это явление наблюдается устойчиво для сплавов с различным содержанием молибдена, вероятность значительного влияния полноты сгорания на результаты измерений не выглядит высокой. Основной причиной наблюдаемого явления могут быть потери углерода в процессе синтеза материалов. Однако это вступает в противоречие с результатами определения объемных долей карбидной фазы в исследуемых образцах, которые говорят о содержании углерода в исследуемых образцах, вполне соответствующем закладываемому перед синтезом. При этом известно, что карбиды тугоплавких металлов могут иметь достаточно широкие области гомогенности именно в сторону обеднения углеродом. Таким образом, одним из объяснений наблюдаемой экспериментально картины может являться снижение содержания углерода в карбидной фазе. Таким образом, в рамках проведенной работы разработана методика подготовки образцов для определения общего содержания углерода в жаропрочных сплавах системы Nb-Mo-C, а также получены первые данные о возможной степени снижения содержания углерода в сплавах в процессе высокотемпературного синтеза.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.238

# Магнитные свойства и электропроводность полимерных композитов на основе термопластичного полиуретана и одностенных углеродных нанотрубок

**Тонков Д. Н.[1], Гасумянц В. Э.[1,2], Романов В. В.[1], Руль Н. И.[1,3], Грозова Н. А.[1], Кобыхно И. А.[1]**

[1]*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*, wtk_dima@mail.ru

[2]*Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Россия*

[3]*Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*

В представленной работе выполнены исследования полимерных композиционных материалов на основе термопластичного полиуретана с наполнителем из одностенных углеродных нанотрубок (УНТ), при массовой доле последних от 0.05 до 1.00 масс. %. Температурные зависимости удельного сопротивления полученных образцов измерены в диапазоне от 77 до 300 К (Рис. 1). Проведенный анализ показал, что результаты измерений хорошо описываются известным выражением для сопротивления аморфных структур $\rho \sim exp(T_0/T)^p$, где $p$ – параметр, определяющий механизм проводимости [1]. Обнаружено, что уменьшение массовой доли УНТ приводит к увеличению параметра $T_0$, что свидетельствует о сильном росте удельного сопротивления материала при понижении температуры. Рассмотрение возможных механизмов проводимости в исследованных композитах показало, что в диапазоне температур до 250 К, независимо от содержания УНТ, в них реализуется моттовский режим проводимости.

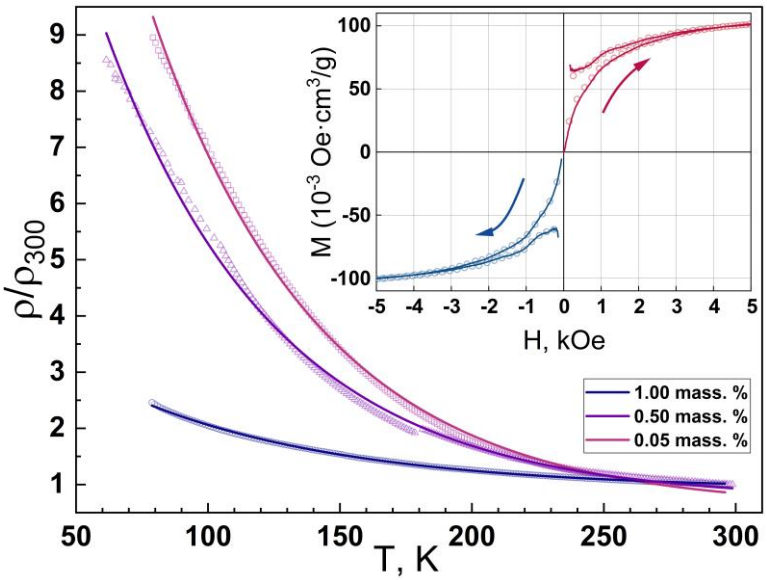



Рис. 1. Температурная зависимость удельного сопротивления композита с различными массовыми долями УНТ, нормированного на удельное сопротивление при 300 К, и полевые зависимости намагниченности композита при содержании УНТ 1.00 масс.

Можно ожидать, что магнитные поля, создаваемые в материале содержащимися в нанотрубках соединениями железа, прежде всего $Fe_2O_3$, могут оказывать влияние на электропроводимость материала. Измерения намагниченности образцов на установке “Faraday Balance” [2] (Рис. 1, вставка) при комнатной температуре методом Фарадея обнаруживают изменение магнитных свойств композитных материалов от диамагнетизма, для полимерной матрицы, до слабого ферромагнетизма при высокой (1.00 масс. %) массовой доли наполнителя.

## Литература

1. R.M. Rudenko, O.O. Voitsihovska et all.// Diamond and Related Materials – 2024. – Vol. 143, - P. 110924.
2. Romanov V.V., Kozhevnikov V.A., Tracey C.T., Bagraev N.T. // Semiconductors. – 2019. – Vol. 53, – № 12. – P. 1629-1632.

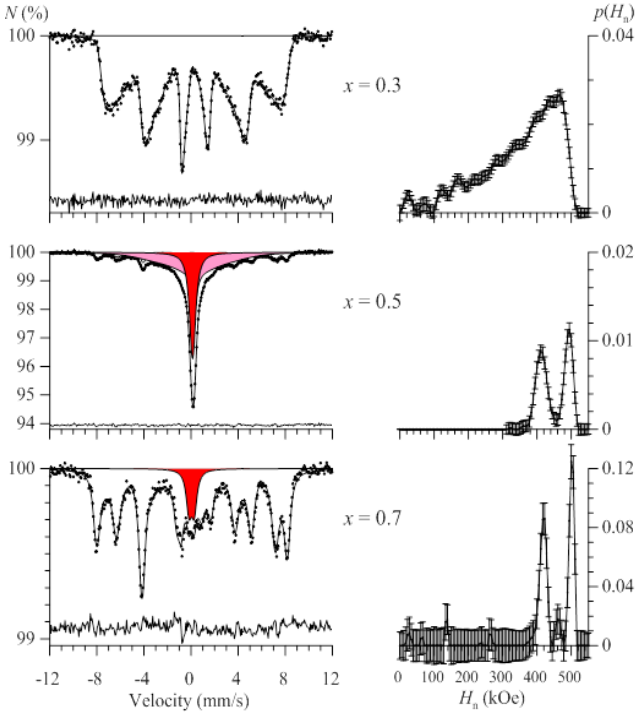
DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.239

# МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВАЛЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ Fe И КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В Ca-ЗАМЕЩЕННОМ ОРТОФЕРРИТЕ $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0)

**В.Д. Седых[1], В.С. Русаков[2], А.М. Гапочка[2], А.А. Топоркова[1], А.И. Дмитриев[3]**

*[1] Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия*
*[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
*[3] Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*
E-mail: sedykh@issp.ac.ru, anna.toporkova@list.ru

Методом мессбауэровской спектроскопии при комнатной температуре исследовано влияние содержания ионов $Ca^{2+}$ в ферритах лантана $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1) на их кристаллическую структуру, кислородные вакансии и валентные состояния Fe. Образцы синтезированы на воздухе золь-гель методом при температуре 1200°C. После синтеза образцы отжигались в вакууме при 650°C, когда все ионы $Fe^{4+}$ переходят в $Fe^{3+}$. Следует отметить, что образцы с крайними значениями x (x = 0 и 1) содержат только ионы $Fe^{3+}$. Причем при x = 0 ($LaFeO_3$) в образце нет вакансий, а при x = 1 ($CaFeO_{2.5}$) их максимальное число. При замещении $La^{3+}$ на $Ca^{2+}$ в образцах появляются кислородные вакансии и за счет окислительных процессов – ионы $Fe^{4+}$. На рисунке показаны спектры исходных образцов для x = 0.3, 0.5, 0.7 и результат их обработки методом восстановления распределения сверхтонкого магнитного поля (СТП). Значения изомерных сдвигов мессбауэровских




спектров указывают на то, что часть ионов Fe находится в усредненном валентном состоянии, т.е. имеют промежуточную степень окисления между 3+ и 4+. Это связано с быстрым (< $10^{-8}$ с) переносом электронов между $Fe^{3+}$ и $Fe^{4+}$ при комнатной температуре. Значительное уширение распределения СТП для **x = 0.3** свидетельствует о локальной неоднородности окружения ионов Fe из-за наличия разного числа кислородных вакансий и ионов $Fe^{4+}$. После вакуумного отжига, когда ионы $Fe^{4+}$ переходят в $Fe^{3+}$, ширина распределения СТП сильно сужается. Для образца с **x = 0.5** распределение СТП имеет два ярко выраженных максимума, связанных с началом формирования структуры $La_{0.33}Ca_{0.67}FeO_{2.67}$. В ней ионы $Fe^{3+}$ имеют два кислородных окружения: октаэдрическое и тетраэдрическое с разными значениями СТП и изомерных сдвигов. Также в спектре проявляется очень широкая линия, скорее всего, связанная с релаксационными процессами, и уширенный парамагнитный синглет, который может быть вызван большим количеством ионов $Fe^{4+}$. Магнитные измерения показали, что для этого образца (x = 0.5) температура Нееля $T_N$ = 280 K. Для образца с **x = 0.7** синглет переходит в дублет и его интенсивность уменьшается. Кроме того, уменьшение ширины двух пиков в распределении СТП свидетельствует о переходе в вакансионно-упорядоченную фазу Гренье $LaCa_2Fe_3O_8$. При **x = 1** происходит переход в браунмиллеритную фазу $Ca_2Fe_2O_5$. На основании полученных данных проведен анализ структурных изменений в ортоферрите $La_{1-x}Ca_xFeO_{3-\gamma}$ в зависимости от содержания Ca.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.240

# Легирование переходными и постпереходными металлами как способ управления электронными свойствами V2O5

**Третьяков Т. М., Орлов Л. Ю., Степанов Р. С., Кононов А. А.**

*Научно-исследовательский институт физических исследований, Российский государственный педагогический университет им. А.И.Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

*e-mail: timtret2014@gmail.com*

Легирование пентаоксида ванадия ($V_2O_5$) представляет значительный интерес в связи с наличием в его структуре сильно коррелированных электронных состояний. Введение примесных атомов приводит к значительной модификации электронной структуры вследствие изменения локальной геометрии и появления примерных уровней.

Исследование проводилось с помощью первопринципных расчетов на основе теории функционала плотности с учетом спин-орбитального взаимодействия. В расчетах применялось обобщенное градиентное приближение с параметризацией PBE. Все вычисления были выполнены с помощью программного пакета VASP[3]. Для учета сильных электронных корреляций, был использован метод DFT+U (Hubbard U=5,696 эВ). Для исследования зонной структуры была применена процедура ее развертки. Также исследовалось влияние примесей на межслойное взаимодействие.

Исходный $V_2O_5$ был легирован переходными (Mo, Y) и постпереходными (Sb, Bi) металлами: $Mo_{1.78}V_2O_5$, $Sb_{1.78}V_2O_5$, $Y_{1.78}V_2O_5$, $Bi_{1.78}V_2O_5$.

Установлено, что легирование $V_2O_5$ переходными и постпереходными металлами позволяет уменьшить ширину запрещенной зоны, что обусловлено формированием локализованных состояний вблизи краев зоны проводимости и валентной зоны. Наибольший интерес представляет легирование иттрием, так как уменьшая ширину запрещенной зоны до 1.3 эВ, эта примесь не вносит значительного структурного беспорядка и не изменяет кривизны зон.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 43-ВГ)

## Литература

1. Panagopoulou M. et al. // The Journal of Physical Chemistry C. – 2017. – V. 121. – № 1. – P. 70–79.
2. Raja S., Subramani G. et al. // Optik - International Journal for Light and Electron Optics. – 2020. – V. 200. – № 5. – P. 123–130.
3. The VASP Team // *Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).* – 2023. – URL: https://www.vasp.at/

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.241

# Влияние механического легирования на структуру и свойства сплавов Al-Cr

**Трошкова О., Мочуговский А. Г., Михайловская А.В.**
*Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва, РФ,*
troshkova.o@misis.ru

Алюминиевые сплавы, легированные переходными металлами (ПМ), включая сплавы с хромом, являются перспективными материалами для авиа- и машиностроения ввиду способности к дисперсионному упрочнению. В алюминиевых сплавах, легированных хромом, может формироваться ряд метастабильных кристаллических и квазикристаллических фаз, а также стабильная фаза $Al_7Cr$. Формирование пересыщенного твердого раствора является ключевым фактором, влияющим на эффект дисперсионного упрочнения в сплавах на основе алюминия. Максимальная равновесная растворимость Cr в Al в твердом состоянии составляет 0,37 ат.% (0,71 масс.%) при 661,5°C и стремится к ~0% при комнатной температуре. Для увеличения растворимости хрома в алюминии требуется скорость охлаждения ~175 К/с, что значительно превышает скорость охлаждения при обычном литье. Ряд исследований выявляет высокую склонность сплавов Al-Cr к образованию пересыщенных твердых растворов при ускоренной кристаллизации. Максимальная неравновесная растворимость хрома в алюминии варьируется в пределах 2,6-5,5 ат.%Cr в зависимости от технологии обработки.

Механическое легирование (МЛ) является эффективным способом увеличения неравновесной растворимости легирующих элементов в алюминии. МЛ позволяет создавать гранулы порошка с неравновесной и однородной структурой, которые могут быть затем консолидированы путем спекания или горячего прессования. Растворимость Cr в механически легированных сплавах Al-Cr варьируется от ~3 до ~7 ат.%. Однако влияние времени обработки и концентрации Cr на эволюцию микроструктуры и образование пересыщенного твердого раствора в сплавах Al-Cr изучены недостаточно. Данная работа посвящена анализу растворимости Cr в алюминии, микроструктуры и эволюции микротвердости при механическом легировании алюминиевых сплавов системы Al-Cr с разным содержанием хрома.

В работе были исследованы сплавы следующего состава: Al-0,7xCr и Al-xCr. Сплавы обрабатывали в планетарной шаровой мельнице в интервале времени 40-60 ч. В результате обработки формировались гранулы порошка с наноразмерным зерном и структурой пересыщенного твердого раствора. Гранулы порошка формировались после 15 и 25 ч часов обработки и содержали 8,3±0,3ат% и 6,7±0,3ат% растворенного Cr для сплавов Al-xCr и Al-0,7xCr, соответственно. Область когерентного рассеяния (данные XRD) и размер зерна (данные ПЭМ) твердого раствора Al составили ~15 нм для сплава с Al-xCr и ~22 нм для сплава с Al-0,7xCr. Микротвердость достигла аналогичного максимального значения 520±40HV через 30 и 15 часов в сплавах Al-0.7xCr и Al-xCr, соответственно. При продолжительной обработке в гранулах наблюдали распад пересыщенного твердого раствора с образованием фазы $Al_7Cr$. Увеличение содержания Cr облегчало процесс формирования порошка при механическом легирование за счет улучшения эффекта деформационного упрочнения, что способствовало измельчению зерна и увеличению содержания растворенного Cr.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 24-79-00092).*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.242

# Размерные эффекты и механизмы локального деформирования сложных высокоупорядоченных природных полимеров (на примере древесины сосны и дуба)

**Тюрин А. И.*, Коренков В. В., Самодуров А. А., Тюрин В. А.**
*Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Тамбов, Россия*,
e-mail: tyurinalexander@yandex.ru

В последнее время при разработке новых материалов и конструкций все большее внимание уделяется природоподобным технологиям и природным материалам. Это обусловлено их высокими свойствами. Наиболее представительными с этой точки зрения являются древесные материалы, которые представляют собой природные композиты со сложной мультимасштабной иерархической структурой [1-3]. Именно эта структура определяет все многообразие ее эксплуатационных свойств (физико-механических, акустических, тепловых и т.д. [1-6]) и позволяет активно использовать древесину во многих современных практических приложениях. При этом как и для всех материалов для древесины принципиально важны вопросы формирования ее макросвойств, наличия в них размерных эффектов (РЭ) и механизмы деформирования на разных иерархических уровнях. Однако несмотря на большую историю изучения и применения в литературе весьма мало информации по рассмотрению вопросов, связанных с РЭ в механических свойствах древесины, а также механизмам ее деформирования на разных структурных уровнях.

Поэтому целью этой работы было исследование наличия РЭ и установление механизмов локального деформирования древесины на разных уровнях структуры.

Для выявления РЭ в механических свойствах применяли методы наноиндентирования [6-8], которые позволяют проводить исследования в широком диапазоне размеров зоны деформирования (от десятков нм - исследование единичных клеточных стенок; до нескольких мм - исследование нескольких годовых колец, что по существу определяет уже макросвойства древесины).

Исследования проводили на примере типичных представителей древесины хвойных (сосна обыкновенная) и лиственных (дуб черешчатый) пород. Выявлены зависимости твердости $H$ от размера зоны деформирования, которая заключается в уменьшении твердости с ростом размера зоны деформирования примерно на порядок величины. Проведен активационный анализ и определены активационные параметры (активационный объем $\gamma$ и энергию активации $U^*$) на разных этапах деформирования отпечатка. На основании полученных значений $\gamma$ и $U^*$ предложены возможные микромеханизмы локального деформирования древесины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-16-00231, (https://rscf.ru/project/23-16-00231/).

Литература

1. Dinwoodie J.M. Timber, Its Nature and Behaviour. 2nd Edition. London. CRC Press. 2000.
2. Fu Z., Lu Yu., Wu G. et. al. // Progress in Materials Science. – 2025. – V. 147. – a. n. 101354.
3. Desch H.E., Dinwoodie J.M. Timber: Structure, Properties, Conversion and Use; Macmillan International Higher Education: London, UK, 2016. - 2272 pp.
4. Toumpanaki E., Shah D. U., Eichhorn S.J. // Adv. Mater. – 2020. – a. n. 2001613.
5. Chen C., Kuang Y., Zhu S. et al. // Nature Reviews. Materials. - 2020. - V. 5. - P. 642–666.
6. Golovin Y.I., Gusev A.A., Golovin D.Yu. et al. // JOBAB. - 2023. - № 8. - P. 246–264.
7. Головин Ю.И., Тюрин А.И. // Известия РАН. Серия физическая. - 1995. - Т. 59. - № 10. - С. 49.
8. Головин Ю.И., Иволгин В.И., Тюрин А.И., Хоник В.А. // ФТТ. - 2003. - Т. 45. - № 7. - С. 1209-12126.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.243

# Низкотемпературные электронные транспортные свойства плёнок $SrIrO_3$ и гетероструктур на его основе

**Ульев Г. Д.[1,2], Константинян К. И.[1], Овсянников Г.А.[1], Москаль И.Е.[1], Петржик А.М.[1], Маширов А.В.[1]**

*[1]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, 125009, Москва, Россия,*

*[2]Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Физический факультет, 101000, Москва, Россия*

Применение оксидных материалов позволяет создать атомно-гладкие границы раздела (интерфейсы) [1], что критически важно для формирования гетероструктур ферромагнетик/металл с высоким спин-орбитальным взаимодействием. Такие гетероструктуры интересны для применений в спинтронике, благодаря высокому значению спинового угла Холла [2]. Одним из известных оксидов с высокой энергией спин-орбитального взаимодействия является $SrIrO_3$ – электропроводящий со структурой перовскита, который согласно [3] $SrIrO_3$ проявляет свойства вейлловский полуметалла.

В данном сообщении приводятся результаты измерений тонких эпитаксиальных плёнок $SrIrO_3$, выращенных на различных подложках, а также ферромагнитной гетероструктуры. Обсуждается зависимость электропроводимости тонких плёнок $SrIrO_3$ от температуры, которая, как оказалось, нетривиально зависит от типа выбранной подложки. Например, на подложке $NdGaO_3$ сопротивление растет со снижением температуры, тогда как плёнка на $SrTiO_3$ имеет минимум при температуре T= 70 K. Измерения напряжения Холла позволили оценить эффективную концентрацию носителей и проследить изменение коэффициента Холла от температуры. В промежутке низких температур T = 2-10 K в плёнках иридата наблюдается эффект слабой локализации и прослеживается влияние внешнего магнитного поля на изменение добавочного сопротивления.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-49-10006,
https://rscf.ru/project/23-49-10006/

## Литература

1. Huijben M., Brinkman A., Koster G., Rijnders G., Hilgenkamp H., Blank D.H.A. Advanced Materials, 21, 17 (2009)
2. Г.А. Овсянников, К.И. Константинян, Г.Д. Ульев, И.Е. Москаль. Письма в ЖЭТФ, 121, 402 (2025).
3. Sen K., Fuchs D., Heid R., Kleindienst K., Wolff K., Schmalian J., Le Tacon M. Nat. Commun 11, 4270 (2020).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.244

# Особенности измерения электрофизических свойств в полярных диэлектрических кристаллах

**Умылин В. Е.[1], Козлова Н. С.[1], Забелина Е. В.[1], Корчагин А. В.[1], Петраков В. С.[1], Воронова М. И.[1]**

[1]*Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия,* v.umylin@mail.ru

Величины и стабильность электрофизических параметров кристаллических элементов существенно влияют на функциональные характеристики устройств и приборов, рабочими элементами которых они являются. Как известно [1], в полярных кристаллах без дополнительных внешних воздействий на образцах, вырезанных перпендикулярно полярной оси, при закорачивании электродов наблюдаются токи, так называемые токи короткого замыкания (ТКЗ). Показано [2], что в процессе нагрева ТКЗ могут менять направление протекания и величину на порядки. Эти процессы могут влиять на рабочие характеристики готовых изделий и требуют дополнительного изучения.

Целью работы являлось исследование электрофизических параметров и их температурных зависимостей в образцах полярных срезов модельного кристалла с различными материалами токопроводящих покрытий и с различными схемам измерений.

Для первых исследований использовались образцы полярных срезов модельного кристалла α-$LiIO_3$ гексагональной модификации без предварительной поляризации и внешних воздействий с различными материалами токопроводящих покрытий: In и Ag. Исследовались образцы как с симметричными (одинаковыми), так и несимметричными токопроводящими покрытиями относительно полярности сторон образца α-$LiIO_3$.

Для измерения температурных зависимостей электрофизических параметров образцов использовался аппаратный комплекс «СКИП» с разработанным в нашей лаборатории программным обеспечением «ИТКЗ-1.0».

Получены первые результаты измерений температурных зависимостей ТКЗ. Установлено, что величины и направление протекания токов зависят от материала токопроводящих покрытий и полярности стороны их нанесения на образец. Температурные зависимости охлаждения не совпадают с нагревом, что свидетельствует об образовании новых фаз и невоспроизводимости процессов, после нагрева и охлаждения кристаллы не возвращаются в исходное состояние.

## Литература

1. Козлова Н.С., Забелина Е.В., Быкова М.Б. Особенности проявления поверхностных электрохимических процессов в сегнетоэлектрических кристаллах с низкотемпературными фазовыми переходами // Изв. Вузов. Материалы электронной техники. – 2018. – Т. 21. – №3. – С. 146-155
2. Kozlova N.S., Zabelina E.V., Buzanov O.A. Features of behavior of near-electrode processes of dielectric crystals // IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectrics (ISAF), Lausanne, Switzerland. 2019. PP. 1-4.

Исследования проводились в аккредитованной лаборатории полупроводниковых материалов и диэлектриков «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.245

# К ВОПРОСУ ОБ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЯХ И ИСКАЖЕНИЯХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

**Филиппова В.П.[1], Блинова Е.Н.[2], Шурыгина Н.А.[3]**

*ГНЦ РФ «Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П. Бардина», Москва, Россия.*

E-mail: varia.filippova@yandex.ru[1]; blinova_en@rambler.ru[2]; shnadya@yandex.ru[3]

Проведенный анализ теоретических и экспериментальных исследований, совместно с компьютерным моделированием методом молекулярной динамики на основе потенциалов межатомного парного взаимодействия, показал, что искажения кристаллической решетки твердого раствора отличаются от остаточных искажений III-го рода деформированных металлов тем, что все атомы (растворенные и растворителя) находятся в равновесном состоянии.

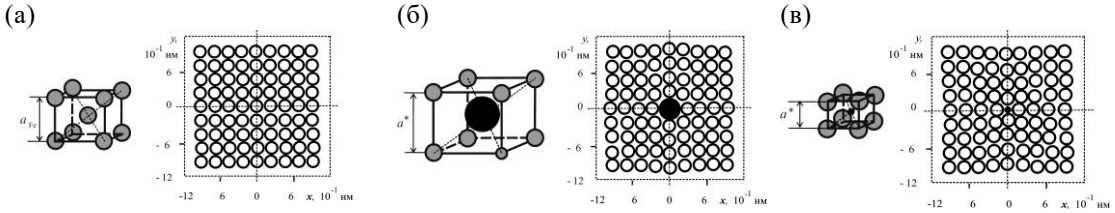



Рис. 1. – Равновесные атомные конфигурации ОЦК кристаллической решетки α-Fe в плоскости (100), смоделированные методом молекулярной динамики: (а) – вокруг атома Fe в чистом металле; (б) – вокруг атома Mo; (в) – вокруг атома P.

Предложен подход для определения концентрационных зависимостей периода кристаллической решетки твердого раствора методом рентгеновской дифрактометрии, основанный на представлении твердого раствора как совокупности деформированных и недеформированных ячеек, в отличие от традиционного рассмотрения целостной кристаллической решетки, состоящей из периодически расположенных атомов (в «идеальном» и «неидеальном» положении).

Регрессионный анализ, примененный на основании предложенного подхода, позволил оценить вклад основных легирующих и примесных элементов стали (Cr, Ni, Mo, Al, B, Sn, Si, P, S) в величину периода кристаллической решетки многокомпонентных твердых растворов на основе α-Fe, с учетом влияния малых примесей (N, C, S и других), не прибегая при этом к методам глубокой очистки.

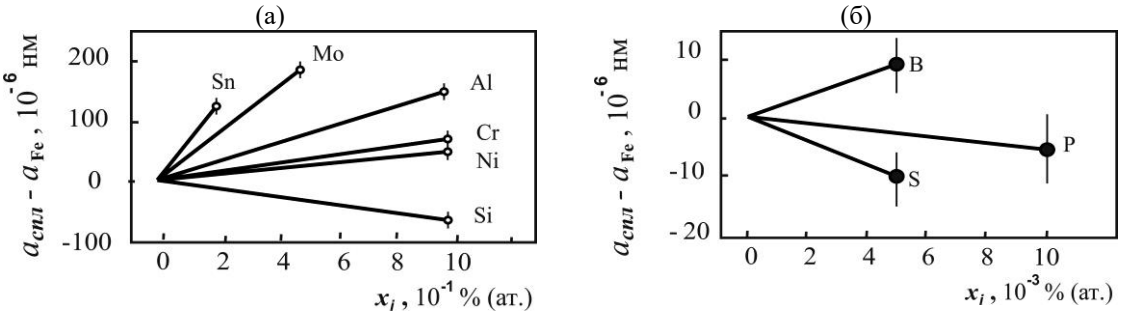



Рис. 2. – Период ОЦК кристаллической решетки твердого раствора на основе α-Fe в зависимости от концентрации растворенного элемента: а) Mo, Cr, Ni, Al, Sn, Si; б) P, S, B.

## Литература

1. Филиппова В.П., Глезер А.М., Томчук А.А., Перлович Ю.А., Крымская О.А. // Деформация и разрушение материалов. 2014. № 4. С. 21-27.
2. Филиппова В.П., Макушев С.Ю. // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2015. №4. С.74-81.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.246

# Особенности формирования микроструктуры поверхности композитных покрытий на основе серебра с добавлением $Al_2O_3$, полученных электровзрывным напылением

**Филяков А.Д., Почетуха В.В., Романов Д.А.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия, filyakov.1999@mail.ru*

Электровзрывное напыление осуществлялось с использованием установки ЭВУ 60/10 М. Установка включает в себя зарядное устройство, емкостный накопитель энергии и плазменный ускоритель.

Композитный электроразрывной проводник состоял из серебряной фольги (химический состав, масс. % Ag 99,9; Pb 0,003; Fe 0,035; Sb 0,002; Bi 0,002; Cu 0,058), в центральную часть которой помещался порошок $Al_2O_3$.

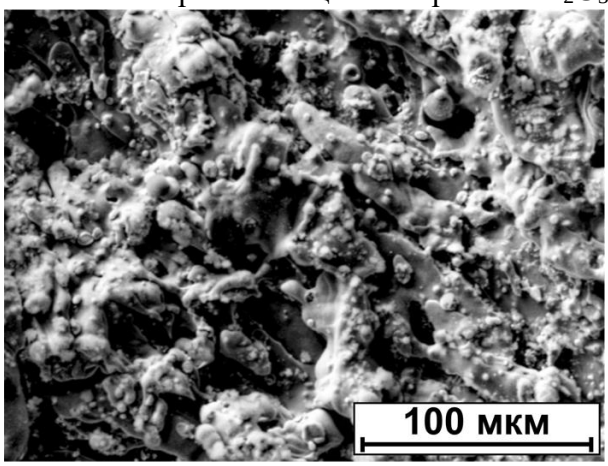



Рисунок 1. Микроснимок поверхности участка поверхности покрытия

Анализ микрорельефа поверхности покрытия осуществляли с помощью сканирующего электронного микроскопа KYKY-EM6900. Исследование элементного состава проводили методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

На рисунке 1 показан микроснимок поверхности участка покрытия с капельной структурой. Основа поверхностного рельефа была сформирована под действием гидродинамических неустойчивостей, вызванных движением расплава по подложке. На поверхности покрытия присутствуют кратеры, образовавшиеся при соударении с поверхностью конденсированных серебряных частиц. Помимо них на поверхности также наблюдаются множественные вкрапления частиц $Al_2O_3$.

Несмотря на быстрое расширение и испарение серебряной фольги, подвергнутой воздействию электрического импульса, заключенные в ней частицы порошка $Al_2O_3$ благодаря своей низкой электропроводности и высокой температуре плавления остались в твердом состоянии.

Быстрый переход металлической фольги из твердого состояния в плазму и ее последующие высокоскоростное расширение создало ударную волну, распространяющуюся со сверхзвуковой скоростью. Эта ударная волна обладала значительной энергией и ускоряла окружающие частицы.

Таким образом твердые частицы $Al_2O_3$, увлеченные ударной волной, выталкивались к обрабатываемой подложке. При соударении с поверхностью эти частицы внедрялись в серебряную матрицу. При этом из-за своей высокой твердости рассматриваемые частицы сохраняли свою форму при внедрении в металлическую матрицу.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10012, https://rscf.ru/project/22-79-10012/.*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.247

# Особенности формирования структуры многослойных покрытий электровзрывным методом

**Филяков А.Д., Чумачков И.И., Почетуха В.В.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Россия,*
*filyakov.1999@mail.ru*

Электровзрывное напыление осуществлялось с использованием установки ЭВУ 60/10 М. Установка включает в себя зарядное устройство, емкостный накопитель энергии и плазменный ускоритель.

Нанесение покрытия происходило в два этапа. Первый этап включал нанесение на подложку из быстрорежущей стали марки Р6М5 медного покрытия. В качестве электровзрывного проводника использовался спрессованный в тонкую пластину толщиной 140 мкм медный порошок. На втором этапе поверх полученного медного покрытия производилось нанесение слоя алюминиевого покрытия. Для второго этапа электровзрывным проводником выступала полоска из алюминиевой фольги толщиной 3 мкм. Микроанализ структуры поперечного сечения покрытия осуществляли с помощью сканирующего электронного микроскопа KYKY-EM6900. Исследование элементного состава проводили методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

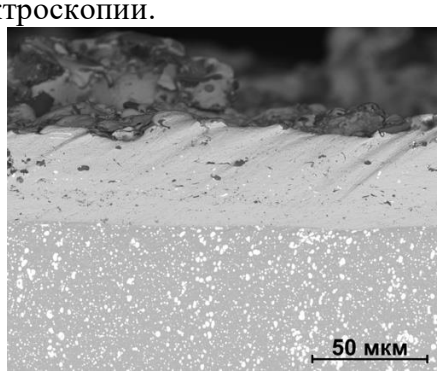



Рисунок 1. СЭМ изображения структуры покрытия, состоящего из меди и алюминия, нанесенного электровзрывным методом на стальную подложку

Средняя толщина полученных покрытий составляет 50 мкм. Видимой границы между слоями алюминия и меди не наблюдается. Алюминий присутствует в виде затвердевших капель на поверхности медного слоя, а также в качестве темных включений в его объеме.

Из этого можно сделать вывод, что при осуществлении второго этапа произошло проникновение алюминия в медный слой. Глубина проникновения достигает 40 мкм. На снимке отчетливо видны темные включения алюминия различной формы в медной матрице. С увеличением глубины проникновения размер включений уменьшается.

При воздействии гетерогенного плазменного потока, полученного при электрическом взрыве алюминиевой фольги, возникали локальные зоны плавления и диффузии на поверхности медного слоя, что привело к образованию интерметаллидов, твердых растворов и крупных включений в медной матрице.

Предполагается, что крупные конденсированные частицы, двигающиеся с высокой скоростью, могли генерировать ударные волны, возмущающие границу раздела между слоями, что способствовало их проникновению вглубь расплавленного медного слоя и образованию включений.

Однако конкретный механизм перемешивания слоев под действием гидродинамических устойчивостей при электровзрывном напылении предстоит выяснить.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.248

# Зарождение и динамика магнитных скирмионов под действием спин-поляризованного тока

**Хизриев К.Ш., Тааев Т.А.**
*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия, kamal71@mail.ru*

Магнитные скирмионы благодаря своим малым размерам (вплоть до нескольких нанометров), топологической защищенности и высокой подвижности под действием спин-поляризованного тока являются наиболее перспективными системами для создания сверхплотной магнитной памяти [1-3]. Создание и управление скирмионами являются самими актуальными проблемами в исследованиях магнитных скирмионов в настоящее время. Большую роль в этом играют неоднородности пленок и различные дефекты, которые всегда присутствуют на микро- и наномасштабном уровне. Устойчивость скирмионов в присутствии немагнитных дефектов подробно исследовались в рамках теории переходного состояния [4], где было показано, что зарождение и аннигиляция скирмиона действительно энергетически выгодны на немагнитных дефектах.

В настоящей работе мы представили модель магнитного бегового трека с дефектами структуры для создания стабильных скирмионов с помощью спин-поляризованного тока. При этом был использован пакет микромагнитного моделирования MuMax3 для расчета динамики намагниченности с помощью уравнения Ландау-Лифщица-Гильберта[5]:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \gamma \frac{1}{1+\alpha^2}\left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha\left(\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}\right)\right)\right) + \tau_{ZL}\,, \qquad (1)$$

где $\tau_{ZL}$ слагаемое, описывающее крутящий спиновый момент Жанга-Ли [6]:

$$\tau_{ZL} = \frac{b}{1+\alpha^2}\{\vec{m} \times (\vec{m} \times (\vec{j} \cdot \nabla)\vec{m}) + (\beta - \alpha)\vec{m} \times (\vec{m} \times (\vec{j} \cdot \nabla)\vec{m})\} \qquad (2)$$

где $\gamma$ - гиромагнитное соотношение, $\alpha$– коэффициент затухания, $m$– нормированная намагниченность, $H_{eff}$ – эффективное поле, $j$ - вектор плотности тока, $\beta$ - неадиабатический фактор, $b = P\mu_B/eM_s(1+\beta^2)$, $P$ - поляризация плотности тока, $\mu_B$ - магнетон Бора, $e$ - заряд электрона. Эффективное поле $H_{eff}$ определяется производной свободной энергии $E$ по намагниченности:

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s}\frac{\delta E}{\delta \vec{m}}\,. \qquad (3)$$

Нами были получены условия зарождения магнитных скирмионов в зависимости от размера и характера дефекта, а также величины спин-поляризованного тока. Контролируя величину спин-поляризованного тока (управляя амплитудой плотности тока и временем импульса), удалось воспроизвести двоичную систему записи информации, в которой скирмион играл роль бита информации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 25-22-20086.

## Литература

1. Muhlbauer S., et al. // Science. – 2009. – V. 323. – P. 915
2. Back C., et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. –2020. – V. 53. – P. 363001
3. Parkin S.S.P., et al. // Science. – 2008. – V. 320. – P. 190
4. Bessarab P.F., et al. // Computer Physics Communications. – 2015. – V. 196. – P. 335
5. Vansteenkiste A., et al. // AIP Advances. – 2014. – V. 4. – P. 107133
6. Menezes R. M., et al. // Physical Review B. – 2019. – V. 99. – P. 104409

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.249

# Электронные транспортные свойства и температура сверхпроводящего фазового перехода в соединении с волной зарядовой плотности и неидеальным нестингом

**А. В. Цветкова[1], Я. И. Родионов[2], П. Д. Григорьев[1,3]**
[1]*НИТУ «МИСИС», Москва, Россия, al.v.tsvetkova@yandex.ru*
[2]*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва, Россия, yaroslav.rodionov@gmail.com*
[3]*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия, grigorev@itp.ac.ru*

В некоторых квазидвумерных соединениях в силу особенности электрон-фононного взаимодействия формируется волна зарядовой плотности (ВЗП) с нестирующим вектором $\boldsymbol{Q}$. В результате такого фазового перехода в спектре электронов открывается щель $\Delta$, однако в случае неидеального нестинга металлическая проводимость соединения может сохраняться. В нашей работе [1] мы исследовали модель, описывающую такие системы в квазиодномерном приближении. Было показано нетривиальное поведение электронной плотности состояний: при различных значениях энергии она имеет скачок первого рода и логарифмическую расходимость (рис. 1). Величина нарушения нестинга описывается параметром $\Delta_1$. На основе результата численным методом было рассчитано сопротивление соединения как функция температуры. Полученные данные качественно совпадают с экспериментальными из работы [2].

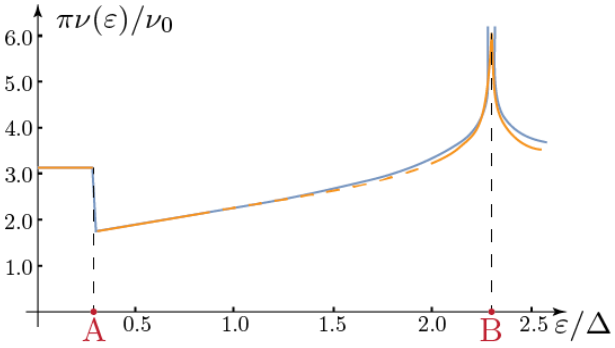



Рисунок 1. Аналитический (оранжевая кривая) и численный (синяя кривая) результаты расчета электронной плотности состояний. В точке A $\varepsilon = \Delta_1 - \Delta$ функция имеет скачок, в точке B $\varepsilon = \Delta_1 + \Delta$ – логарифмическую расходимость. $\nu_0$ – металлическая проводимость в отсутствие ВЗП.

Известно, что в некоторых высокотемпературных сверхпроводниках так же может возникать и волна зарядовой плотности. Особенности электронной плотности состояний приводят к перенормировке критической температуры сверхпроводника:

$$T_c = \left(\frac{\Delta_1 - \Delta}{\omega_D}\right)^{\delta\nu/\nu_0} T_0, T_0 = \omega_D e^{-1/\nu_0 g}, \nu_0 = \frac{1}{\pi v_F b}, \delta\nu = \frac{1}{\pi v_F b}\sqrt{\frac{\Delta}{\Delta_1}}, \qquad (1)$$

где $T_0$ – стандартная критическая температура сверхпроводника без ВЗП, полученная в теории БКШ; $b$ – постоянная решетки, $v_F$ – скорость Ферми.

Результаты данной работы уточняют и обобщают выводы работы [3].

Исследование выполнено при поддержке фонда «БАЗИС», грант № 22-1-1-24-9, и НИТУ МИСИС, грант № К2-2022-025.

## Литература

1. Tsvetkova A. V., Rodionov Y. I., Grigoriev P. D. //arXiv preprint arXiv:2501.00341. – 2024.
2. Sinchenko A. A. et al. //Physical Review Letters. – 2014. – V. 112. – №. 3. – P. 036601.
3. Grigoriev P. D. //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2008. – V. 77. – №. 22. – P. 224508.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.250

# ПЭМ-СТРУКТУРА ПЛАЗМЕННОЙ НАПЛАВКИ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ Р18 НА СТАЛЬ 30ХГСА

**Чапайкин А. С., Романов Д.А., Громов В.Е.**
*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,*
tchapajkin.s@yandex.ru

В настоящем материале сообщается о достигнутых исследованиях тонкой структуры покрытия из быстрорежущей стали Р18, полученного на поверхности стали 30ХГСА методом плазменной наплавки в среде азота. Тонкая структура покрытия исследована с использованием метода просвечивающей электронной микроскопии.

Микроструктура зоны наплавки. В области наплавки наблюдается ОЦК матрица с большой объемной долей карбидов $Fe_3W_3C$ ($M_6C$). Карбиды намного толще по сравнению с ОЦК матрицей (электронный пучок дает слабые рефлексы) и судя по изображениям составляют около 50 % объема исследованных участков фольг. Объемная доля карбидов на изображениях зачастую больше, чем матрицы, поскольку электролитически ОЦК матрица быстрее полируется. В результате остается остов («скелет») из карбидов различной морфологии. На дифракционных картинах принадлежность карбидов к фазе $M_6C$ определяется однозначно (совмещенный шаблон электронограммы ОЦК-Fe + $Fe_3W_3C$. Во многих случаях рефлексов от матрицы практически не видно (только рефлексы от карбида быстрорежущей стали). В тех случаях, когда видно матрицу, можно отметить, что она представляет собой феррит (ОЦК) с довольно высокой локальной плотностью дислокаций (1010 – 1011 см-2, оценочно).

Карбиды $M_6C$, которые встречаются в исследуемой фольге имеют различные размеры и морфологию. Это могут быть удлиненные толстые пластины (в несколько микрон длиной), квадратные, округлые, либо неправильной формы частицы, часто представляющие собой конгломераты (сгустки). Матрица (ОЦК феррит) упрочнена карбидами типа $M_6C$. Элементный анализ подтверждает, что частицы обогащены W, однако карбид сложнолегированный и в нем есть еще Fe, V, Cr, Si, C (подробно в папке – карты и по анализ по точкам). В феррите содержание W значительно меньше, чем в карбидах.

Дислокационная структура ферритных областей между карбидными частицами: наблюдаются как вытянутые прямолинейные дислокации, так и их различные скопления (в данном участке плотность дислокаций невысока). Дифракционная картина подтверждает, что в данном участке феррит – основная фаза.

В других участках фольг наблюдается ламельная структура матрицы, типичная для мартенсита. В такой структуре карбиды $M_6C$ практически отсутствуют (их плотность значительно ниже). Для нее характерны многочисленные разориентировки, отвечающие за разориентации в мартенситных пакетах. Принадлежность к ОЦК решетке определяется по совмещенной электронограмме при той же постоянной прибора (токе объективной линзы), что и снятые ранее дифракционные картины с частиц $M_6C$. В мартенсите плотность дислокаций не менее $10^{11}$–$10^{12}$ $см^{-2}$, оценочно, поскольку в некоторых участках отдельные дислокации трудноразличимы. Дифракционная картина подтверждает, что основная фаза в данном участке фольги – ОЦК. Встречаются области и с наноразмерными карбидными частицами $M_6C$. Однако это не характерно для данного структурного состояния.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, https://rscf.ru/project/23-19-00186.*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.251

# Высокоэнтропийная керамика для определения вклада ионной (протонной) проводимости в электронных проводниках

**Шляхтина А.В.[1], Балдин Е.Д.[1], Горшков Н.В.[2], Столбов Д.Н.[3], Лысков Н.В.[4]**

[1] *Федеральный научно-исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия,* E-mail: annashl@inbox.ru

[2] *Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина, Саратов, Россия,* E-mail: gorshkov.sstu@gmail.com

[3] *Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия,* E-mail: stolbovdn@gmail.com

[4] *Федеральный научно-исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия,* E-mail: lyskov@icp.ac.ru

Серия твердых растворов с высоким содержанием $Tb_2O_3$ – $((Tb_xTi_{1-x})_4O_{8-2x}$ ($x$ = 0.667–0.83) синтезирована в системе $Tb_2O_3$–$TiO_2$ методом совместного осаждения и/или механической активации с последующим высокотемпературным отжигом в течение 4–22 ч. Методом РСА показано, что структура флюорита реализуется для $(Tb_xTi_{1-x})_4O_{8-2x}$ при $x$ = 0.75–0.817. Установлено, что максимальной дырочной проводимостью ~ 20-70 См/см при 600 °С обладает твердый раствор $Tb_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$ (64 мол. % $Tb_2O_3$) со структурой флюорита. Для выделения ионной составляющей проводимости в электронном проводнике $Tb_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$ синтезирован его высокоэнтропийный аналог (ВЭА) – $(La_{0.2}Gd_{0.2}Tm_{0.2}Lu_{0.2}Y_{0.2})_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$, у которого все РЗЭ катионы имели зарядовое состояние 3+. В результате выявлен вклад ионной (протонной) проводимости (~ $7\times10^{-6}$ См/см при 600 °С) на фоне доминирующей дырочной. Протонная проводимость $(La_{0.2}Gd_{0.2}Tm_{0.2}Lu_{0.2}Y_{0.2})_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$ подтверждена обнаружением изотоп–эффекта, при котором подвижность более крупных O-D ионов меньше, чем у O-H гидроксид ионов, что приводит к более низкой проводимости в парах дейтерированной воды $D_2O$ по сравнению с $H_2O$.

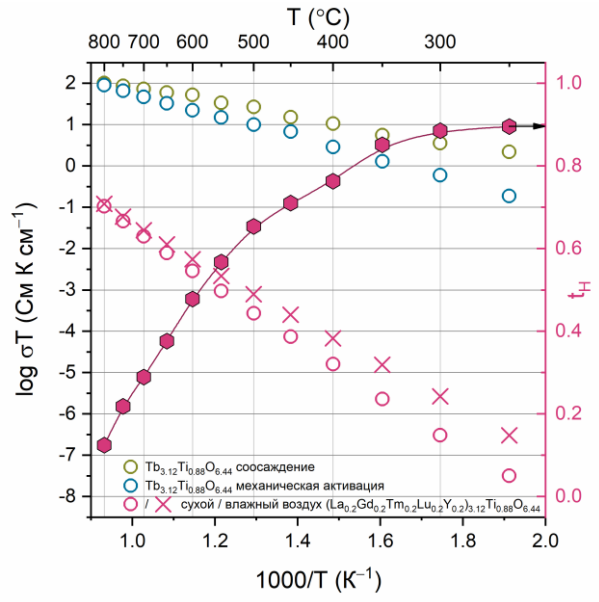



**Рис.1.** Температурная зависимость проводимости твердых растворов $Tb_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$, полученных соосаждением и механической активацией, и $(La_{0.2}Gd_{0.2}Tm_{0.2}Lu_{0.2}Y_{0.2})_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$ в сухом и влажном воздухе. Заполненные шестиугольники указывают числа переноса протонов для $(La_{0.2}Gd_{0.2}Tm_{0.2}Lu_{0.2}Y_{0.2})_{3.12}Ti_{0.88}O_{6.44}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Междисциплинарные подходы к созданию и исследованию микро-/наноструктурированных систем» (регистрационный номер 125012200595-8).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.252

# Полиморфизм, проводимость и каталитические свойства вольфраматов $Ln_2WO_6$ (*Ln* = Sm, Eu) и их высокоэнтропийных аналогов

**Балдин Е.Д.[1], Лысков Н.В[2], Гордиенко Ю.А.[1], Воробьева Г.А.[1], Бычков В.Ю.[1], Шляхтина А.В.[1]**

[1] *Федеральный научно-исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия,* E-mail: annashl@inbox.ru
[2] *Федеральный научно-исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия,* E-mail: lyskov@icp.ac.ru

Поиск альтернатив обычному сжиганию природного газа и биогаза, приводящего к парниковому эффекту, является актуальным [1]. Реакции конверсии метана даже при высоких температурах зависят от катализаторов, которые должны в идеале селективно генерировать только желаемые продукты (этан, этилен) при высоких скоростях конверсии метана.

В настоящей работе изучено фазообразование некоторых вольфраматов РЗЭ $Ln_2WO_6$ (*Ln* = Sm, Eu) и их высокоэнтропийных аналогов (ВЭА) из механически активированной смеси исходных оксидов (высокоэнергетическая эксцентриково-вибрационная шаровая мельница) с последующей термообработкой. Основной принцип выбора высокоэнтропийных композиций – это соответствие ионного радиуса набора лантаноидов среднему радиусу $Sm^{3+}$ или $Eu^{3+}$, соответственно. Таким образом, состав $(La_{0.25}Nd_{0.25}Gd_{0.25}Tm_{0.25})_2WO_6$ предложен в качестве ВЭА $Sm_2WO_6$ и состав $(La_{0.2}Nd_{0.2}Gd_{0.2}Tm_{0.2}Y_{0.2})_2WO_6$ как ВЭА $Eu_2WO_6$.

Для $Sm_2WO_6$ найдены условия синтеза новых модификаций $\beta$-$Sm_2WO_6$, $\alpha$-$Sm_2WO_6$, $\delta$-$Sm_2WO_6$, которые реализованы впервые, а также моноклинной *m*-$Sm_2WO_6$ высокотемпературной, известной ранее. Для $Eu_2WO_6$ столь богатый полиморфизм не характерен, и получена только моноклинная модификация *m*-$Eu_2WO_6$. Высокоэнтропийные аналоги исследованных вольфраматов кристаллизовались в тетрагональной сингонии [2].

Методом импедансной спектроскопии в сухом и влажном воздухе исследована общая проводимость различных полиморфов $Sm_2WO_6$, моноклинного $Eu_2WO_6$ и их высокоэнтропийных аналогов. Максимальную проводимость показали ВЭА $Ln_2WO_6$ (*Ln* = Sm, Eu) с энергией активации типичной для кислород-ионных проводников ~0.7 эВ. Низкотемпературные модификации β-$Sm_2WO_6$, α-$Sm_2WO_6$ и δ-$Sm_2WO_6$ имели проводимость на порядок ниже, но при этом демонстрировали протонный вклад в общую проводимость.

Впервые исследованы каталитические свойства 3-х модификаций $Sm_2WO_6$, $Eu_2WO_6$ и ВЭА $Eu_2WO_6$ в реакции окислительной конденсации метана. Наилучшее соотношение между активностью и селективностью вольфраматов как катализаторов этой реакции получено для $Eu_2WO_6$ и его высокоэнтропийного аналога.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Междисциплинарные подходы к созданию и исследованию микро-/наноструктурированных систем» (регистрационный номер 125012200595-8).

## Литература

1. Vazquez Thyssen V., Bezerra Vilela V., Zanetti de Florio D., Santarosa Ferlauto A., Coral Fonseca F.// Chem. Rev. – 2022., Т. 122. С. – 3966-3995.
2. Efremov V.A. Characteristic features of the crystal chemistry of lanthanide molybdates and tungstates//Russ. Chem. Rev. – 1990. – V. 59. – №. 7, – P. 627-642.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.253

# Автоматизация работы с данными в первопринципном моделировании низкоразмерных материалов

**Якименко А. Д.[1], Аникина Е. В.[2]**
[1]*ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия,* ocnovnoy.exp@gmail.com
[2]*ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия,* anikinaev@susu.ru

Первопринципное моделирование позволяет исследовать с достаточно высокой точностью структуру и свойства даже тех материалов, которые еще не были получены в лабораторных условиях. Но для получения качественных результатов необходимо осуществлять тонкую настройку параметров моделирования, которая может занимать заметное время из-за необходимости тестирования множества значений. Без такой настройки результаты численных экспериментов слабосвязанных систем (например, слоистых систем, образованных монослоями [1]) могут быть слишком далекими от действительности. В связи с этим актуальной задачей становится разработка инструментов, позволяющих автоматизировать процесс выбора параметров моделирования, что снизит вероятность возникновения ошибок из-за человеческого фактора.

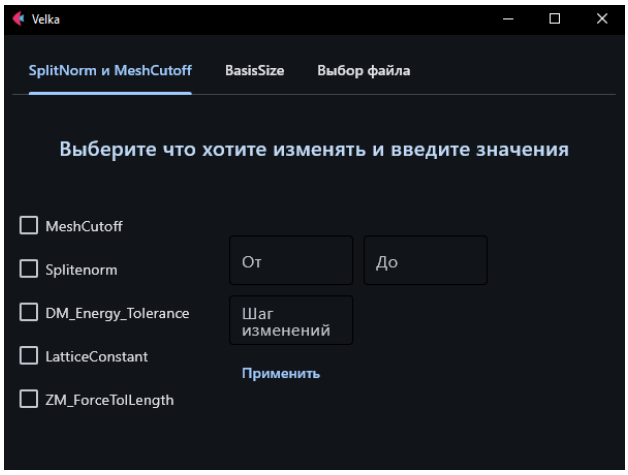


Рис. 1. Диалоговое окно «GUI для SIESTA»

В данной работе был создан графический пользовательский интерфейс (GUI) на языке Python, который упрощает взаимодействие с программным пакетом SIESTA [2]. Разработанный GUI помогает автоматизировать подготовку входных файлов, запуск расчетов и обработку результатов, являясь интуитивно понятной надстройкой над основным пакетом. На рис. 1 представлен раздел программы, посвященный выбору различных параметров, влияющих на точность вычислений. Пользователь может выбирать параметр и границы его изменения, программа сама создаст серию входных файлов, уже готовых для запуска.

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

## Литература

1. Kaplun M.V., Anikina E.V., Beskachko V.P. // Bull. South Ural State Univ., Ser. Math. Mech. Phys. – 2022. – V. 14. – № 2. – P. 64-71.
2. Soler J.M. et al. // J. Phys. Condens. Matter. – 2002. – V. 14. – № 11. – P. 2745–2779.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.254

# Механические характеристики титанового сплава ВТ6, полученного методом прямого лазерного выращивания.

**Якупов Б.А.[1,*], Евстифеев А. Д.[1]**

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия,*b.yakupov@spbu.ru*

В работе сравниваются механические свойства титанового сплава ВТ6, изготовленного методом прямого лазерного выращивания (далее - ВТ6_АТ) и методом проката (далее - ВТ6_R). Были выполнены квазистатические испытания на одноосное растяжение при комнатной температуре с определением условного предела текучести, временного сопротивления разрыву и относительного удлинения, и динамические испытания на растяжение по методике Кольского с использованием разрезных стержней Гопкинсона [1].

При квазистатической нагрузке выявлено, что аддитивно полученный сплав ВТ6_АТ обладает условным пределом текучести $\sigma_{0.2}$ = 870±17 MPa и временным сопротивлением разрыву $\sigma_{UTS}$ = 1040±16 MPa при относительном удлинении $\delta$ = 18±1 %. Для образцов ВТ6_R значения $\sigma_{0.2}$ составили 920±12 MPa, $\sigma_{UTS}$ =1070±9 MPa, а удлинение $\delta$ = 12±1 %. Таким образом, ВТ6_R продемонстрировал более высокую прочность, однако пластические характеристики ВТ6_АТ оказались выше.

Динамические испытания были проведены при скорости деформации порядка 9000 $с^{-1}$ и показали, что для ВТ6_R предел прочности составляет 1540±20 MPa, в то время как у ВТ6_АТ этот показатель достигает 1690±70 MPa.

Для описания скоростной зависимости предельного значения напряжений разрушения от скорости роста напряжений был применен критерий инкубационного времени и для каждого материала вычислен параметр инкубационного времени $\tau$ [2]. Для его корректного определения исходные сигналы сглаживались методом скользящего среднего с окнами от 1 до 6 μs, после чего был выбран наиболее достоверный интервал $\tau$ [3]. Полученные для ВТ6_АТ значения $\tau$ лежат в диапазоне 8.15–8.69 μs, а для ВТ6_R - в интервале 6.35–7.04 μs. Построенные теоретические кривые хорошо согласуются с экспериментальными данными. Полученные результаты демонстрируют инверсию прочности при ударном нагружении. Несмотря на сниженные прочностные характеристики аддитивно полученного материала в области квазистатического нагружения, материал оказывается прочнее полученного стандартным методом проката в области высоких скоростей нагружения за счет большего значения динамической прочности.

Результаты квазистатических и динамических испытаний свидетельствуют о перспективности применения метода прямого лазерного выращивания для изготовления ответственных деталей из сплава ВТ6, работающих как в условиях статических нагрузок, так и при высокоскоростном динамическом нагружении.

Представленное исследование финансировалось за счет гранта РНФ № 22-79-10043.

## Литература

1. Bragov A. M., Lomunov A. K. Methodological aspects of studying dynamic material properties using the Kolsky method //International journal of impact engineering. – 1995. – Т. 16. – №. 2. – С. 321-330.
2. Petrov Y. V. Incubation Time Criterion and the Pulsed Strength of Continua: Fracture, Cavitation, and Electrical Breakdown //Doklady Physics. – 2004. – Т. 49. – №. 4.
3. Евстифеев А. Д., Волков Г. А. Вариационный подход к определению динамической прочности материала //Журнал технической физики. – 2022. – Т. 92. – №. 2. – С. 274-278.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.255

# Исследование механических свойств наноструктурной меди после обработки гидроэкструзией

**Яшарова Е.В.[1,2], Гангало А.Н.[1,3], Суровицкий В.Д.[1], Сенникова Л.Ф.[1], Бурховецкий В.В.[1], Глазунова В.А.[1], Ткаченко В.М.[1]**
[1]ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, РФ
[2]ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», г. Донецк, РФ
[3]ФГБНУ «Институт физики горных процессов», г. Донецк, РФ
yasharova.liza@yandex.ru

Наноструктурные материалы (НС) обладают уникальными механическими, физическими свойствами, вызывают высокий научный и практический интерес. Получают их с использованием методов интенсивной пластической деформации. Однако эти методы не являются формообразующими, и для повышения коэффициента использования материала необходимо последующее применение традиционных методов обработки давлением. Одним из которых является метод гидроэкструзии (ГЭ), позволяющий проводить обработку при высоких уровнях сжимающих напряжений, что благоприятно сказывается на изменение механических свойств. При этом влияние ГЭ на изменение свойств НС материалов на данный момент мало изучено. Цель данной работы заключается в изучении влияния ГЭ на изменение механических свойства НС меди.

Исследуемым материалом выступила медь марки М0б, переведенная в НС состояние (размер зерен 200-300нм) методом равноканального углового прессования. В исходном состоянии предел кратковременной прочности $\sigma_в$=434 МПа и относительное удлинение δ=19,3%.

Гидроэкструзия проводилась на установке с рабочим диаметром контейнера 22мм, выходным диаметром конической матрицы 11мм и ее углом конусности $2\alpha=20^0$. Исследование разовой степени деформации ГЭ осуществляли в интервале от 0,3 до 1,2 с шагом в 0,3. Деформация определялась как $\varepsilon = \ln(D_0^2/D_м^2)$, где $D_0$ – исходный диаметр заготовок после токарной обработки.

Оценка влияния деформации ГЭ на механические свойства материала осуществлена методом испытания на растяжение. Из заготовок, обработанных ГЭ, вытачивали образцы по ГОСТ 1497–84 (III тип) с диаметром разрывной части 5 мм. Для качественного и количественного анализа поверхности разрушения применяли визуальный осмотр и сканирующую электронную микроскопию.

Анализ поверхности излома показал, что НС медь после РКУП имела вязкое разрушение по типу «конус» с углом наклона к оси нагружения $\alpha=50^0$. Поверхность разрушения состоит из одной волокнистой зоны. Проекция излома на плоскость, перпендикулярную оси нагружения, имеет овальную форму с изопериметрическим коэффициентом $k_i$=0,81. Такое формирование поверхности разрушения обусловлено особенностью напряженно-деформированного состояния при РКУП. С деформацией ГЭ тип разрушения переходит в «чашка-конус», а угол наклона излома постепенно растет с ее увеличением, достигая $\alpha=90^0$ при максимальной деформации $\varepsilon = 1.2$, где разрушение переходит в тип «чашка»; появляется зона среза, доля которой увеличивается с γ=0 до γ=0.53; изопериметрический коэффициент растет с $k_i$=0,81 до $k_i$=0,98.

В зависимости от разовой степени деформации ГЭ механические свойства НС меди, можно повысить: твердость в поперечном направлении при ε=0,3 с 1360МПа до 1414МПа; прочность при ε=0,6 до 476МПа; пластичность при ε=1,2 относительное удлинение с 19% до 21% и относительное сужение с 77% до 91%.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.256

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ДАВЛЕНИЯ И КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ РАСТВОРА ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

**Гуськов А. П.**

*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,*
guskov@issp.ac.ru

Мотивацией предлагаемой работы явились эксперименты, в которых исследовалось распределение концентрации компонентов в фазах при стационарной кристаллизации двухкомпонентных растворов в условиях плоской межфазной границы. Во многих экспериментах наблюдалась разная концентрация компонентов в фазах вдали от приграничного диффузионного слоя. Некоторые эксперименты описаны в статьях [1,2]. Известные модели описания фазовых переходов при таких условиях кристаллизации дают равные концентрации. Разные концентрации объясняются обычно гидродинамическими течениями вблизи межфазной границы. Однако в ряде экспериментов [1,2] гидродинамические течения отсутствовали, и тем не менее концентрации компонентов в растворах фаз были различны. Чтобы объяснить наблюдаемое распределение концентрации в работах [1,2] в уравнение диффузии вводилось давление. В работе [1] учитывалось давление, входящее в химический потенциал. Однако решение такой задачи не смогло объяснить эксперименты. Объяснение было дано в статье [2]. Различие в концентрациях объяснялось влиянием внешнего давления, которое появляется под действием вытягивающей кристалл силы. Эта сила вводилась в виде дополнительного слагаемого к химическому потенциалу [3]. В [2] предполагалось, что внешняя сила имеет вид линейной зависимости от пространственной координаты, а ее связь с концентрацией компонентов определялась обобщенным уравнением Фика. В этом случае появляется дополнительная степень свободы – перемещение компонентов раствора вне диффузионного слоя под действием внешней силы. Скорость этого перемещения зависит от величины силы и от подвижности компонента в рассматриваемой фазе. Для выполнения условия сохранения массового потока компонента, вне диффузионного слоя в фазах должны быть разные концентрации компонентов.

В предлагаемой работе для описания связи между распределением концентрации и распределением давления используется линейная неравновесная термодинамика [3,4]. Процесс кристаллизации описывается уравнениями потоков диффузии и импульса. В этих уравнениях учитываются различия в коэффициентах диффузии компонентов и перекрестные эффекты. Появляются неожиданные эффекты, связанные с взаимодействием между потоками диффузии отдельных компонентов и потоком импульса. Например, при равенстве прямых коэффициентов диффузии компонентов и равенстве их перекрестных эффектов, в диффузионном слое имеет место только распределение давления, связанное с внешней силой. В общем случае внешнее давление складывается с давлением, возникающим от взаимодействия компонентов раствора с межфазной границей. Этот эффект может влиять, например, на формирование структуры твердой фазы.

**Литература.**

1. Alex Guskov. The condition for the conservation of momentum at the interface under phase transitions of solutions. J. Phys. Commun. 5 (2021) 055014 pp. 1-12. Q. https://doi.org/10.1088/2399-6528/abffc4.
2. Гуськов А.П. Сегрегация компонентов межфазной границей при фазовых переходах растворов. Композиты и наноструктуры, 2023, т.15, №2, стр. 74-94. doi.org/10.36236/1999-7590-2023-15-2-74-94.
3. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. «Мир», 2002, 462 с.
4. С. Де Гроот, П, Мазур. Неравновесная термодинамика. МИР, М., 1964.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.257

# Мемристивные состояния в низкоразмерных структурах, контролируемые фото-электро- индуцированными фазовыми переходами

**Панин Г.Н.[1], Емелин Е. В.[1], Капитанова О.О.[2,3], Буйлова М. А.[1,4], Сорокин П.Б.[1,4]**

*[1]Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия, panin@iptm.ru*
*[2]Химический факультет МГУ, Москва, Россия*
*[3]Центр фотоники и 2D-материалов МФТИ, Долгопрудный, Россия*
*[4]НИТУ МИСИС, Москва, Россия*

Низкоразмерные структуры, на основе двумерных и одномерных материалов [1-3] обладают уникальными структурными и электронными свойствами необходимыми для разработки быстрых и энергоэффективных мемристорных и фото-мемристорных устройств [4-7] для нано-информационных технологий. Низкоразмерные гетероструктуры графен/оксид графена, полученные локальным восстановлением оксида графена электронным пучком [7] демонстрируют нелинейное поведение и хорошо контролируемые мемристивные состояния при малых напряжениях смещения <1 В.

В данной работе рассмотрены структурные фазовые переходы в мемристорных структурах на основе низкоразмерных кристаллов при возбуждении их электронами и светом для контроля энергонезависимых резистивных состояний, детектирования и обработки электрических и оптических сигналов. Облучение структур биграфен/полиметилметакрилат (ПММА) электронами приводит к функционализации биграфена с образованием $sp^3$ связей атомов углерода и фазовому переходу биграфена в диаман [8, 9]. Изменения интенсивности и положения пиков в спектрах комбинационного рассеяния, облученных электронным пучком областей биграфена, а также изменение их резистивных состояний, указывает на локальный фазовый переход двухслойного графена с образованием углерода, связанного с атомами водорода и кислорода.

Моделирование модифицированной структуры биграфена на подложке $La_3Ga_5SiO_{14}$ и экспериментальная оценка доли $sp^3$-гибридизованного углерода указывают на образование нанокластеров диамана в биграфене, локально облученном электронами, и возможности контроля фазовых переходов и мемристивных состояний светом в электрическом поле.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-49-00159)

## Литература

1. G.N. Panin, et al. // Jap. J. Appl. Phys. – 2011. – V. 50. – P. 070110.
2. G. N. Panin, at al. // AIP Proc. – 2007. – V. 893. – P. 743.
3. O. O. Kapitanova et. al. // Nanotechnology. – 2017. – V. 28, – № 20. – C. 204005
4. G.N. Panin // Electronics. – 2022, – V. 11. – C. 619.
5. Wang, W., Panin, G., Fu, X. et al. // Sci. Rep. – 2016. – V. 6. – C. 31224.
6. Xiao Fu, et al. // Light Sci. Appl. – 2023. – V12. – C. 39.
7. O.O. Kapitanova, et al. // J. Mat. Sci. Tech. – 2020. – V.38, – C. 237.
8. L.A. Chernozatonskii, et al. // JETP Lett. - 2009. -V. 90. - C. 134.
9. E.V. Emelin, et al. // Nanomaterials. – 2022, –V. 12. – C. 4408.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.258

# Модификация электронной и спиновой структуры графена при гибридном контакте с магнитными и тяжелыми металлами

**Гогина А. А.[1], Тарасов А. В. [1], Рыбкина А. А. [1], Пудиков Д. А. [1], Шикин А. М. [1] и Рыбкин А. Г[1]**

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
*alevtina_gogina@mail.ru*

Актуальной задачей современного материаловедения является поиск новых эпитаксиальных наноструктур для реализации квантовых эффектов в спинтронике. Одним из перспективных подходов является создание структур на основе графена в контакте с магнитными и тяжёлыми металлами для усиления спин-орбитального и обменного взаимодействия при сохранении уникальной дираковской структуры графена [1,2]. Существуют различные методы получения таких структур, среди них: синтез графена на металлических подложках с дополнительной интеркаляцией атомов металлов; интеркаляция атомов магнитных и тяжёлых металлов под графен на полупроводниковой подложке (например, SiC).

Создание гибридных интерфейсов на основе графена с ферромагнитными и тяжёлыми металлами является многообещающим подходом к реализации перпендикулярной магнитной анизотропии (ПМА) и других квантовых эффектов таких как квантовый аномальный эффект Холла и эффекта Рашбы — Эдельштейна. Например, контакт графена с интеркалированными атомами Co на монокристаллических металлических подложках Pt(111) [3,4] и Ir(111) [5] приводит к усилению ПМА за счёт сильной гибридизации 3*d*- и 5*d*- состояний, а также к возникновению с спинового in-plane расщепления в системе графен/Co/Ir(111) до ~100 мэВ с незначительным out-of-plane расщеплением [6], что является отличительной чертой СОВ типа Рашбы.

В нашей работе мы провели комплексные экспериментальные и теоретические исследования влияния Co и Ir на СОВ и обменное взаимодействие в графене. Показано влияние толщины плёнки Co и взаимного расположения подрешёток графена и атомов Co на магнетизм и спин-орбитальное взаимодействие в графене. Результаты показывают наличие неколлинеарного ферримагнитного порядка магнитных моментов на атомах углерода и Co в данной системе и их зависимость от толщины плёнки кобальта. В рамках работы, также проведён синтез эпитаксиальных слоистых наноструктур на основе графена на полупроводниковой подложке SiC в контакте с тяжёлыми и магнитными металлами.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-12-00016, https://rscf.ru/project/23-12-00016/. Выражается благодарность Научному парку СПбГУ и Лаборатории электронной и спиновой структуры наносистем СПбГУ (Номер учета НИР в системе ЕГИСУ НИОКТР: 125022702939-2).

## Литература

1. Rybkin A. G. et al. //Nano Letters. – 2018. – Т. 18. – №. 3. – С. 1564-1574.
2. Rybkin A. G. et al. //Physical Review Letters. – 2022. – Т. 129. – №. 22. – С. 226401.
3. Weinert P. et al. //Nanotechnology. – 2024. – Т. 35. – №. 16. – С. 165702.
4. Ajejas F. et al. //Nano Letters. – 2018. – Т. 18. – №. 9. – С. 5364-5372.
5. Yang H. et al. //Nano Letters. – 2016. – Т. 16. – №. 1. – С. 145-151.
6. Muñiz Cano B. et al.//ACS Nano. – 2024. – Т. 18. – №. 24. – С. 15716-15728.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.259

# Фотодинамические процессы и лазерная генерация в Ce-активированных фторидных кристаллах

**А. С. Низамутдинов[1], А. А. Шавельев[1], С. Л. Кораблева[1], В. В. Семашко[1,2]**
[1]*ФГАОУ ВО КФУ, Казань, Россия,* anizamutdinov@mail.ru
[2]*КФТИ им.Е.К.Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*, ua4pcy@mail.ru

Актуальным для технологических применений является переход к лазерам, обеспечивающим генерацию в ультрафиолетовом (УФ) диапазоне спектра и имеющим короткую длительность импульса. Одним из перспективных методов получения УФ-генерации является использование в качестве активных сред фторидных кристаллов, легированных ионами $Ce^{3+}$ [1]. Но проблемой этого подхода является сложная картина фотодинамических процессов в УФ активной среде, приводящих к образованию центров окраски [1]. Как было показано ранее [1], уровень потерь за счет центров окраски не является постоянным и в процессе лазерной генерации определяется факторами их обесцвечивания, т.е. интенсивностью излучения внутри резонатора, внешней подсветки, температурой активной среды. Таким образом, центры окраски являются физической основой для организации модуляции добротности или даже синхронизации мод.

Целью данной работы является исследование фотодинамических процессов в лазерных активных средах, активированных ионами $Ce^{3+}$, при возбуждении в УФ области, и разработка методов управления выходными характеристиками УФ лазеров.

Мы получили лазерную генерацию в форме одиночных коротких импульсов длительностью 400±50 пс в кристаллах $Ce:LiY_{0,3}Lu_{0,7}F_4$ на длине волны 311 нм, как результат модуляции внутрирезонаторных потерь. Дополнительная подсветка активной среды лазерным светом 532 нм увеличивает дифференциальный КПД лазерной генерации за счет обесцвечивания центров окраски. Варьированием температуры активной среды удалось управлять количеством коротких импульсов в последовательности импульсов, по-видимому, за счет управления населенностью центров окраски.

Предложена математическая модель активной среды с вероятностными уравнениями, включающими процессы поглощения из возбужденного состояния, образования и разрушения центров окраски [2]. Результаты аппроксимации показывают, что изменения дифференциального КПД и формы импульса лазерной генерации хорошо описываются эволюцией внутрирезонаторных потерь, обусловленных фотодинамическими процессами. Возникающий контраст потерь достигает значений 50 %.

Работы выполнены за счет субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету в рамках Государственного задания на научные исследования FZSM-2023-0012.

## Литература

1. Sarukura, N. // Optics Letters. – 1995. – V. 20. – P. 599.
2. Farukhshin, I. I., Nizamutdinov, A. S., Korableva, S. L., Semashko, V. V. // Optical Materials Express. – 2016. – V. 6. – P. 1131.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.260

# Формирование дефектов в гексагональном нитриде бора для источников одиночных фотонов

**Гогина О.А.[1,2*], Петров Ю.В.[1,2], Вывенко О.Ф.[1], Прокудина М. Г.[3], Шевчун А. Ф.[3]**

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.*
[2] *ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26, Россия*
[3] *Институт физики твердого тела РАН, лаборатория электронной кинетики, Черноголовка, Россия*
*o_gogina@mail.ru

Интеграция источников одиночных фотонов (ИОФ) в квантовые технологии может повысить безопасность передачи информации, а также увеличить производительность вычислительную систем. Гексагональный нитрид бора (hBN) - один из широкозонных полупроводников (Eg = 6,08 эВ), в котором некоторые дефекты точечного типа являются яркими и оптически стабильными ИОФ, работающими при комнатной температуре. Поэтому важным направление использования таких ИОФ является поиски методов их контролируемого создания, одним их которых является воздействие на образец сфокусированными электронными и ионными пучками.

В настоящей работе представлены результаты комплексного исследования влияния ионного и электронного облучения hBN на спектральный состав и интенсивность катодолюминесценции (КЛ) в кристаллах hBN, выращенных различными методами и характеризующиеся различными исходными спектральными полосами КЛ. Ионное и электронное облучение производились на сканирующих гелиевом ионном микроскопе (СИМ) Zeiss Orion+ и электронном микроскопе (СЭМ) Zeiss SUPRA с системой Gatan MonoCL, соответственно.

Оказалось, что эффект воздействия облучения зависит от способа получения крисссталлов. Так, для образцов, выращенных из бариевого раствора в расплаве, облучение ионами приводило к гашению КЛ всех характерных полос [1], но последующее облучение в СЭМ увеличивало интенсивность полосы КЛ 2 эВ только в областях, облучённых малыми дозами ионов. Для коммерческих кристаллов «Ossila» и «HQ-graphene» ионное облучение с малыми дозами увеличивало интенсивность полосы 3,9 эВ [2–3], а последующее облучение в СЭМ уменьшало ее интенсивность в кристаллах «HQ-graphene», но уменьшало в кристаллах «Ossila» [1, 4].

Разнообразие эффектов воздействия облучения может быть объяснено различием в составе примесей и дефектов в исходных образцах, которые при реакциях с вакансиями и междуузельными атомами, созданными ионным облучением создают или изменяют люминесцентно-активные центры. Роль электронного облучения состоит в генерации неравновесных свободных носителей заряда, которые могут ускорять миграцию дефектов к стокам, а также к созданию на поверхности углеродсодержащего слоя с последующей диффузией углерода в объем..

Исследование выполнено на оборудовании МРЦ по направлению “Нанотехнологии“ научного парка СПбГУ и частично поддержано РНФ, грант № 23-22-00067.

## Литература

1. Петров Ю.В. и др. //Журнал технической физики. – 2023. – Т. 93. – №. 7. – С. 921-927.
2. Гогина О. А. и др.//Письма в ЖЭТФ. – 2025. – Т. 121. – №. 1. – С. 3-9.
3. Petrov Y.V. et al //Physica B: Condensed Matter. – 2024. – Т. 695. – С. 416588.
4. Gogina O.A. et al //St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. – 2024. – Т. 17. – С. 49-54.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.261

# Моделирование кластеризации заряженных частиц на поверхности жидкости

**Лузенина С.А.[1*], Левченко А.А.[1], Лебедева Е.В.[1]**
[1]*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия*
[*] luzeninasa@issp.ac.ru

Исследование посвящено моделированию кластеризации частиц на поверхности жидкости. Для проведения расчётов была написана программа на языке Python, вычисляющая перемещение частиц под действием сил электростатического притяжения с учетом силы сопротивления среды.

При использовании данной программы в качестве вводных данных фигурируют диаметр и количество частиц, число итераций, длина шага по времени, динамический коэффициент вязкости жидкости и средний шаг сетки, которую образуют частицы при начальном местоположении (с небольшими случайными отклонениями). Заряды частиц определяются случайным образом в диапазоне (-1; 1), так что суммарный заряд системы равен нулю. Затем вычисляются расстояния между каждыми двумя частицами и силы взаимодействия, образующие равнодействующую силу для каждой частицы. На каждом шаге по времени определяются перемещения частиц под действием равнодействующей силы и их новые положения. При сближении двух частиц на расстояние, приблизительно равное их диаметру, происходит слипание этих частиц и прекращение их движения относительно друг друга. Производилось вычисление средней фрактальной размерности образовавшихся кластеров на различных этапах кластеризации.

Пример образовавшихся структур представлен на рис. 1, график изменения средней фрактальной размерности на рис. 2.

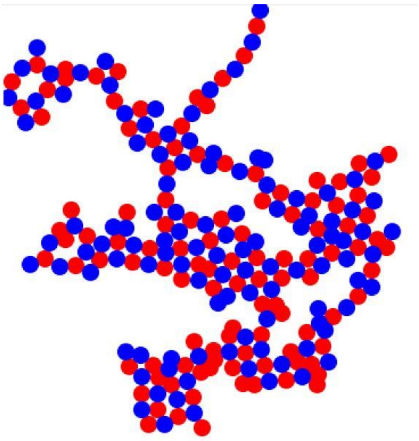


Рис. 1.

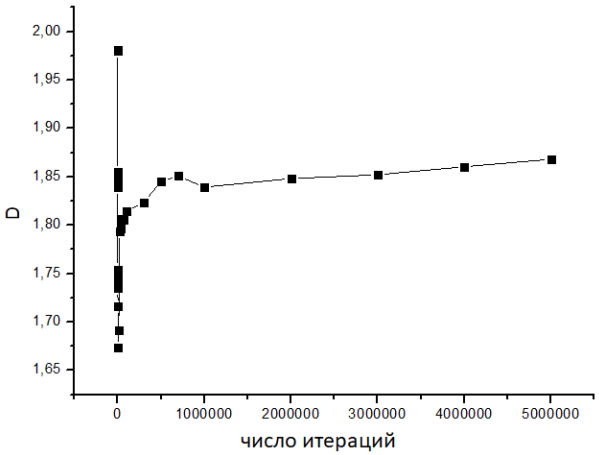



Рис. 2.

Ранее было выдвинуто предположение, что в процессе кластеризации средняя фрактальная размерность снижается в ходе образования линейных структур, а затем возрастает, когда они объединяются в двумерные. Результатом работы является подтверждение этой гипотезы.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.262

# О влиянии особенностей структуры на сверхпроводимость в кристаллах $YB_6$

**Хрыкина О. Н.[1], Болотина Н. Б.[1], Гридчина В. М.[1], Случанко Н. Е.[2]**
[1]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,* kvarkpower@gmail.com
[2]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия,* nes@lt.gpi.ru

Кристаллы $YB_6$, как и другие представители семейства гексаборидов редкоземельных и переходных металлов, сочетают в себе экстремальную твердость и химическую устойчивость с рядом физических свойств, интересных как для фундаментальных исследований, так и для практических применений. Этот материал является предметом многолетних теоретических и экспериментальных исследований из-за своих сверхпроводящих, оптических и термоэлектрических свойств [1–4].

Настоящая работа посвящена изучению структуры кристаллов $YB_6$ при низких температурах и выяснению природы эффектов, влияющих на температуру перехода образца в сверхпроводящее состояние $T_c$. Объектами исследования являлись монокристаллы гексаборида иттрия, полученные методом бестигельной зонной плавки, и характеризующиеся значениями $T_c \approx 4.5$ К и $T_c \approx 7.5$ К. Выполненные в [5] измерения магнитных, гальваномагнитных и тепловых характеристик привели авторов к выводу о влиянии отклонения состава образцов от стехиометрического и наличия вакансий в подсистеме атомов бора в указанных кристаллах $YB_6$ на электрон-фононное взаимодействие.

Структура образцов была изучена на основе рентгенодифракционных данных, полученных с помощью дифрактометра XtaLAB Synergy-DW с детектором счета фотонов HyPix-Arc 150° с использованием излучения Ag$K_\alpha$ ($\lambda$ = 0.56087 Å) при температурах в интервале 30–293 К. Модель структуры $YB_6$ была уточнена, согласно известной информации о строении этих кристаллов, в пространственной группе симметрии *Pm*–3*m*. Несмотря на хорошее соответствие экспериментальным данным (фактор расходимости составил не более 1.3%), найденная модель не отвечала на поставленный вопрос о причине различий физических свойств образцов. Установленные параметры элементарной ячейки различных кристаллов находятся в пределах стандартного отклонения во всем исследуемом температурном диапазоне.

Только анализ распределения электронной плотности в кристалле, полученного с помощью метода максимальной энтропии, позволил выявить структурные особенности, вероятно, являющиеся причиной обнаруженных различий сверхпроводящих характеристик. Показано, что при понижении температуры в кристаллах $YB_6$ вблизи октаэдров бора формируются зарядовые страйпы, что существенно сказывается на колебаниях атомов иттрия в полостях борного каркаса. Указанные изменения связаны с проявлением динамического эффекта Яна–Теллера.

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

## Литература

1. *Kimura S., et al.* // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – P.
2. *Kadono R., et al.* // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 094501.
3. *Tsindlekht M.I., et al.* // J. Phys.: Condensed Matter. – 2010. – V. 22. – P. 095701.
4. *Случанко Н.Е., и др.* // ЖЭТФ. – 2023. – Т. 164. – № 3. – С. 406–412.
5. *Sluchanko N., et al.* // Phys. Rev. B. – 2017. – V. **96**. – P. 144501.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.263

# Строение и свойства шеелитоподобных редкоземельных молибдатов $Dy_2MoO_6$, легированных атомами свинца

**Сидорова Е. В.[1], Смирнова Е. С.[1], Орлова Е. И.[1,2], Харитонова Е. П.[1,2], Антипин А. М.[1], Кварталов В. И.[1], Сорокина Н. И.[1], Сорокин Т. А.[1], Алексеева О. А.[1]**

[1]*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия,* soul7418@gmail.com

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Редкоземельные молибдаты состава $Ln_2MoO_6$, *Ln* = La-Lu, интересны благодаря своим люминесцентным, электрофизическим и каталитическим свойствам. Недавние работы [1] показали, что структура, полиморфизм и проводящие свойства оксимолибдатов чувствительны к размеру редкоземельного катиона, а также к различным гетеровалентным замещениям. В данной работе планируется впервые синтезировать оксимолибдат $Dy_2MoO_6$, легированный двухвалентным свинцом, с целью изучения влияния гетеровалентного замещения на структуру и физические свойства.

Соединение $Dy_2MoO_6$, легированное $Pb^{2+}$, получено твердофазным синтезом на воздухе в виде поликристаллической керамики и раствор-расплавной кристаллизацией в виде монокристаллов. Синтезированные образцы проанализированы методами рентгеновского фазового анализа (РФА), полнопрофильного количественного анализа по методу Ритвельда, синхронного термического анализа, импедансной спектроскопии в атмосферах сухого воздуха и аргона. Методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой изучен состав монокристаллических образцов. Строение монокристаллов исследовано методом рентгеноструктурного анализа. Структура монокристаллов состава $Dy_{1.97}Pb_{0.03}MoO_6$ была уточнена в пространственной группе *I*2/*a*. В структуре присутствуют три кристаллографически независимые позиции атомов диспрозия, одна позиция атомов молибдена и шесть позиций атомов кислорода. Анализ карт разностных синтезов электронной плотности (ЭП) в окрестности катионов структуры, построенных на заключительном этапе уточнения структурной модели, показал, что наиболее значимые пики остаточной ЭП находятся вблизи позиций атомов диспрозия. Исходя из близости величин ионных радиусов ($r(Dy^{3+})$=1.17 Å, $r(Pb^{2+})$=1.43 Å для к.ч.=8 сделано предположение о том, что эти пики ЭП соответствуют положениям атомов свинца, которые частично замещают в структуре атомы диспрозия. Заключительные факторы расходимости равны *S*=1.99, *R*=1.44. РФА керамических образцов позволил установить области гомогенности твердых растворов на основе $Pb^{2+}$, сохраняющих моноклинную структуру недопированных оксимолибдатов $Dy_2MoO_6$. Введение катионов свинца в позиции лантаноидов индуцирует резкий рост электропроводности, на порядок величины по сравнению с немодифицированными соединениями. Общие значения проводимости допированных керамик достигают $10^{-2}$ См/см при 900 °C. Подтвержден смешанный кислород-ионный и электронный характер проводимости соединений. Такие свойства делают их перспективными кандидатами для применения в качестве катодных материалов твердооксидных топливных элементов, где совмещение ионной и электронной проводимости способствует расширению трёхфазных границ и повышению эффективности кислородной восстановительной реакции.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00221).

## Литература

1. Morkhova Y.A., Orlova E.I., Kabanov A.A. et al. *Solid State Ionics*, 2023, 400, 116337.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.264

# НОВЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ КВАНТОВОГО РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА БЛОХОВСКИХ ВОЛН ЭЛЕКТРОНОВ В ТОНКОЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ

**С.М. Шкорняков***

*Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт" 119333 Москва, Россия*

**E-mail: shkornyakov@mail.ru*

Произведен расчет коэффициента отражения электронов, падающих нормально на тонкую монокристаллическую пленку. Показано, что и при сверхвысоких энергиях частиц (порядка 1 МэВ) заметно проявляется квантовый размерный эффект (рис.1)

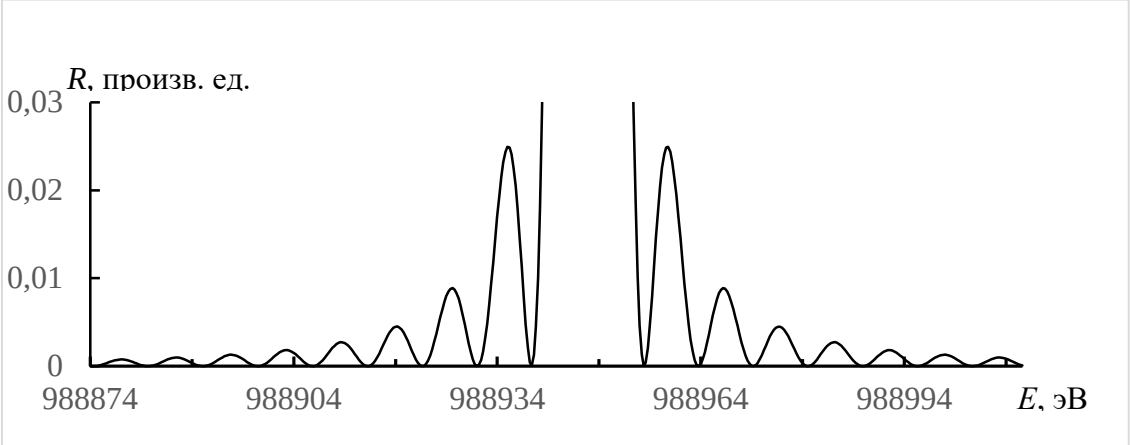



Рис.1 График зависимости коэффициента отражения *R* от энергии падающих электронов *E* в диапазоне энергий около 1 МэВ

Ранее этот факт не был известен. Считалось, что эффект наблюдаем только для электронов низкой энергии и его действительно наблюдали в туннельных экспериментах, где это требование выполняется. В монокристаллической же пленке формируются блоховские волны, длина которых изменяется от периода одномерной решетки и до толщины пленки. Это существенно ослабляет требования к объекту исследования и делает принципиально возможным наблюдение эффекта. Также следует отметить, что ранее при построении теории дифракции электронов средней и высокой энергии от монокристаллических пленок, не учитывалось отражение от второй границы пленки (считалось, что оно мало и им пренебрегали) . Учет же его приводит к возникновению квантового размерного эффекта при рассеянии электронов на пленке [1]. Два последних фактора, на которые впервые обратил внимание автор, ранее не учитывались ни в теоретических моделях эффекта, ни при экспериментальном его исследовании. Кроме того показано, что на кривой отражения присутствуют брэгговские пики. Произведена оценка расстояния между ними и их интенсивности.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ "Курчатовский институт".

Литература:

1. *Шкорняков С.М.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. №8. С. 102. DOI: 10.31857/S1028096022080143

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.265

# Влияние точечного пиннинга в сверхпроводниках $PrFeASO_{1-x}F_x$ на значения плотности критического тока и напряженности верхнего критического магнитного поля

**Фомина Е. М.**

*«Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга», г. Москва, Россия, e-mail: fominaeliza21@mail.ru*

Для оценки влияния легирования $PrFeAsO_{1-x}F_x$ фтором на значения плотности критического тока $J_c$ и напряженности верхнего критического магнитного поля $H_{c2}$ установлен механизм пиннинга в трех сверхпроводниках с заложенной на этапе синтеза мольной долей x в диапазоне 0.35 – 0.36. Оценка производилась с целью анализа применимости сверхпроводников в качестве исходного материала для изготовления сверхпроводниковых токоограничителей (СОТ) и магнитов. Определение механизма пиннинга проводилось экспериментально с помощью методики, основанной на теории Дью-Хьюза [1]. В данных сверхпроводниках был установлен точечный механизм пиннинга [1] (см. рис. 1 для образца A ($x = 0.35$), для образцов B ($x = 0.36$) и C ($x \approx 0.36$) параметры составили $p = 1.42 \pm 0.02$, $q = 2.96 \pm 0.05$, $h = 0.32$ и $p = 1.33 \pm 0.03$, $q = 2.78 \pm 0.06$, $h = 0.32$ соответственно).

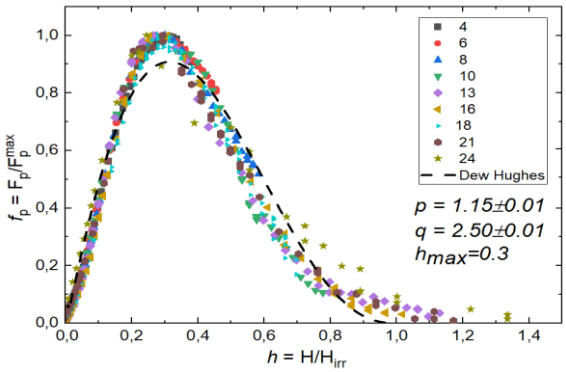



**Рис. 1.** *Зависимость отношения $F_p / F_{p\max}$ от отношения $H / H_{irr}$ в образце A. На легенде отображена температура в Кельвинах.*

Увеличение мольной доли x на этапе синтеза образцов от 0.35 до 0.36 привело к уменьшению $J_c$ от $5 \cdot 10^{10}$ $A/м^2$ до $(2...2.5) \cdot 10^{10}$ $A/м^2$, потому превышение мольной доли x величины 0.36 на этапе создания образцов оказывается нецелесообразным. Достигаемое значение $J_c$ рассмотренных сверхпроводников попадает в требуемый диапазон для своевременного срабатывания СОТ [2]. Сделан вывод, что для увеличения значений $J_c$, а также $H_{c2}$ необходимо повышать плотность точечных дефектов. Указанные материалы могут быть использованы при создании СОТ и сверхпроводящих магнитов.

## Литература

1. Dew-Hughes D. Flux pinning mechanisms in type II superconductors //Philosophical Magazine. – 1974. – V. 30. – №. 2. – P. 293-305.
2. Dirks J.A. High-temperature super conducting transformers performance, cost and market evaluation / J.A. Dirks, J.E. Dagle, G. John // Pacific Northwest Laboratory.– 1993.– 210 p.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.266

# ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МАЛОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА ИЗ БИОПОЛИМЕРОВ ЦИКЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ В УСЛОВИЯХ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА И СПЕКТР ЕГО ПРИМЕНЕНИЙ

**Возняковский А. А.[1], Возняковский А. П.[2], Кидалов С. В.[1], Подложнюк Н. Д.[1], Калашникова Е. И.[1], Яковлева А. Д.[3]**

[1]*ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия, alexey_inform@mail.ru*

[2]*ФГБП "НИИСК", Санкт-Петербург, Россия*

[3]*СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, Россия*

Углеродные наноматериалы, в частности графеновые наноструктуры (ГНС), из-за своих рекордных характеристик уже давно используются исследователей по всему миру для решения широкого спектра задач: от создания полимерных композитов и покрытий до сорбентов и медицинских изделий. Однако, не смотря на очевидную перспективность использования ГНС, которая была подтверждена экспериментально в тысячах работ, их применение на практике до сих пор не произошло. Причиной этому является несовершенство методик синтеза ГНС, которые не позволяют синтезировать большие объемы материла высокого качества с приемлемой себестоимостью.

Для решения данной проблемы нами была разработана методика синтеза высококачественных ГНС, а именно малослойного графена (МГ [1], не более 5 слоев) из биополимеров циклического строения (в т.ч. отходов деревообрабатывающей промышленности) в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) [2]. Данная методика позволяет синтезировать большие объемы материала (до 10 кг/мес. на уровне лабораторного производства), который не содержит в своей структуре дефекты Стоуна-Уэйлса [3].

В докладе представлена информация о разработанной методике, характеризации синтезированных марок МГ, а также о наиболее перспективных, экспериментально апробированных, направлениях применения синтезированного материала: композиционные материалы, сорбционные материалы для очистки воды (от радионуклидов, микотоксинов, промышленных красителей), смазывающих и охлаждающих наножидкостей, материала для создания суперконденсаторов, защитных покрытий, биопрепаратов для ликвидации загрязнений окружающей среды нефтепродуктами, модифицирующих добавок при создании пиротехнических составов и т.д.

Работа выполнена при поддержке грантов БРФФИ № Т23РНФМ и РНФ 24-49-10014.

## Литература

1. ISO/TS 80004-13:2024
2. Voznyakovskii A. P., Vozniakovskii A. A., Kidalov S. V. Nanomaterials. – 2022. – 12(4). P. . – 657.
3. Voznyakovskii A. P., Neverovskaya A. A., Vozniakovskii A. A., Kidalov S. V. // Nanomaterials. – 2022. – 12(5). P. . – 883.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.267

# Формирование кремниевых наноструктур методами МСХТ и электрохимического травления

**Турченик С.А.[1], Услин Д.А. [1], Нефедов С.А. [1], Пузырная Г.В. [1]**
[1]*Самарский Университет, Самара, Россия,* salatikkk81@yandex.ru

Пористый кремний (ПК) является перспективным материалом для различных областей применения в оптоэлектронике [1,2], в том числе он может применяться как покрытие для солнечных элементов в силу низкого коэффициента отражения и развитой поверхности [3]. Одним из самых доступных способов получения слоев ПК является электрохимический метод, в то время как с помощью метода металл стимулированного химического травления (МСХТ) можно получить структуры нанонитей на поверхности кремния, коэффициент отражения которых еще ниже.

Целью работы являлось получение на поверхности кремния нанонитей по технологии [4] с использованием частиц $AgNO_3$ в растворе плавиковой кислоты, а также пористого слоя методом электрохимического травления.

Использовались пластины кремния с ориентацией {100} и {111}, с p- и n-типами проводимости, а также с тремя видами поверхности – шлифованная, полированная и текстурированная. Пластины помещались в водный раствор нитрата серебра для осаждения частиц маски из катионов $Ag^+$. Затем пластины травились в растворе HF и $H_2O_2$. Варьировалось время обработки пластин от 30 минут до 2 часов. Остатки маски удалялись азотной кислотой.

Исследование поверхности и поперечных сколов пластин методом оптической и растровой электронной микроскопии показало наличие структур, сходных с нанонитями, полученными авторами [4]. При этом была зафиксирована зависимость параметров нанонитей от времени обработки пластин и параметров исходных пластин.

Слои пористого кремния создавались на основе пластин кремния с ориентацией {111}. Травление проводилось в растворе HF и $C_2H_5OH$ в соотношении 1:1. Образцы были подвергнуты процедуре травления при плотностях токов 16, 20, 31, 61 и 76 $mA/cm^2$ в течении 5, 10, 20 и 30 минут, т.е. при заданной плотности тока травились разные образцы с разным временем. Оценивая пористость с помощью гравиметрического метода, сутью которого является поиск отношения убыли массы к остаточной, удалось установить значения в диапазоне 0.1-0.45%.

С помощью оптического микроскопа Neophot 21 удалось установить глубину полученных пор в диапазоне от 81 до 344 мкм. С увеличением пористости увеличивается глубина пор. Методом рентгеновской дифрактометрии установлено смещение отражения (111) в сторону меньших углов на ~0.1° по шкале 2θ, а рост полной ширины на половине высоты (ПШПВ) примерно в 4 раза в результате травления по сравнению с исходным монокристаллом кремния.

## Литература

1. Latukhina N.V., et al. Multilayer nanostructures based on porous silicon for optoelectronics // Photonics. 2018. V. 12 No. 5(73). P. 508–513
2. Хамзин Э.Х., Нестеров Д.А., Латухина Н.В. и др. Пористый кремний допированный эрбием для оптоэлектрических приложений. // ФизикА.СПб: тезисы докладов международной конференции, 23–27 октября 2023 г. С. 160–161.
3. Hyukyong Kwon et al. Investigation of Antireflective Porous Silicon Coating for Solar Cells // International Scholarly Research Network ISRN Nanotechnology. 2011.
4. Gonchsr K.A. Golovan L.A. Photoluminescence and Raman Scattering in Wet Chemically Etched Silicon Nanowires // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. Т. 5. №4.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.268

# Нелинейная магнитная динамика и ориентационные переходы в трёхслойных кристаллических плёнках ЖИГ с немагнитной прослойкой

**Абрамовский И. Е.[1], Котов Л. Н.[1], Наяк Ч.[2]**
[1]*Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия,*
E-mail: abramowsk-ivan@mail.ru
[2]*Веллурский технологический институт, Веллур, Индия*

В последние годы нелинейная магнитная динамика многослойных структур активно исследуется с целью создания приложений в области спинтроники, в частности, при разработке ячеек памяти MRAM [1]. Использование многослойных магнитных плёнок основано на понимании определённых закономерностей и эффектов, которые связаны с квантово-механической природой и ориентационными переходами в таких структурах. Эти явления делают возможным применение таких конструкций в современных электронных устройствах спинтроники и магнитоэлектроники [2]. Среди устройств, выполненных на основе многослойных плёнок, можно выделить магниторезистивную память, туннельные магниторезистивные устройства, а также гибридные структуры, сочетающие магнитные и полупроводниковые материалы [1]. В данной работе исследована нелинейная магнитная динамика и изучены условия возникновения ориентационных переходов вектора намагниченности в многослойной плёнке с параметрами ЖИГ с немагнитной прослойкой между ними, при низкой, комнатной и высокой температурах: 100, 300 и 500 К. Данная работа является продолжением работы [3]. Были получены численные решения уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта для описания магнитной динамики в условиях ориентационного перехода. Эффективное поле включало в себя: постоянное и переменное магнитное поля, поле кубической анизотропии и поле обменного взаимодействия. Обменное поле изменялось посредством изменения толщины немагнитного слоя. Численное решение находилось методом Рунге-Кутты 4-5 порядков с помощью программы MATLAB.

Полученные результаты численных расчётов показывают, что материальные параметры слоёв ЖИГ, входящие в эффективное поле, могут нести как стабилизирующий, так и дестабилизирующий характер для возникновения ориентационных переходов. Кроме того, помимо классической затухающей магнитной прецессии наблюдаются более сложные колебательные режимы, возникающие под действием переменного поля. Действие поля кубической анизотропии вносит ограничения на условия возникновения ориентационных переходов, поскольку создаются дополнительные потенциальные ямы и барьеры для вектора намагниченности. Действие обменного поля локально подавляет поле магнитной анизотропии так, что высота барьеров становится несколько ниже, что позволяет уменьшить амплитуду переменного поля для возникновения ориентационных переходов.

**Исследования проведены за счёт гранта РНФ, проект № 25-72-20063**

## Список литературы

1. Claas A., “Micromagnetics and spintronics: models and numerical methods”, Eur. Phys. J. B. – 2019 – V. 92. pp 120. DOI: 10.1140/epjb/e2019-90599-6
2. Vernik U., Lomonosov A.M., Vlasov V.S., Kotov L.N., Kuzmin D.A., Bychkov I.V., Vavassori P., Temnov V.V., Phys. Rev. B. – 2022. – V. 106. pp. 144420. DOI: 10.1103/PhysRevB.106.144420
3. Абрамовский И.Е., Котов Л.Н., Голов А.В., ФТТ. – 2024 – Т. 66. № 12. С. 2145-2147. DOI: 10.61011/FTT.2024.12.59581.6561PA

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.269

# Применение методов зондовой микроскопии на различных этапах получения магнитных нанопроволок

**Д.А.Бизяев[1], Д.Л.Загорский[2], И.М.Долуденко[2], Д.Р. Хайретдинова[2], А.Э. Муслимов[2]**

*[1]КФТИ, Казань*

*[2]НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

В работе массивы нанопроволок (НП) из магнитных металлов были получены методом матричного синтеза. Одним из способов контроля, который возможно применять практически на всех этапах процесса является зондовая микроскопия. В работе применялась комбинация мод АСМ и МСМ, реализованная на приборе Solver P-47, работавшем в режиме тейпинга, с различными кантилеверами. Изучались НП с диаметром 100 нм, различного состава. Получена информация о топографии и о магнитных свойствах.

**Аттестация исходной матрицы** методом АСМ давала картину распределения пор на поверхности, определение диаметра этих пор и разброса этих величин. Эти результаты значительно дополняют параметры, даваемые производителем мембран и данные СЭМ.

Была **изучена последовательность зарастания пор**. Совместное использование методов сканирующей электронной микроскопии и зондовой микроскопии –(АСМ и МСМ) позволило визуализировать этапы в выхода отдельных растущих НП на поверхность на так называемом этапе перероста и образования т.н. «шляпок».

После синтеза проводилось **исследование НП, находящихся в матрице-** (сканирование «с торца НП»). Наблюдалось перемагничивание Fe НП при приложении внешнего магнитного поля вдоль их оси в экспериментах ex-situ. Эксперименты показали, что между сформированными НП имеется сильное магнитостатическое взаимодействие из за их близкого расположения друг к другу.

Более детальное изучение массивов гомогенных НП из сплава FeNi, расположенных в матрице показало, что поле перемагничивания (in-situ) уединённых НП во всех случаях составило 7-14 мТл. В группах близкорасположенных НП полное переключение намагниченности происходит при больших полях, процесс идёт поэтапно.

Были изучены **НП, находящиеся на поверхности** (после выделения из матрицы они были иммобилизованы на поверхности держателя, сканирование проводилось «вдоль НП»). В единичных НП выявлены области намагниченности с геометрическими размерами ~ 100−150nm.(аналог доменов). Показано, что внешним магнитным полем (16mT) удается почти полностью перемагнитить НП.

Перемагничивание пары НП происходит двухступенчатым образом, как для двухфазной системы с двумя характерными полями: Hc1 = 4-5 мТл для образования пары с противоположным направлением намагниченности и Hc2 =16 мТл для полного переключения намагниченности. Последнее значение близко к величине коэрцитивной силы для массива НП в матрице. Агломерат, состоящий из нескольких «слипшихся» НП перемагничивается поэтапно, через несколько промежуточных состояний.

В **обоих типах измерений** диапазон полей переключений близкорасположенных НП зависит от плотности их расположения и в целом значительно шире чем для уединённых НП. Показано, что магнитные свойства НП значительно изменяются при уменьшении расстояния между ними – затрудняется их перемагничивание, появляются различные промежуточные состояния, в том числе с противоположной (антиферромагнитной) намагниченностью в соседних НП.

**Благодарности** Работа проведена в рамках выполнения Госзадания НИЦ "Курчатовский институт" и Госзадания КФТИ

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.270

# Нанопроволоки из магнитных материалов – получение, структура, методы изучения и практическое применение

**Загорский Д.Л. [1], Панина Л.В.[2], Горохов Г.[3], Каневский В.М.[1]**

*[1]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, dzagorskiy@gmail.com*
*[2] МИСиС, Москва, Россия*
*[3] НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ: 220006 Минск, ул. Бобруйская, 11, Беларусь*

В работе изучены массивы одномерных наноструктур-нанопроволок (НП), полученных из металлов группы железа ( Co, Ni, Fe) , а также меди методом матричного синтеза. Рассмотрено получение гомогенных НП состоящих из одного или нескольких металлов (т.н. сплавы), а также гетерогенных и слоевых НП, состоящих из чередующихся слоёв различного состава. Для их изучения использовались методы микроскопии (СЭМ и ПЭМ, с элементным анализом), РСА и магнитометрии.

Исследованы **особенности электроосаждения** этих типов НП. При получения однокомпонентных металлических НП обнаружена нелинейность процесса заполнения, вызванная конкуренцией эффектов истощения электролита и изменением электросопротивления растущих НП. При получении НП из сплавов с железом обнаружено различие между составом электролита и составом НП, проявляющееся в разной степени в FeCo и FeNi НП, вызваное аномальным со-осаждением железа. При синтезе слоевых НП для получения тонких слоёв и контроля их толщины и состава применялся режим контроля заряда, трёхэлектродный метод и замедление процесса.

При исследовании **магнитных свойств** однокомпонентных НП (Fe) было показано влияние плотности расположения НП на параметры петли гистерезиса-взаимное влияние НП начинается при их плотности $5 \cdot 10^8$ см$^{-2}$ и выше. Для двухкомпонентных НП (FeNi и FeCo) была показана сильная зависимость магнитных параметров от диаметра НП и от соотношения элементов. Были определены способы увеличения коэрцитивной силы. В слоевых НП (Ni/Cu) направление оси лёгкого намагничивания может изменяться в зависимости от соотношения толщин магнитных и немагнитных слоёв.

Исследованы возможности **практического применения** полученных структур с НП: их геометрия даёт возможность использовать массивы НП для эмиссии и десорбции молекул. Развитая поверхность массивов пригодна для усиления каталитического эффекта , например, каталитического окисления CO в $CO_2$ на медных НП. Гомогенные НП, а также фрагменты слоевых НП-магнитные частицы калиброванного размера-представляют интерес для адресной доставки лекарств и локальной гипертермии. Показано, что при пропускании тока через массив НП, состоящих из нескольких чередующихся магнитных слоёв различного состава, может возникать генерации терагерцового излучения; изучены особенности этого процесса. Также изучено взаимодействие композита, состоящего из массива НП в ростовой полимерной матрице с ТГц излучением. Показано, что в случае, если пространственная ориентация НП в композите анизотропна, возникает зависимость коэффициента пропускания от поляризации ТГц излучения. Наиболее выражен данный эффект в массиве из НП, обладающих дисперсией наклона в диапазоне ±30° в одной плоскости и возникающих благодаря этому электрических контактов. Предполагается, что эффект связан с анизотропией диэлектрической проницаемости композита, возникающей вследствие наклона НП и формирования сети электрических контактов между НП вследствие его угловой дисперсии.

**Благодарности** Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ "Курчатовский институт" и Гранта БРФФИ Наука М №Ф24М-013

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.271

# Распространения волны переключения при наложении интенсивной пластической деформации кручения.

**Гладилин О.А.[1,2], Заворотнев Ю.Д.[2]***

*[1]ФГБОУВО «Донецкий государственный университет», Донецк, 283001, Россия*

*[2]ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, 283048 Россия*

**zavorotnev.yurii@mail.ru*

Материалы, используемые в промышленности, часто подвергаются повышенным разрушающим нагрузкам. Поэтому актуальным являются исследования их свойств при наложении мегапластической деформации, в частности интенсивной пластической деформации кручения (ИПДКР). В этом случае в веществе возникает ударная волна (кинк). Этот процесс является автоволновым и представляет собой простейший топологический солитон.

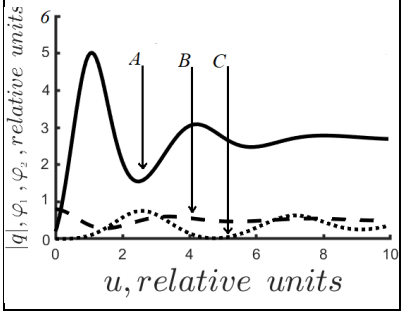



Рис.1. Эволюция кинка (А), общей дислокации (В) и винтовой дислокации (С).

Закономерности распространения кинка с учетом дислокационной подсистемы изучаются с помощью феноменологической теории Ландау. В разложении неравновесного потенциала учитывались инварианты Лифшица, слагаемые до шестого порядка по векторному структурному параметру порядка (ПП) и третьего по скалярным ПП (плотности общих и винтовых дислокаций). В минимизирующей системе уравнений Эйлера осуществлялся переход к автомодельной переменной *u* типа “бегущая волна”. Полученный результат представлен на рис.1. Распространение кинка идет справа налево. Очевидно, что процесс переключения имеет колебательный характер похожий на последовательность солитонов. Показано, что независимо от начальных условий в итоге система переходит в одно и то же стационарное состояние.

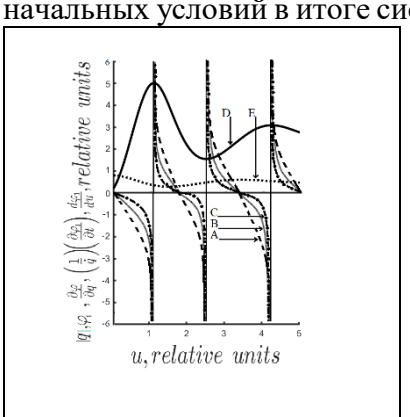



Рис.2. Скорости рождения и аннигиляции краевой дислокации при прохождении кинка.

Обнаружены особенности поведения скоростей рождения и аннигиляции краевой и винтовой дислокаций. Ввиду волнового характера процесса распространения эти скорости имеют особенности в точках экстремума кинка (рис.2). На этом рисунке линия *C* – скорость рождения, *B* - аннигиляции, *A* – суммарная скорость. Эти особенности соответствуют точкам поворота на фазовой кривой. Все фазовые линии имеют вид деформированной логарифмической спирали, сходящейся в особую точку типа “устойчивый фокус”

Выводы.

1. Показано, что граница области перехода (кинк) в стационарное состояние при наложении ИПДКР не является ступенькой и имеет конечную ширину в пространстве, внутри которой переход является осциллирующим с затуханием, что свидетельствует о неустойчивости системы в переходной области.

2. Благодаря колебательным процессам в переходной области возникают сингулярности скоростей рождения и аннигиляции дислокаций как функций от деформации.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.272

# ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ: АНАЛИЗ С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДЕЛИ ИМПЕДАНСА ВАРБУРГА

**Ахметова Э.М., Шарафетдинов Д.И., Дулов Е.Н.**

*Казанский федеральный университет, Институт Физики, Казань, Россия*

*ahmetova.elvina.18@gmail.com*

Металлогалогенидные перовскиты могут использоваться в качестве чувствительных элементов в детекторах ионизирующего излучения [1,2]. Существует общая неопределенность в отношении механизмов, описывающих их проводимость. Это вызвано присутствием подвижных ионов и тем, как они изменяют внутреннее электрическое поле в неравновесных условиях [3], взаимодействуют с материалами контакта, модулируют электронные свойства. Настоящая работа посвящена изучению влияния дефектов кристаллической структуры и связанной с ними миграцией ионов на проводимость перовскитов.

Для определения оптимального уровня легирования, обеспечивающего минимизацию концентрации дефектов, методом роста кристаллов из раствора с испарением растворителя была получена серия кристаллов $CH_3NH_3PbBr_{3-x}Cl_x$ с различным содержанием хлора (x = 0.02, 0.03, 0.06, 0.08, 0.09, 0.1). Фазовая чистота полученных материалов была подтверждена методом рентгеноструктурного анализа.

Для разделения и количественной оценки вкладов электронной и ионной проводимостей использовался метод импедансной спектроскопии для образцов кристаллов с серебряными контактами. Интерпретация полученных импедансных спектров проводилась с использованием модели Варбурга, что позволило оценить параметры диффузионных процессов и, в частности, определить коэффициент диффузии ионов в решетке монокристалла. Полученные результаты важны для разработки стратегий улучшения характеристик перовскитных детекторов ионизирующего излучения.

## Литература

1. Detection of gamma photons using solution-grown single crystals of hybrid lead halide perovskites / Sergii Yakunin, Dmitry N. Dirin [et al.] // Nature Photonics – 2016. Vol. 10 (9).
2. Dopant compensation in alloyed $CH_3NH_3PbBr_{3-x}Cl_x$ perovskite single crystals for gamma-ray spectroscopy / Haotong Wei, Dylan DeSantis [et al.] // Nature Materials – 2017. – V. 16 (8).
3. Moving Ions Vary Electronic Conductivity in Lead Bromide Perovskite Single Crystals through Dynamic Doping / Marisé García-Batlle, Oriane Baussens [et al.] // Adv. Electron. Mater. – 2020. – V. 6 (10).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.273

# Электронная структура халькогалогенидной фазы Шевреля $Mo_6S_6I_2$

**Г.Д. Комаров, А.М. Ионов, С..Г. Протасова, Р.Н. Можчиль, О.Г. Рыбченко**
*ИФТТ РАН, Московская область, г. Черноголовка*

Тройные халькогениды молибдена, фазы Шевреля $M_xMo_6X_8$ интересны из-за ряда уникальных физико-химических свойств таких как сверхпроводимость, каталитическая активность и др.[1] Электронная структура йодированной фазы Шевреля $Mo_6S_6I_2$ мало исследована и представляет интерес для понимания физико-химических свойств соединения.

Образцы $Mo_6S_6I_2$ был получен методом ампульного синтеза. Полученные образцы обладали кристаллической структурой *hR*42. Критическая температура начала сверхпроводящего перехода в $Mo_6S_6I_2$ 14 K.

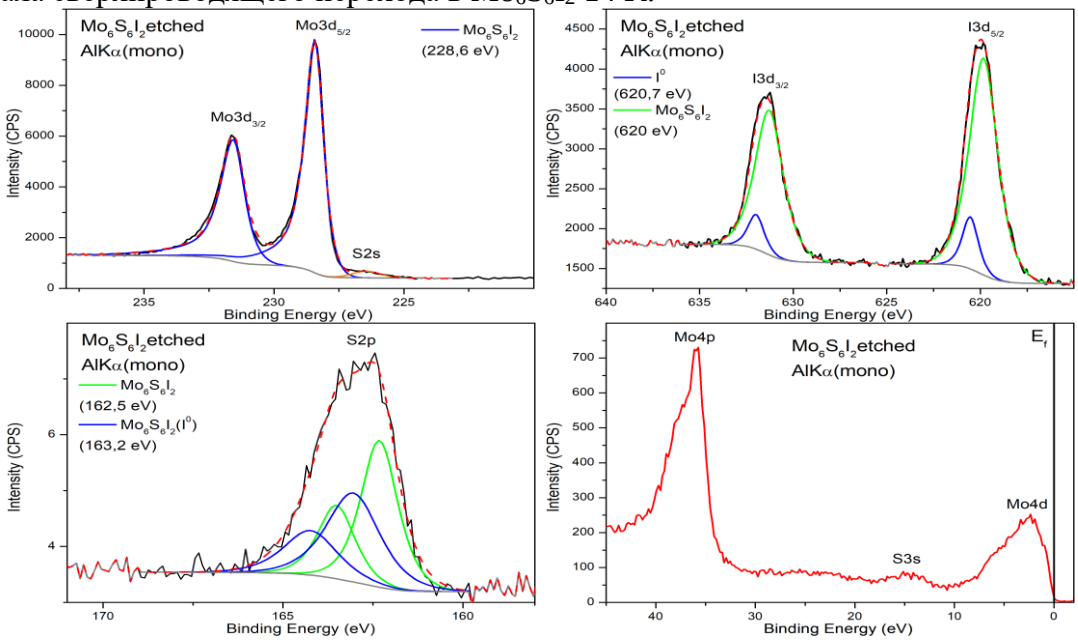



**Рис. 1.** РФЭС спектры фазы $Mo_6S_6I_2$, остовных уровней и валентной зоны

Исследование электронной структуры образцов проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на электронном спектрометре со сферическим секторным анализатором “Kratos" с использованием излучения AlKα(mono) (E = 1486,69 эВ). В спектре наблюдаются характерные линии остовных уровней молибдена $Mo3d_{5/2}$ (228,6 эВ), серы $S2p_{3/2}$ (163 эВ), йода $I3d_{5/2}$(620 эВ) с присутствием элементарного интеркалированного йода. Вид спектра Mo3d для $Mo_6S_6I_2$ представленного на рис.1 является типичным для всех соединений типа фазы Шевреля [2]. Уширенные, неразрешаемые 2p (162,5эВ и 163,2 эВ) состояния серы можно объяснить влиянием изменения электронной плотности вследствие наличия интеркалированного йода в структуре.

Согласно анализу РФЭС валентная зона фазы $Mo_6S_6I_2$ образована 4d состояниями молибдена вблизи уровня Ферми с максимумом в интервале 2-5 эВ и 3s состояния серы около 14 эВ. При прогреве образца $Mo_6S_6I_2$ in situ в камере электронного спектрометра (до 500°C,$10^{-8}$ Торр) не происходило заметных изменений в структуре остовных линий, отмечено удаление интеркалированного йода из образца.

**Литература**

1. Peña, O. Chevrel phases: Past, present and future / O. Peña // Physica C: Superconductivity and its Applications. – 2015. – Vol. 514. – P. 95-112.
2. Electronic structure of the Chevrel-phase compounds SnxMo6Se7.5: Photoemission spectroscopy and band-structure calculations / K. Kobayashi, A. Fujimori, T. Ohtani [et al.] // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 2001. – Vol. 63, No. 19. – P. 1951091-1951097.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.274

# Изменение термоэлектрических и электрических характеристик тонких пленок SmS в динамике фазовых превращений

**И.С. Волчков[1,*], Е.Б. Баскаков[1], Д.Р. Хайретдинова[1], В.М. Каневский[1]**
*[1] Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт» Москва, Россия*
*volch2862@gmail.com

SmS — халькогенидный материал, существующий в двух возможных состояниях: металлическом (также называемом «золотым» – M-SmS) и полупроводниковом («синем» или «черном» – S-SmS). Переход между этими состояниями является изоструктурным, индуцированным приложением давления [1] и обратимым при нагреве [2]. Данный переход является стабильным в случае тонкие пленок.

В S-SmS фазе наблюдается уменьшение значений коэффициента Зеебека (*S*) с увеличением температуры. В M-SmS фазе *S* мала, и присутствует незначительное увеличение *S* с ростом температуры. Удельная электропроводность ($\sigma$) может изменяться с ~$10^{-6}$ См/см для S-SmS фазы, до $10^4$ См/см для M-SmS. В результате SmS представляет интерес в качестве термоэлектрика, не только из-за средних значений ZT ~ 1.0-1.2 [3], но и из-за высоких величин *S*, а также возможностями по увеличению величины *S*, за счет изменения соотношения Sm:S. Переход из S-SmS состояния с низкой $\sigma$ и высокими значениями *S* в M-SmS состояние с высокой $\sigma$ и низкими значениями *S*, осуществляемый под давлением, позволяет создавать градиентные структуры на основе SmS. Целью работы было исследование изменения свойств тонких пленок SmS в динамике фазовых переходов S-SmS – M-SmS, индуцированного давлением, и в M-SmS – S-SmS, индуцированного температурным воздействием.

Образцы представляли собой тонкие плёнки SmS, нанесенные на керамическую подложку. Тонкие пленки SmS получали методом магнетронного распыления мишени из поликристаллического SmS (Sm:S =1.3:1). Перевод тонкой пленки SmS из S-SmS состояния в M-SmS состояние осуществлялся механической полировкой. Выращенные тонкие пленки SmS были охарактеризованы методами растровой электронной микроскопии (РЭМ), энерго-дисперсионного спектроскопии (ЭДС), рентгенофазового анализа (РФА), а также измерялись их электрические и термоэлектрические свойств до и после перевода приповерхностного слоя образца в M-SmS состояние, а также, многократно, после этапов нагрева.

Полученные результаты исследований методами РФА, РЭМ и ЭДС, а также результаты измерения электрических и термоэлектрических характеристик от температуры, говорят о фазовом переходе S-SmS – M-SmS приповерхностного слоя тонких пленок SmS, происходящем в результате полировки. Также имеет место обратный фазовый переход M-SmS – S-SmS, происходящий при охлаждении образца с 408 K до 273 K, в интервале температур 408-373 K. Определено, что как в случае перехода S-SmS – M-SmS, индуцируемом приложенным давлением, так и в случае обратного перехода M-SmS – S-SmS при охлаждении образца, наблюдается динамическое изменений фазового состава по областям пленки, изменение электрических характеристик, а также изменяемая анизотропия термоэлектрических свойств.

## Литература

1. Banerjee D., Plekhanov E., et al. // Phys. Rev. B. – 2022. – V. 105. № 19. – 195135.
2. Sousanis A., Poelman D., et al. // Sensors. – 2019. – V. 19. № 20. – 4390.
3. H. Liao, Z. Zhou, et al. // Advanced Energy Materials. – 2023. – V. 13(12). – 2203519.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.275

# Восстановление и улучшение качества трехмерных изображений конфокальной микроскопии на основе алгоритма Ричардсона-Люси

**Косач П. А.[1], Зверев Д.Г.[1], Нуртдинова Л. А.[2], Митюшкин Е. О.[2], Нургазизов Н. И.[2]**

[1] *Казанский федеральный университет, Казань, Россия, rbpavel1975@gmail.com*

[2] *Федеральный исследовательский центр КазНЦ РАН, Казань, Россия, nurlari@yandex.ru*

Конфокальная микроскопия - ключевой метод неинвазивного исследования биологических образцов с высоким аксиальным разрешением. Несмотря на значительные преимущества по сравнению с традиционной микроскопией, данный метод подвержен влиянию ряда артефактов, таких как размытие и пуассоновский шум. Попытка уменьшения лазерного пятна, направленное на уменьшение размытия, приводит к уменьшению интенсивности сигнала, однако, ухудшает отношение сигнал шум и ограничивает анализ получаемых данных, затрудняя их последующий анализ.

Для коррекции указанных искажений широко применяются методы восстановления изображений, среди которых особое внимание уделяется деконволюции. Одним из наиболее эффективных подходов в этой области является алгоритм, независимо предложенный Уильямом Ричардсоном (1972) и Леоном Люси (1974). Данный алгоритм представляет собой итерационный метод, основанный на известной функции рассеяния точки (ФРТ).

В рамках настоящего исследования, с применением алгоритма Ричардсона–Люси, дополненного предложенным нами методом адаптивной градиентно-взвешенной регуляризации, было успешно восстановлено трехмерное изображение скоплений микрокристаллов люминофора NaYF4:Yb,Er. Проведено сравнение результатов, полученных после применения RL - алгоритма с регуляризацией Тихонова и с регуляризацией, предложенной нами (см. рис. 1). Полученные результаты показывают, что предложенный метод регуляризации для алгоритма Ричардсона – Люси, обеспечивает лучшее выделение границ и снижение шума по сравнению с Тихоновской регуляризацией, однако требует более точного подбора параметров.

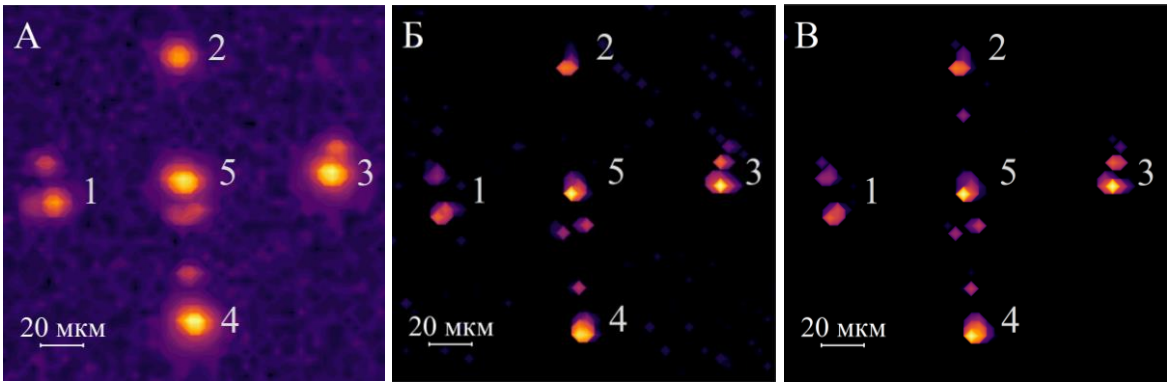



Рис. 1 (А) Распределение микрокристаллов в плоскости XY. (Б) Изображение, восстановленное с регуляризацией Тихонова. (В) Изображение, восстановленное с адаптивной градиентно-взвешенной регуляризацией.

Автор благодарен субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности – FZSM-2024-0010; синтез апконверсионных наночастиц был осуществлён при поддержке гранта РНФ N 23-42-10012.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.276

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК GE/SIGE ГЕТЕРОСТРУКТР ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ МОДУЛЯТОРОВ

**С. В. Хазанова, А. И. Бобров, А. П. Горшков, А.В. Нежданов, С. А. Денисов, А.С. Панфилов, В.Н. Трушин**

*ННГУ им. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия, khazanova@phys.unn.ru*

Оптические системы связи обладают рядом преимуществ по сравнению электронными системами, среди которых более высокая скорость передачи информации, однонаправленность потока информации, широкополосность и малое затухание сигнала. При этом одним из важных элементов в соединениях центров обработки данных фотонных интегральных схем являются модуляторы по схеме Маха–Цендера. К достоинствам применения подобных модуляторов по сравнению с классическими лазерными диодами, следует отнести высокое быстродействие (до 40 ГГц и выше), возможность компенсации уширения волнового пакета во времени, возможность реализации схем квадратурной оптической модуляции (QPSK, DP-QPSK, QAM). Принцип действия этого устройства основан на вариации коэффициента преломления под воздействием электрического поля, обусловленной квантово-размерным эффектом Штарка.

Для достижения интегральной монолитности активных оптических устройств может рассматриваться фотоника на основе Ge. Несмотря на то, что Ge является непрямозонным полупроводником, вследствие деформации и легирования становятся возможными прямозонные переходы в Г-точке при более высоких энергиях [1]. Сообщалось, что с помощью создания массивов множественных Ge/SiGe квантовых ям, возможно эффективное изменение показателя преломления (~$1{,}3 \times 10^{-3}$) [2].

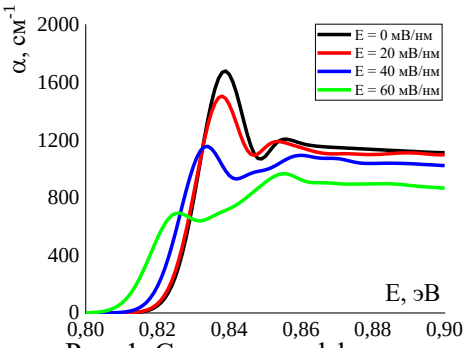



Рис. 1. Спектры коэффициента поглощения при различных напряжённостях электрического поля при T = 300 K

В настоящей работе были исследованы электрооптические характеристики напряженных Ge/SiGe гетероструктур. Численно методом конечных разностей решено уравнение Шредингера, получены энергии размерного квантования и огибающие волновых функций в гетероструктурах с различным дизайном квантовых ям. Далее были получены спектры поглощения при воздействии электрического поля (рис. 1) с учетом энергии связи экситона [3]. Используя полученные спектры поглощения в достаточно широком диапазоне длин волн, с помощью соотношений Крамерса-Кронига получены соотвествующие спектры изменения показателя преломления на длинах волн 1,3-1,5 мкм. Результаты расчётов показывают заметное изменение показателя преломления, что позволяет использовать данные гетероструктуры в качестве электрооптически активной среды модулятора по схеме Маха-Цендера.

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 1 «Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров. Этап 2023-2025».

[1] J. Frigerio, et al., AIP advances, 11, 035117-1–035117-9 (2020).
[2] K. Guilloy, N. Pauc, A. Gassenq, et al., ACS Photonics, 3, 1907-1–1907-8 (2016).
[3] D. A. B. Miller et al., Physical review B, 32, 1043-1060 (1984).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.277

# Расчет параметров взаимодействия 5f и 6d электронов $Pu^{3+}$ со спинами ядер фтора в $CaF_2$

**Зиатдинов Р.Р., Еремин М.В.**

Институт физики Казанского (Приволжского) федерального университета, Казань, Россия, E-mail - razik.ziat@gmail.com

Экспериментальные данные, полученные методом ENDOR[1], показали, что взаимодействие 5f-электронов $Pu^{3+}$ с ядрами фтора в кристалле $CaF_2$ существенно отличается от классического диполь-дипольного взаимодействия. Имеется большое изотропное электронно-ядерное взаимодействие с параметром $A_s$, который оказался отрицательным. Причины такого явления до сих пор остаются неизвестными.

В данной работе рассмотрено влияние перемешивания волновых функций 5f-электронов иона $Pu^{3+}$ с 2s- и 2p- волновыми функциями фтора на значения параметров двойного электронно-ядерного резонанса (ENDOR) $A_s$ и $A_p$. Используя технику неприводимых тензорных операторов, получены выражения для параметров спинового гамильтониана $A_s$ и $A_p$ через параметры гибридизации $\lambda_{f\sigma}$, $\lambda_{f\pi}$ и $\lambda_{fs}$. Из полученных формул вытекает, что общепринятая ковалентная модель не может объяснить отрицательные значения параметра $A_s$.

Основные этапы работы включали:

1. Расчет матричных элементов от оператора электронно-ядерного взаимодействия на волновых функциях $Pu^{3+}$ в $CaF_2$, используя метод эффективного гамильтониана[2].
2. Вывод формул для параметров $A_s$ и $A_p$ через параметры гибридизации.

## Литература

1. W. Kolbe, N. Edelstain. Electron-Nuclear Double Resonance of Pu3+ in CaF2 // Phys. Rev. B. – 1971. – Vol. 4. – No. 9. – P. 2869-2875.
2. M. L. Falin, M. V. Eremin, H. Bill, D. Lovy. ENDOR and transferred hyperfine interaction of impurity rare-earth ions with nearest diamagnetic ions in crystals // Appl. Magn. Reson. – 1995. – Vol. 9. – P. 329-354.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.278

# Сверхпроводящий терагерцовый болометрический сенсор на основе мета-атома

**Матвеев Г. А.[1,2], Шитов С. В.[2]**
*ИНМЭ РАН, Москва, Россия*, gmatveev00@gmail.com
*НИТУ МИСИС, Москва, Россия,* sergey3e@gmail.com

Целью работы является разработка и исследование болометрического сенсора на основе сверхпроводящего мета-атома, находящегося в квази-анапольном состоянии. Показано, что такой атом может быть использован в качестве считывающего устройства терагерцового наноразмерного поглотителя. Анапольное состояние с крайне низким пропусканием электромагнитной волны реализуется вследствие деструктивной интерференции электрического и тороидального диполей сверхпроводящего мета-атома, и в спектре прохождения можно различить высокодобротный резонанс. В идеальном случае анапольное состояние является неизлучающей модой, которая может быть разрушена за счет нелинейной реакции специально приготовленного «дефекта». Такой дефект может быть реализован в виде термочувствительной пленки, которая играет одновременно роль болометрического поглотителя. Нагрев такого поглотителя, размещенного в пучности электрического поля мета-атома, терагерцовым излучением разрушает условие деструктивной интерференции мета-атома и добротность резонанса падает.

Мета-атом изготовлен методами тонкопленочной технологии из ниобия толщиной 200 нм на подложке из сапфира толщиной 500 мкм, для болометрического поглотителя была выбрана пленка нитрида ниобия толщиной 8 нм, которая наносилась методом атомно слоевого осаждения. Рабочая частота болометра была выбрана около 650 ГГц, так как данная частота близка к половине энергетической щели сверхпроводимости нитрида ниобия, что дает нелинейный эффект в изменении сопротивления болометрического мостика. Рабочая частота разработанного мета-атома – 2.8 ГГц; физический размер мета-атома – 20 мм.

Метод возбуждения мета-атома отличается от ранее разработанной метаповерхности, облучаемой плоской волной или широким гауссовым пучком [1]. В данной работе предполагается использовать одиночный мета-атом, возбуждаемый двумя симметрично расположенными полуволновыми дипольными антеннами. Система из двух антенн и мета-атома помещается в криостат; измерения проводятся при температуре 4.2 К. Излучение мета-атома выводится через окно криостата и детектируется снаружи в области максимальной деструктивной интерференции. Изменение сопротивления болометра, происходящее под действием терагерцового излучения, поступающего также снаружи криостата через оптическое окно, определяется по глубине резонанса в спектре. Измерение спектра такого мета-атома требуется лишь при настройке детектора; измерения производятся на фиксированной частоте внутри наиболее чувствительной области такого резонатора.

Ожидается, что совокупность сверхпроводящих свойств материала и резонансных свойств анапольного состояния позволят значительно увеличить чувствительность болометрических сенсоров, и данное исследование прототипа-демонстратора позволят в будущем развить новый принцип бесконтактного измерения болометрических поглотителей.

## Литература

1. Cojocari M., Merenkov A., Kovalev F. Meta-bolometer Based on Toroidal Response // JETP Letters. – 2023. – № 118.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.279

# Исследование влияния квантовых вихрей на энергетический каскад волн второго звука

**Орлова А. А.[1], Ефимов В. Б.[2]**
[1]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,* E-mail: orlova_lkk@issp.ac.ru
[2]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*, E-mail: victor_efimov@yahoo.co.uk

Взаимодействие второго звука и квантовых вихрей представляет собой интересный и сложный феномен, который имеет значение для понимания гидродинамики сверхтекучего гелия. Второй звук – это волны температуры и энтропии с сильной зависимостью скорости распространения от амплитуды, уникальные для сверхтекучего гелия. Квантовые вихри представляют собой несверхтекучие нити (коры, core), вокруг которых циркулирует сверхтекучая компонента, при этом циркуляция принимает квантованные значения. Известно, что второй звук сильно рассеивается на квантовых вихрях, однако, как может измениться энергетический спектр таких волн – помогут прояснить результаты представленных экспериментов.

Измерительная ячейка представляет собой кварцевый цилиндрический резонатор волн второго звука, на одном торце которого находится пленочный никелевый нагреватель, использующийся в качестве генератора тепловых волн, а на другом торце – сверхпроводящий детектор-болометр, представляющий собой пленку из оловянной бронзы с рисунком в форме меандра, способный регистрировать колебания температуры в доли миликельвин. В качестве источника квантовых вихрей использовался кварцевый камертон, колебания ножек которого возбуждались с помощью переменного напряжения.

При подаче на нагреватель гармонического напряжения в резонаторе возникают высокодобротные стоячие тепловые волны, и в силу нелинейности энергия от частоты накачки передается по каскаду в кратные частоты, пока не начнет рассеиваться за счет вязкости. В экспериментах анализировались такие каскады при разных плотностях вихревых нитей, генерируемых колебаниями камертона с разными скоростями. В результате был обнаружен эффект смещения края вязкой диссипации волн ближе к частоте накачки, т.е. увеличение эффективной вязкости системы.

## Литература

1. Vinen W. F. Mutual friction in a heat current in liquid helium II (part I) // Proc. Roy. Soc. A 240, 114 (1957).
2. Ефимов В.Б. Акустическая турбулентность волн второго звука в сверхтекучем гелии // УФН. 2018. Том 188. Номер 10. С. 1025–1048. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.03.038317
3. Hänninen R. Generation of turbulence by oscillating structures in superfluid helium at very low temperatures / R. Hänninen, M. Tsubota, W. F. Vinen // Phys. Rev. B. 2007. V. 75, 064502. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.064502
4. Blaauwgeers R. Quartz Tuning Fork: Thermometer, Pressure- and Viscometer for Helium Liquids / R. Blaauwgeers, M. Blazkova, M. Človečko et al. // JLTP. 2007. V. 146. P. 537–562. DOI: https://doi.org/10.1007/s10909-006-9279-4
5. Efimov V. B. Direct Measurement of the Critical Velocity Above Which a Tuning Fork Generates Turbulence in Superfluid Helium / V.B. Efimov, Deepak Garg, O. Kolosov, P.V.E. McClintock // JLTP. 2010. V. 158. P. 456-461. DOI: 10.1007/s10909-009-0026-5

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.280

# Легирование Cu и Ni Mist-CVD пленок $Cr_2O_3$

**Шапенков С.В.[1], Тимашов Р.Б.[1], Степанов А.И.[1], Варыгин Г.В.[1,2], Чикиряка А.В.[1], Щеглов М.П.[1], Николаев В.И.[1]**

[1]*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.*

email: seva.shapenkov@yandex.ru

Оксид хрома (III), $Cr_2O_3$, - широкозонный (Eg ~3,0 - 3,3 эВ) полупроводник p-типа. Эпитаксиальные слои $Cr_2O_3$ и его твердых растворов перспективны для создания гетероструктур с другими широкозонными материалами n-типа. С другой стороны, $Cr_2O_3$ имеет очень низкую электропроводность, порядка ~$10^{-3}$ См/м. [1]. В этом докладе будут впервые продемонстрированы результаты легирования акцепторными примесями медью и никелем пленок $Cr_2O_3$, выращенных методом Mist-CVD (ультразвуковая паровая эпитаксия) на (0001) сапфировых подложках.

Добавление примесей производилось путем смешивания в исходном растворе ацетилацетанатов Cr и Ni или Cu в известных пропорциях. Образование кристаллических слоев $Cr_2O_3$ было подтверждено с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН 8. Измерение сопротивления производилось с помощью мегаомметра МЕГЕОН 13225 (ГРСИ РФ 74507-19) при комнатной температуре.

Заметное снижение сопротивления $Cr_2O_3$:Ni и $Cr_2O_3$:Cu наблюдается в диапазоне ростовых температур 450-500 °C (Рис. 1а). С другой стороны, зависимость сопротивления от концентрации примеси различна (Рис. 1б): для Ni она практически отсутствует, а для Cu сопротивление постепенно падает на несколько порядков. Заметное увеличение электропроводности в низкотемпературных слоях $Cr_2O_3$ можно связать с их большей дефектностью, и обе примеси, вероятно, увеличивают концентрацию носителей заряда, связанных на ростовых дефектах. Сильное влияние концентрации меди на электропроводность, предположительно, объясняется образованием твердых растворов $Cr_2O_3$ с низкоомными оксидами меди.

Определение электрически активных-ростовых дефектов, структурного положения Cu и изменения подвижности дырок в полученных образцах требуется для более подробной интерпретации полученного эффекта от легирования.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 25-29-00627.

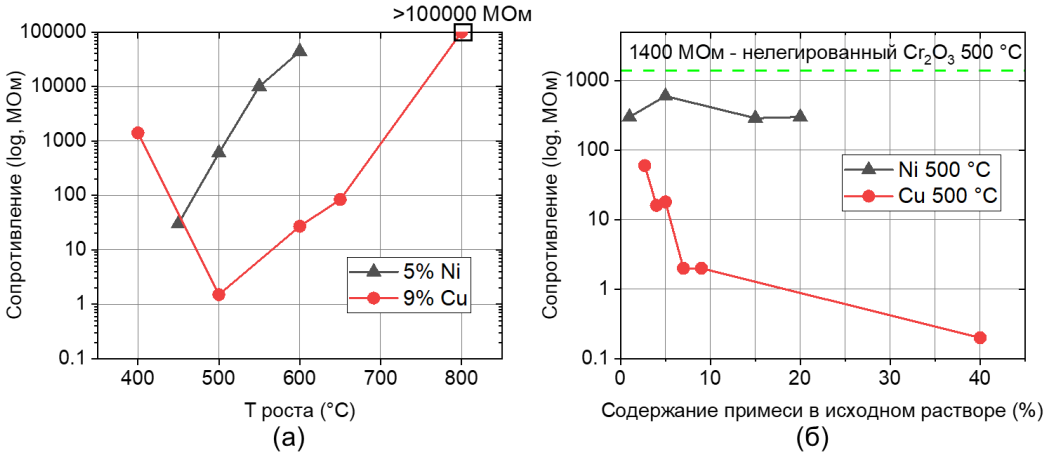



**Рисунок 1.** Зависимость сопротивления $Cr_2O_3$:Ni и $Cr_2O_3$:Cu от температуры роста **(а)** и содержания примеси в исходном растворе ацетилацетанатов **(б)**.

## Литература

1. V.I. Nikolaev et al. // J. Alloys Compd. – 2024. – № 994. С. -174687.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.281

# Отражение квантовой частицы от стенки при наличии затухания в формализме квантовой механики в фазовом пространстве

**Елманов И. А., Сеидов С. С.**

*МИСИС, Москва, Россия, m2105404@edu.misis.ru*

В работе исследуется задача отражения квантовой частицы от потенциальной стенки в фазовом формализме квантовой механики с учётом затухания. Исходной волновой функцией служит суперпозиция двух гауссовых пакетов с противоположными импульсами и симметричными центрами:

$$\psi(x) = C\left[e^{ip_0 x}e^{-(x-x_0)^2} - e^{-ip_0 x}e^{-(x+x_0)^2}\right]$$

Для данной волновой функции вычисляется функция Вигнера $W_0(x,p,t=0)$. Эволюция системы с затуханием описывается через уравнение динамики функции Вигнера свободной частицы с затуханием, выводимое из уравнения Линдблада для свободной частицы с оператором диссипации $L = x$. Задача сводится к решению следующего дифференциального уравнения:

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial t} + \gamma\frac{\partial^2 W}{\partial p^2}$$

Формальное решение уравнения осуществляется с помощью оператора эволюции, полученного по формуле Бейкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа. Оператор эволюции:

$$U = exp\left(-\frac{pt}{m}\partial_x\right) * exp\left(\gamma t\partial_p^2 - \frac{\gamma t^2}{m}\partial_{xp}^2 + \frac{\gamma t^3}{3m^2}\partial_x^2\right)$$

Для его применения используется преобразование Фурье по координате и импульсу, что позволяет получить явное выражение для $W(x,p,t)$ при произвольном времени.

Для учёта отражения от стенки в фазовом пространстве вводятся граничные условия на волновую функцию в виде $\psi(x) = \varphi(x)\theta(x)$. Таким образом, решение задачи об отражении от стенки при затухании сводится к нахождению эволюции системы без граничных условий с последующей свёрткой с функцией $G(x,p)$, зависящей от граничного условия и реализующей отражающее граничное условие. Функция $G(x,p)$ имеет аналитическое выражение:

$$G(x,p) = \frac{2}{p}\theta(x)sin(2px)$$

Задача свёртки сводится к применению преобразования Гильберта к гауссиане, что даёт ответ о конечном виде функции Вигнера для квантовой частицы, отражающейся от стенки при наличии затухания. Конечный вид функции представляет из себя сумму четырёх составляющих, каждая из которых есть произведение гауссиан на функцию Доуссона. Составляющие:

$$W_j = Const * exp\left(-\phi_j(x,p,t)\right) Im\left[D\left(f_j(x,p,t)\right) * exp(2pxi) * exp\left(g_j(x,p,t)\right)\right]$$

$D(x)$ – функция Доуссона

## Литература

1. S. S. Seidov. Wigner function dynamics with boundaries expressed as convolution.
2. C. Zachos. A concise treatment of quantum mechanics in phase space.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.282

# Study on the formation, stability and properties of the $D0_{19}$ phase in $Fe_3Ga$-type alloys

**Uyi D. O., Cheverikin V. V., Palacheva V. V., Golovin I. S.**
*National University of Science and Technology, MISIS, Moscow, Russia, duii@misis.ru*

The present study investigates the formation, stabilization, and transformation behavior of the $D0_{19}$ phase in $Fe_3Ga$ alloys, with particular focus on its thermal stability and magnetic properties. The alloy was first characterized by in situ neutron diffraction and vibrating sample magnetometry (VSM) and the $D0_{19}$ phase region identified. Analysis of electrical resistivity at first-order phase transitions ($L1_2 \rightarrow D0_{19} \rightarrow B2$) was for the first time conducted in the alloy during heating, cooling, and at isothermal annealing and the $D0_{19}$ range of existence determined, with the $L1_2$+$D0_{19}$ coexistence interval determined to span 600–615°C, in agreement with phase diagram by O. Kubaschewski [1]. The kinetics of these transitions varied significantly depending on cooling rate, and the Avrami parameter for the reverse $L1_2 \leftrightarrow D0_{19}$ transformation under isothermal conditions was evaluated [2].

The metastable $D0_{19}$ phase was fixed at room temperature for the first time by quenching the alloy from 640°C (equilibrium $D0_{19}$ phase region) using liquid nitrogen. This approach yielded a 100% $D0_{19}$ phase structure as confirmed by EBSD analysis [3].

The thermal stability of the metastable $D0_{19}$ phase was then systematically assessed. Stepwise isothermal annealing and EBSD analysis at 475°C and 550°C revealed that the $D0_{19}$ phase exhibits greater stability to transformation to the equilibrium $L1_2$ phase compared to the metastable $D0_3$ phase. These kinetic differences were further corroborated using a different alloy composition and were summarized in a constructed Time-Temperature-Transformation (TTT) diagram.

Finally, the physical properties of the $D0_{19}$ phase were evaluated. We demonstrated that the $D0_{19}$ phase is ferromagnetic at room temperature, though with very low saturation magnetostriction and comparable hardness values with the $D0_3$ phase [3].

*This study is supported by the Russian Science Foundation 19–72–20080.*

## References

1. Kubaschewski O., Iron-Binary Phase Diagrams, First ed., Springer- Verlag, Berlin, 1982.
2. Uyi D. O., Mouas M., Gasser F., Gasser J. G., Cheverikin V. V., Balagurov A. M., Golovin I. S. A study of time dependent phase transitions in the Fe-28Ga alloy by electroresistivity. Materials Letters, 384 (2025) 138039.
3. Golovin I. S., Palacheva V. V., Cheverikin V.V., Zanaeva E.N., Uyi D. O., Shcherbakov A. A., Mouas M., Gasser F., Gasser J. G., Sumnikov S. V., Balagurov A. M. Interplay between $D0_{19}$, $L1_2$ and $D0_3$ phases in $Fe_3Ga$-type alloy. JALCOM, 1000 (2024) 175150.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.283

# Область пространственного заряда в p-n переходе на коллоидных квантовых точках

**Гусев В. И.**
*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, vlad_suns@mail.ru*
*СПбАУ им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

Одним из направлений в разработке эффективных и доступных по стоимости фоточувствительных устройств является создание фоточувствительного элемента на основе p-n перехода, состоящего из коллоидных квантовых точек (ККТ), т.е. контакте слоев p- и n-легированных ККТ. Такие точки созданы из полупроводниковых материалов (к примеру, CdSe) и имеют характерные размеры от 3 до 10 нм. Экспериментально получено, что в таких структурах темной ток при обратном смещении слабо отличается по величине от тока при прямом смещении [1]. Предполагается, что это связано с формированием проводящего канала в массиве ККТ за счет беспорядка — как геометрического, так и в распределении легирующих примесей. Однако на текущий момент отсутствует общая теория, способная описать поведение подобных систем в зависимости от уровня легирования, размера, диэлектрической проницаемости и других параметров ККТ.

В данной работе представлена теоретическая модель, описывающая p-n переход в массиве квантовых точек, которая учитывает геометрический беспорядок и беспорядок в распределении примесей. С помощью компьютерной симуляции были получены зависимость толщины области пространственного заряда от концентрации легирующих примесей и энергетические диаграммы p-n перехода в равновесном состоянии и при приложенном обратном напряжении (рис. 1). Полученные результаты при слабом легировании квантовых точек согласуются с теорией для классического полупроводникового p-n перехода. Также в рамках данной модели были получены плотности состояний, в которых наблюдается кулоновская щель, являющаяся следствием беспорядка в распределении легирующих примесей в соответствии с критерием Эфроса-Шкловского [2].

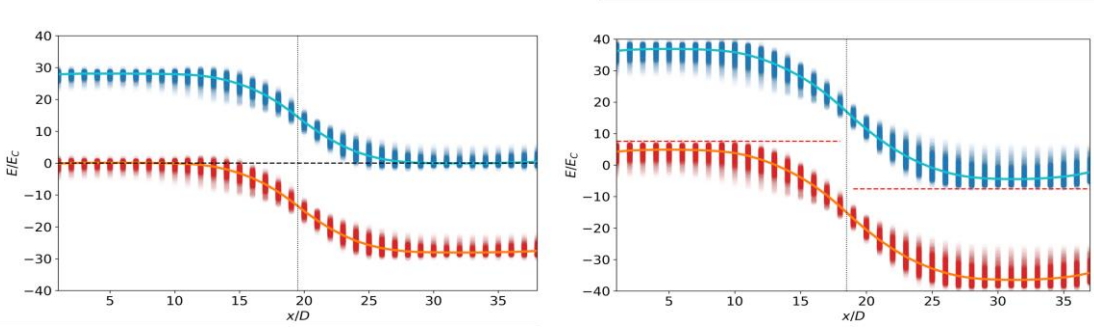



Рис 1. Пример энергетических диаграмм p-n перехода на ККТ. Слева представлена система в равновесном состоянии, справа — при приложении внешнего обратного напряжения $V=15E_C/e$. $E_C$ — энергия зарядки квантовой точки, $D$ — диаметр квантовой точки.

## Литература

1. В.С. Попов, В.П. Пономаренко, Д.В. Демкин, И.А. Шуклов, А.В. Гадомская, С.Б. Бричкин, Н.А. Лаврентьев, В.Ю. Гак, А.Е. Мирофянченко, Е.В. Мирофянченко, А.В. Кацаба, П.В. Арсенов, В.В. Иванов, В.Ф. Разумов // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. -2023. Т. 511. - № 1. С. - 78-82.
2. Shklovskii B. I. and Efros A. L. // Electronic Properties of Doped Semiconductors. — Springer. - 1984. pp. - 395.`

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.284

# Синтез и спектральная характеризация наночастиц $CeF_3$-$YF_3$-$TbF_3$ С различным соотношением ионов $Ce^{3+}$ и $Tb^{3+}$, в том числе структуры ядро-оболочка для целей визуализации температурных полей

**Пудовкин М. С., Сафиуллина Д, Калиниченко С.И., Низамутдинов А.С.**
[1]*Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань*, Россия,
jaz7778@list.ru

**Введение.** Одной из важных задач, связанных с применением люминесцентной термометрии – является визуализация температурных полей, например, интегральных схем с субмикронным пространственным разрешением, что может быть достигнуто за счет применения неорганических нано частиц - люминофоров, люминесцирующих в видимой области. Целью данной работы является изучение механизмов температурной чувствительности наночастиц фторидов, активированных ионной парой $Ce^{3+}/Tb^{3+}$.

**Результаты и обсуждения.** Наночастицы $Ce_{0.5}Y_{0.5-X}Tb_XF_3$ (X = 0.001, 0.002, 0.005, 0.01 и 0.05) имеют гексагональную фазу и средний диаметром 19 ± 1 нм и были синтезированы методом со-осаждения. $\lambda_{ex}$ = 266 нм (полоса поглощения $Ce^{3+}$ (4f - 5d)). Все полосы люминесценции интерпретированы как излучательные переходы 5d – 4f ($Ce^{3+}$) и $^5D_4$ – $^7F_J$ (J=6, 5, 4 и 3) ($Tb^{3+}$). Использовалось отношение интегральных интенсивностей люминесценции (LIR) полос $Ce^{3+}$ и $Tb^{3+}$ в качестве параметра, зависящего от температуры (рис. 1.), которое спадает с повышением температуры.

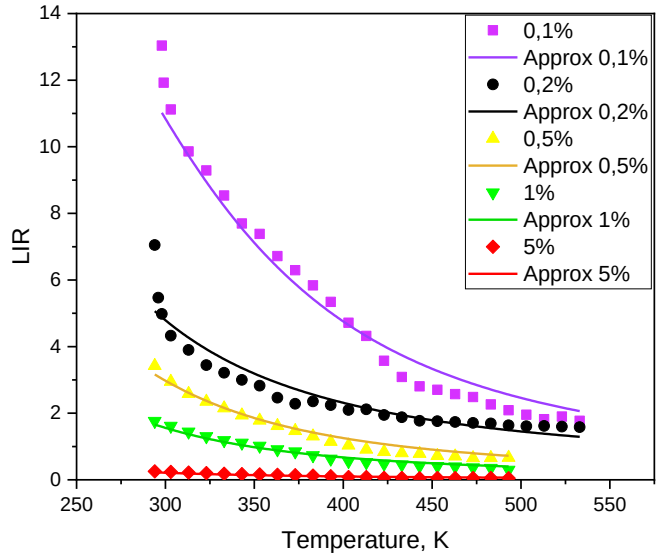



Рис.1. Аппроксимированные зависимости LIR ($I_{Ce}/I_{Tb}$) для наночастиц $Ce_{0.5}Y_{0.5-X}Tb_XF_3$ (X = 0.001, 0.002, 0.005, 0.01 и 0.05)

Видно, что скорость спада функции LIR зависит от концентрации $Tb^{3+}$. Данное явление связано с наличием двух процессов, заполняющих состояние $^5D_4$ $Tb^{3+}$: 1) безызлучательный переход с $^5D_3$ на $^5D_4$ $Tb^{3+}$ при помощи фононов (явно зависит от температуры), объясняющий температурную зависимость функции LIR. 2) - перекрестная релаксация (меньшая зависимость от температуры ($^5D_3$ – $^5D_4$ +$^7F_4$ – $^7F_0$ и $^5D_3$ – $^7F_0$ + $^7F_4$ – $^5D_4$). Вклад менее зависящего от температуры процесса перекрестной релаксации в населенность уровня $^5D_4$ увеличивается с увеличением концентрации $Tb^{3+}$ по сравнению с безызлучательным переходом $^5D_3$ – $^5D_4$.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.285

# Проверка закона квантования заряда с помощью сканирующей Кельвин-зонд микроскопии

**Анкудинов А.В.[1], Власов А.С.,[1] Дунаевский М.С.,[1] Аксенов В.А.,[1] Илькив И.В.,[2] Малевская А.В.,[1] Родин В.Д.,[1] Щенин А.С.,[1] Минтаиров А.М.[1]**

[1] *ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург,РФ, Alexander.ankudinov@mail.ioffe.ru*

[2] *Академический университет им. Ж. И. Алферова, Санкт-Петербург, РФ.*

Значение заряда электрона, мало отличное от современного, определил в начале двадцатого века Милликен, анализировавший падение микронных капелек масла, включая и выключая вертикальное электрическое поле [1]. Квантование электрического заряда - это эмпирический закон, и полвека спустя обсуждалась возможность обнаружения свободных кварков [2] с дробным (по отношению к электрону) зарядом. Проводились также и эксперименты [3]: исследовались подвешенные в магнитном поле субмиллиметровые диамагнитные частички, которые, как было обнаружено, занимали при включении электрического поля дискретные положения равновесия, соответствующие элементарным скачкам заряда на них. Заряд частичек, следуя Милликену, пытались менять скачками в потоке ионов воздуха, производимом рентгеновским излучением и приложенным электрическим полем.

Мы исследовали значения электрического потенциала над $Au$ −наночастичками на изоляторе. Изучались коллоидные частички с характерными диаметрами $20$, $40$ и $80nm$. Применялся метод сканирующей Кельвин-зонд микроскопии (СКЗМ) в атмосферных и форвакуумных условиях. Использовались как режим амплитудной, таки и фазовой модуляции (АМ и ФМ СКЗМ). Режим ФМ СКЗМ, показывая по сравнению с АМ СКЗМ примерно в два раза худшее отношение сигнал-шум, правильнее, тем не менее, определял перепады потенциала над субмикронными участками поверхности. Управлять зарядовым состоянием частичек помогало специальное устройство образца, в виде конденсатора на основе кремния с толстым, $\cong 1.4\mu m$, термическим окислом в качестве изолирующего диэлектрика и перфорированным верхним электродом. Меняя потенциал нижнего сплошного электрода относительно заземленного верхнего, полный поверхностный заряд отверстий микронного диаметра плавно регулировался с точностью сотых долей элементарного заряда. Подача развертки потенциала вызывала временные осцилляции потенциала над $Au$ −частичкой, уединенной внутри такого отверстия. Например, измеренные на высоте $20nm$ над $40nm - Au$ −частичкой в режиме АМ СКЗМ осцилляции амплитудой $10mV$ отражают, как мы полагаем, элементарные скачки заряда на ней.

Работа подержана грантом РНФ 24-22-20014.

## Литература

1. Милликен Р. /Электроны, протоны, фотоны, нейтроны и космические лучи/ М.–Л.: Государственное объединенное научно-техническое издательство НКТП СССР (1939), 310 с.
2. Зельдович Я.Б. /“Горячая” модель Вселенной/ УФН **89**, 4, 647–668 (1966)
3. Брагинский В.Б. /Физические эксперименты с пробными телами/ М.: Наука (1970), 136 с.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.286

# Влияние интенсивной пластической деформации кручением на структуру и процессы термической кристаллизации аморфного сплава $Zr_{42.5}Cu_{42.5}Al_{10}Fe_5$

**Пархоменко М. С.[1], Базлов А. И.[1]**

*[1]НИТУ МИСИС, г. Москва, Россия*
*parkhomenko.m@misis.ru*

Аморфные металлические стекла (МС) – достаточно новый класс металлических материалов, которые благодаря наличию однородной структуры, отсутствию дефектов кристаллического строения, присущих традиционным материалам, показывают гораздо более высокий уровень механических свойств, по сравнению с кристаллическими сплавами. Но в то же время, существует одно значительное препятствие для широкого применения МС – у данных материалов практически полностью отсутствует пластичность на растяжение, а пластическая деформация при сжимающих очень мала, что делает их склонными к хрупкому разрушению и существенно ограничивает возможности деформационной обработки [1,2]. Однако, перспективным методом обработки аморфных металлических стекол является интенсивная пластическая деформация кручением (ИПДК) и ее разновидность - аккумулирующая интенсивная пластическая деформация кручением (АК-ИПДК) за счет “мягкости” схемы напряженного состояния [3]. Данные обработки изменяют структуру аморфной фазы, индуцируя образование большой плотности полос сдвига, фазовое расслоение, области химической неоднородности и нанокристаллизацию, что может благоприятно повлиять на механические и физические свойства МС. В дополнение к этому, ИПДК и АК-ИПДК позволяет получать объёмные образцы из аморфной ленты.

В данной работе были исследованы полученные методом быстрой закалки расплава на вращающийся медный диск аморфные ленты сплава $Zr_{42.5}Cu_{42.5}Al_{10}Fe_5$, подвергнутые дальнейшей ИПДК на 0.5 оборотов и АК-ИПДК 1+1+1+1+6 оборотов наковальни. Рентгеноструктурный анализ показал сохранение аморфной фазы после ИПДК и АК-ИПДК. Однако, данные обработки приводят к формированию в аморфной матрице небольшого количества нанокристаллов размером до 20 нм. При последующем нагреве наблюдается рост данных нанокристаллов без формирования новых зародышей кристаллических фаз, который создает поля упругих напряжений “аморфная матрица-кристалл”, и приводит к формированию в структуре двух модификаций фазы CuZr: B2 и B19’. Ко всему прочему, данное мартенситное превращение снижает температуру образования фазы $AlCu_2Zr$.

Данные результаты полезны для дальнейшего понимания деформационного и термического поведения аморфных сплавов на основе циркония, а также, для дальнейшего проектирования композитов “аморфная матрица – нанокристаллы” с заданными свойствами [4].

## Список литературы:

1. D. V. Louzguine-Luzgin, V.I. Polkin, Properties of bulk metallic glasses, Russ. J. Non-Ferrous Met. 58 (2017) 80–92.
2. A.L. Greer, Y.Q. Cheng, E. Ma, Shear bands in metallic glasses, Mater. Sci. Eng. R Reports. 74 (2013) 71–132.
3. D. V. Gunderov, A.A. Churakova, V. V. Astanin, R.N. Asfandiyarov, H. Hahn, R.Z. Valiev, Accumulative HPT of Zr-based bulk metallic glasses, Mater. Lett. 261 (2020) 127000.
4. J. Ding, A. Inoue ,S.L.Wu,E.Shalaan, A.A. Al-Ghamdi. Formation, microstructure and mechanical properties of ductile Zr-rich Zr–Cu–Al bulk metallic glass composites, Jour. of Mat. Res. and Techn. Vol. 15, 2021, p. 5452-5465

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.287

**Математическая модель формирования структур в процессе кристаллизации сплавов**

**Яковлев Н.Н.**

*ФИЦ ХФ РАН г.Москва, Россия, amntksoyuz@mail.ru*

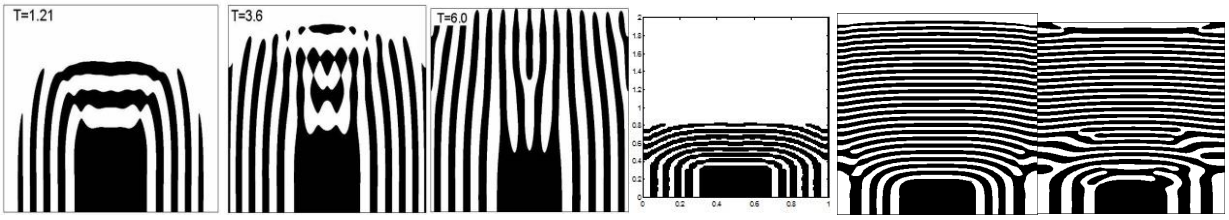
Для описания формирования в процессе кристаллизации различных структур требуется использование современных методов математической физики. «До настоящего времени нет достаточно полной теории кристаллизации эвтектических сплавов, объясняющей образование эвтектических структур разных типов» [1]. Предложенная модель изложена в совместной монографии [2], а в одномерном случае в [3], описывает возникновение и развитие неустойчивостей твердо-жидкой области фронта кристаллизации и позволила описать возникновение не только дендритов, но и иных структур твердой фазы без привлечения стохастических подходов. В модели используется модифицированная модель ликвации Кана-Хилларда и представление о кристаллизу-ющемся двухкомпонентном расплаве как о растущей пористой структуре. Модель состоит из семи дифференциальных уравнений в частных производных, в одномерном случае обозначим $c$– мольная доля твердой фазы, её плотность $\rho_s$, $\rho_l$ – жидкой фазы; $u$ усредненное смещение твердой фазы, $w_s = \partial u / \partial t$; $w \equiv w_l - w_s$; $v$ -осредненное смещение жидкой фазы относительно твердой, $w = \partial v / \partial t$, $\rho$– параметр плотности из модели Био, $T$ – температура, $D(c,z)$ – коэффициент силы межфазного трения, $M_D(T)$ – диффузионная подвижность жидкого компонента.

$$\begin{cases} u_t = w_s, v_t = w, \\ \rho(w_s)_t + \rho_l(w)_t = \left[\left(\lambda + 2\mu + \alpha^2 M\right)u_x + \alpha M v_x\right]_x + \rho \cdot g, \\ \rho_l(w_s)_t + \rho_{add}(w)_t = -Dw + \left[\alpha M u_x + M v_x\right] + \rho_l \cdot g, \end{cases} \quad (1)$$

$$\left[(\rho_l)_t + (\rho_l w)_x + \rho_s (w_s)_x = 0, \right. \quad (2)$$

$$\begin{cases} c_t + w \cdot (c - c_{cr}) c_x = \left\{ M_D \left[ F(c,T) - (u_x)^2 \partial_c (\lambda + 2\mu) - \right.\right. \\ \qquad \left.\left. - \varepsilon^2 \left(F_1(c,T) c_x\right)_x + \varepsilon^4 \left(F_2(c,T) c_{xx}\right)_{xx} \right]_x \right\}_x, \quad (3) \\ \left(T + \kappa c\right)_t = D_0 T_{xx}. \end{cases}$$

В результате численного расчета по двумерной модели (ИПМ РАН) визуализированы линии критического уровня функции $c_{cr}$=0,49 , при этом если $c > c_{cr}$, то имеет место преимущественно «жидкая» фаза, а при $c < c_{cr}$ - преимущественно «твердая» фаза.




а б в г д е

Формирование дендритной структуры (а-в) и полосчатой неоднородности (г-е), переходящей в равноосную кристаллизацию при различных параметрах модели

**Литература**

1.Лякишев Н.П., Бурханов Г.С. Металлические монокристаллы// М.: Элиз, 2002.-312с.

2. Радкевич Е.В., Лукашев Е.А., Яковлев Н.Н., Васильева О.А. Введение в обобщенную теорию неравновесных фазовых переходов и термодинамический анализ задач механики сплошной среды: монография. М.: Издательство Московского университета, 2019. 344с.

3. Яковлев Н.Н., Лукашев Е.А., Радкевич Е.В. Проблемы реконструкции процесса направленной кристаллизации // Доклады РАН, 2008. - т. 421, №5. -С. 625 - 629.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.288

# МИКРОСТРУКТУРА, ТЕКСТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СПЛАВА Cu-Hf, ДЕФОРМИРОВАННОГО КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

**Страумал П.Б., Лукьянова Е.А., Мартыненко Н.С., Рыбальченко О.В.**

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва, Россия, pstraumal@imet.ac.ru*

В данной работе была исследована эволюция микроструктуры, текстуры и фазового состава интенсивно пластически деформированного (ИПД) сплава Cu-0,9%Hf в зависимости от степени деформации. Для оценки влияния исходного фазового состава на структуру и свойства сплава после ИПД, образцы перед деформацией подвергали отжигу при температурах 500 и 900ºС с последующим охлаждением в воду. Время выдержки при указанных температурах составляло более 1000 часов, что обеспечивало формирование равновесного состояния. Отжиг при температуре 500ºС проводили с целью получения двухфазного состояния (частицы $Cu_5Hf$, распределенные в практически чистой медной матрице), а при 900ºС - для формирования пересыщенного твердого раствора на основе меди.

Деформация проводилась путем кручения под высоки давлением (КВД). Диски диаметром 10 мм и толщиной 0,6 мм, подвергались обработке при комнатной температуре под давлением в 5 ГПа на 0,5; 1, 3, 5 и 15 оборотов (что соответствует сдвиговой деформации 26, 52, 157, 262, 785).

При помощи дифракции обратно рассеянных электронов и рентгеновского текстурного и фазового анализа исследовалась микроструктура, текстура и фазовый состав образцов. Измерения проводились на середине радиуса каждого диска. Результаты показывают, что после 5 оборотов достигается гомогенная ультрамелкозернистая структура со средним размером зерна ~150 нм для отжига при 500ºС и ~170 нм для отжига при 900ºС с преимущественно высокоугловыми границами (~ 80%). Текстура состоит из компонент, типичных для ГЦК металлов, подвергнутых простой сдвиговой деформации: $A_1$, C, A, B. Также наблюдается новая компонента {1-14}<110>. Для всех количеств оборотов эта компонента имеет максимальную интенсивность. С увеличением степени деформации происходит постепенное изменение текстуры вплоть до 5 оборотов, в дальнейшем интенсивности всех компонент остаются практически одинаковыми.

Электронная сканирующая микроскопия показала наличие большого количества частиц $Cu_5Hf$ в образце, отожженном при 500ºС и отсутствие частиц в образце, отожженном при 900ºС.

Результаты рентгенофазового анализа показывают сдвиг фазового состава образцов после деформации. В целом фазовый состав образцов, отожженных как при 500ºС, так и при 900ºС, стремится к составу, соответствующему «эффективной температуре» (попадающей на линию эвтектики системы Cu-Hf). С увеличением количества оборотов возрастает степень приближения фазового состава к эквифинальному, соответствующему «эффективной температуре».

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания ИМЕТ РАН 075-00319-25-00.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.289

# Эксперимент Кармана для раствора полимеров в микроканале при обтекании большого препятствия.

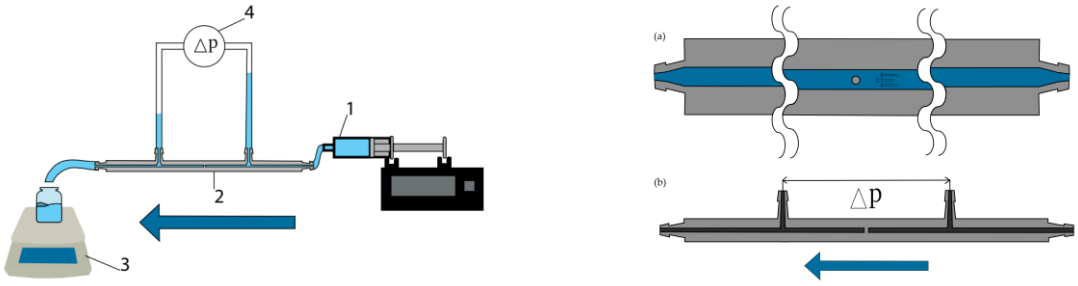
**Кардаш И. Ю.**[1]
[1]*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,*
E-mail:ivankardash@issp.ac.ru

Добавление даже малого количества длинных и гибких молекул полимера с высокой степенью полимеризации значительно меняет реологические свойства жидкости [1].

В равновесии длинная молекула полимера под действием теплового шума сворачивается в клубок, размер этого клубка зависит от молекулярной массы полимера [2]. Если на полимер действуют неоднородные внешние силы, клубок полимера под действием этих сил начинает растягиваться, а после прекращения действия растягивающих сил клубок будет релаксировать к своему равновесному размеру.

Полимеры, находясь в потоке жидкости, растягиваются, из-за чего у такого раствора появляются упругие свойства. При малых числах Рейнольдса упругость может стать существеннее сил инерции.

В работе измерялась разница давления между двумя точками в канале и средний массовый поток жидкости (со средней скоростью V) через канал шириной 2.5 мм, высотой 1 мм и вертикально ориентированным цилиндрическим препятствием диаметром d = 1 мм по центру канала. Схемы экспериментальной установки и канала приведены ниже.




Пр

и числе Вайсенберга Wi = λ*V/d (где λ - наибольшее время релаксации полимера) выше критического значение сопротивления потока жидкости (вычисленное из разности давления и среднего потока) в канале превышает ламинарное значение и, одновременно с этим, впервые наблюдался рост флуктуаций разности давления между двумя точками в канале с большим препятствием. Также были получены спектры флуктуаций разности давления.

## Литература

1. Steinberg V. //Annual Review of Fluid Mechanics. - 2021. - Т. 53. - С. 27—58.
2. Дой М., Эдвардс С. //Динамическая теория полимеров. Пер. с англ. – 1998.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.290

# ПЛАЗМОННЫЙ РЕЗОНАНС В ПОВЕРХНОСТНО-ЛЕГИРОВАННЫХ КОЛЛОИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ CdS

**Ипатов А.Н., Куприянов Г.А.**
*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия,* henryweis3@gmail.com

Активное развитие электроники в последние десятилетия создает запрос на создание новых материалов на основе полупроводниковых нанокристаллов. Их свойства оказываются принципиально отличными от таковых у аналогичных объемных компонентов. Одним из имеющих большие перспективы материалов являются коллоидные легированные полупроводниковые нанокристаллы, оптические спектры которых характеризуются наличием дипольных резонансов. Положение резонансных линий может зависеть от ряда параметров, таких как число и концентрация свободных носителей заряда, высота потенциального барьера на границе нанокристалла, геометрические размеры системы, тип легирования, который условно может определяться как поверхностный или объемный.

В данной работе были исследованы оптические спектры поверхностно-легированных коллоидных нанокристаллов CdS, содержащих в себе $N = 8$ нелокализованных носителей заряда. Исследования производилось на основе самосогласованного квантовомеханического описания многочастичных возбуждений в системе делокализованных носителей заряда.

В результате расчетов было установлено, что в спектрах исследуемых нанокристаллов присутствуют две доминирующие резонансные линии «1» и «2». Характер одной из них может быть определен как дипольный плазмон, в то время как в основе другого слабо-коррелированного состояния лежит одночастичный переход. С ростом высоты потенциального барьера на границе нанокристалла происходит перераспределение сил осцилляторов между модами «1» и «2». Стоит отметить, что с ростом радиуса системы характер моды «1» меняется от коллективного возбуждения к преимущественно одночастичному состоянию. Также при увеличении геометрических размеров нанокристалла происходит рост силы осцилляторов моды «2» в пределе «свободной системы». При этом результаты, полученные в рамках двухуровневой модели, оказались практически идентичными результатам, полученным при использовании полного базиса одночастичных переходов. Кроме того, следует отметить, что рост радиуса кристаллов приводит к уменьшению частот основных оптических переходов, в то время как увеличение высоты потенциального барьера, наоборот, к их росту.

Таким образом, в оптических спектрах объемно-легированных коллоидных нанокристаллов CdS присутствует две доминирующие линии, одна из которых имеет характер дипольного плазмона, а другая является слабо-коррелированным состоянием. При этом изменение высоты потенциального барьера на границе приводит к перераспределению сил осцилляторов этих мод, в то время как зависимости сил осцилляторов от высоты барьера в основном определяются радиусом системы.

1. Theory of quantum plasmon resonances in doped semiconductor nanocrystals / Zhang H., Kulkarni V., Prodan E., Nordlander P., Govorov A. O. // The Journal of Physical Chemistry C, 2014. – Vol. 118. – No. 29. – Pp. 16035–16042.
2. Charge-tunable quantum plasmons in colloidal semiconductor nanocrystals / Schimpf A. M., Thakkar N., Gunthardt C. E., Masiello D. J., Gamelin D. R. // ACS Nano (The American Chemical Society), 2014. – Vol. 8. – No. 1. – Pp. 1065–1072.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.291

# Фазовый переход в микропроводе $Co_{83}Fe_7C_1Si_7B_2$ в температурной зависимости спектра ЭПР

**Шестаков А. В.[1], Фазлижанов И.И.[2], Еремина Р.М.[2], Демишев С.В.[3], Родионова В.В.[4], Колесникова В.В.[4]**

[1]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*, AlekseiVShestakov@gmail.com
[2]*Физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*
[3]*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*
[4]*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия*

Тонкий ферромагнитный металлический микропровод в стеклянной оболочке из $Co_{83}Fe_7C_1Si_7B_2$ (d/D=38/41 μm) был получен методом Тейлора-Улитовского при охлаждении водой/воздухом. Микропровода на основе CoFe демонстрируют различные типы перемагничивания: бистабильное, ступенчатое и S-образное с сильно увеличенной коэрцитивной силой [1]. Было обнаружено, что система микропроводов на основе Co с почти нулевым коэффициентом магнитострикции демонстрирует ступенчатую петлю гистерезиса [2]. Петли гистерезиса магнитострикционных микропроводов проявляют сильную чувствительность к отношению d/D [3]. Влияние условий постобработки на магнитные свойства аморфных и нанокристаллических микропроводов было тщательно проанализировано, уделено внимание влиянию магнитоупругой, индуцированной и магнитокристаллической анизотропии на петли гистерезиса микропроводов, обогащенных Fe, Ni и Co [4].

Первые производные спектров поглощения СВЧ-излучения при температурах от 290 до 560 К и в магнитных полях до 10 кЭ были зарегистрированы на ЭПР-спектрометры (Varian-12, X-диапазон 9,48 ГГц). Микропровод располагался вертикально в центральной части прямоугольного резонатора (TE102), т.е. вдоль магнитной компоненты СВЧ и перпендикулярно внешнему магнитному полю. В спектре микропровода наблюдаются три линии (Рисунок 1), связанные с компонентами $g$-тензора ($g_x$, $g_y$, $g_z$) ферримагнитного резонанса. При температурах выше 510 К три линии переходят в одну, а образец из ферромагнитного состояния в парамагнитное.

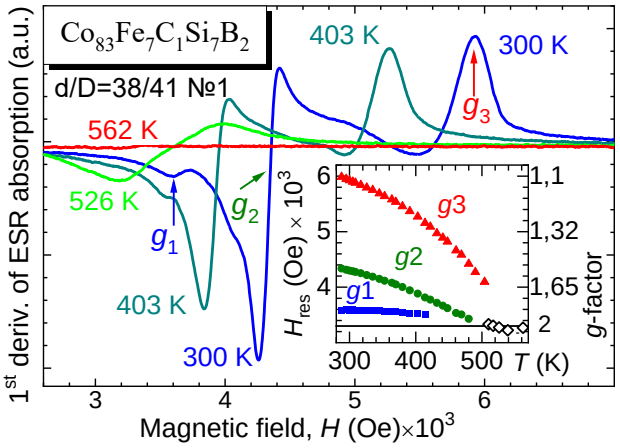



Рисунок 1. ЭПР спектры $Co_{83}Fe_7C_1Si_7B_2$.

## Литература

1. Rodionova V.V., Baraban I.A., Panina L.V.,Bazlov A.I.,Perov N.S. // IEEE Trans.of Magn. – 2018. – Т. **99**. – С. 1-6.
2. Rodionova V.V. et.al. // J Supercond Nov Magn. –2014. – Т. **28.** – С. 977-981.
3. Zhukov A., Ipatov M., Zhukova V. // Abstarct II-Moscow Readings (MISIS), Chernogolovka. – 2011. – С. 62.
4. Zhukova V. et.al.//Opt. of Magn. Properties of Magn. Microwires by Post-Processing. – 2020. – Т. **8**. – С. 1006.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.292

# Исследование конвективного тороидального вихря в лабораторных условиях

**Кардаш Д.Ю.**[1]

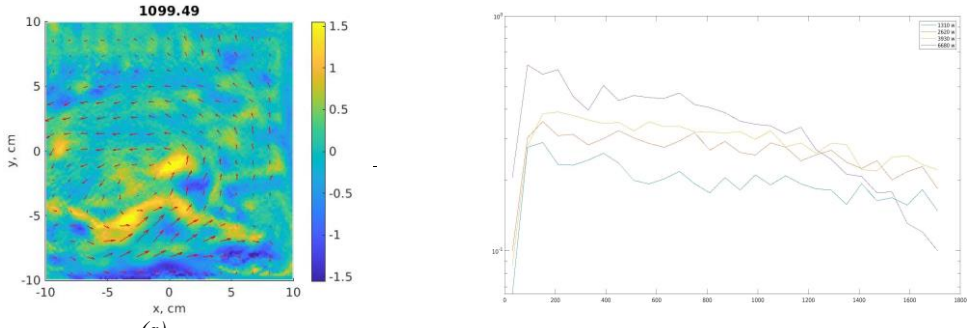
[1] *Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия, E-mail: d.kardash@issp.ac.ru*

Динамика и структура вихревых потоков в тороидальной геометрии является важной задачей из-за широкой области прикладного применения. Ламинарные и турбулентные закрученные потоки возникают в различных технических системах, таких как гидравлические установки, камеры сгорания, торообразные реакторы.

Была создана экспериментальная установка по исследованию тороидального вихревого движения. Установка представляет собой цилиндрический сосуд из алюминия, с нагревательным элементом на дне, близко к внешней стенке. На установку была смонтирована система регистрации движения потоков жидкости, представляющая собой генератор лазерного листа и видеокамеру. Ёмкость заполнялась дистиллированной водой с добавленными нейтрально плавучими полиамидными частицами PA-12 диаметром около 90 мкм. При обработке полученных видео движения декорирующих частиц в толще воды с помощью методом PIV (particle image velocimetry), были рассчитаны поля скоростей.

Установлено наличие тороидального вихря в данной системе, при этом измерения показали, что средняя скорость такого вихря меньше трехмерных флуктуаций скорости. Проведена серия экспериментов с расширенной ограничивающей вставкой в центральной области. Геометрия преобразовывалась таким образом чтобы поперечное сечение, в котором формируется тороидальный вихрь, имело приблизительно квадратную форму, а отношение радиуса поперечного сечения к радиусу тора было сравнительно небольшим (≈0,25), аналогично геометрии тонкого тора в [1]. Проведена серия экспериментов для различных мощностей накачки.

Исходя из полученных результатов, можно заключить, что форма внутренней поверхности не имеет большого влияния на полоидальные скорости течения жидкости и общую энергию системы, а основной эффект заключается в изменении формы поперечного профиля вихря. Увеличение мощности накачки увеличивает энергосодержание вихря, но уменьшает время его жизни. Также получены профиля скоростей и динамика эволюции тороидальных вихрей для разных параметров накачки.




*(а)* *(б)*

**Рис. 2.** Пример поля скоростей в поперечном сечении кольцевого вихря, цветом отображено значение завихренности. (*а*). Значения полной энергии в профиле вихря в зависимости от времени для разных мощностей накачки. *(б)*

1. *Sukhanovskii, A. et al.* Unsteady Turbulent Swirling Flows in a Thick Torus // Heat Transfer Engineering — 2022. — Vol 44, no.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.293

# ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ТИТАНАТА БАРИЯ СТРОНЦИЯ

**В. В. Иванов, О.В. Малышкина, И.Л. Кислова, А.И. Иванова**

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», Россия, г. Тверь, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33, vladislav_40@mail.ru*

В работе проведены сравнительные исследования структуры, а также диэлектрических характеристик керамики $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$ (BST) с x=0,1; 0,2; 0,25; 0,3; 0,35; 0,4. Образцы были получены методом твердофазного синтеза.

Исследования структуры и элементного состава проводились на растровом электронном микроскопе JEOL JSM6610LV. Изображения структуры образцов керамики представлены на рис. 1 (масштабная метка 10 мкм).

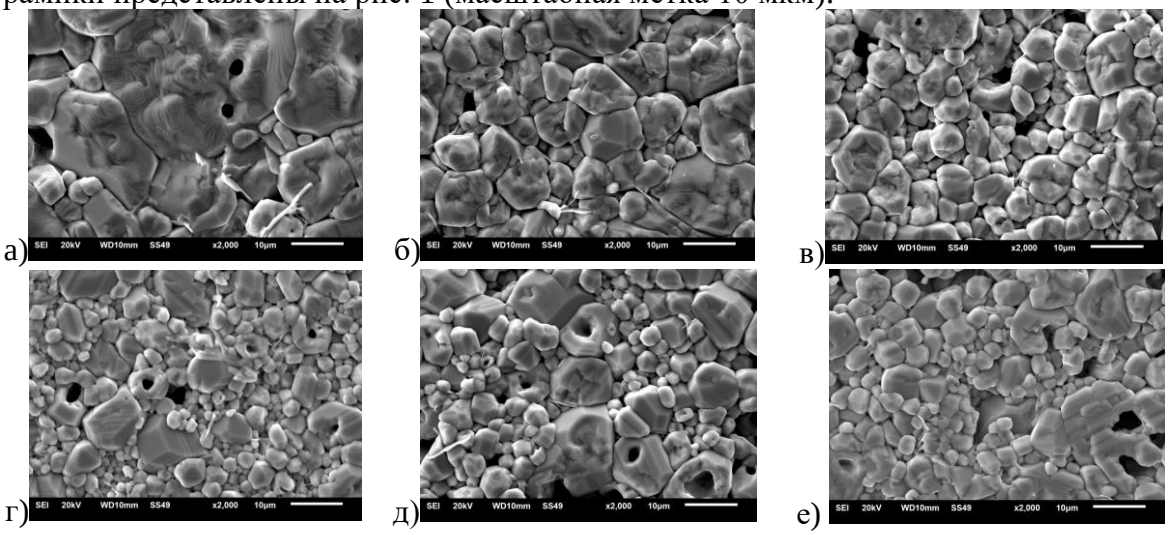



Рис. 1. Изображения зернистой структуры образцов: $Ba_{0,9}Sr_{0,1}TiO_3$ (а), $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$ (б), $Ba_{0,75}Sr_{0,25}TiO_3$ (в), $Ba_{0,7}Sr_{0,3}TiO_3$ (г), $Ba_{0,65}Sr_{0,35}TiO_3$ (д), $Ba_{0,6}Sr_{0,34}TiO_3$ (е).

Интересно отметить, что у всех составов четко выделяются два типа зерен: крупные зерна, имеющие неправильную форму, и мелкие округлой формы. Два типа зерен могут свидетельствовать о наличии двух фаз в данных материалах. При малом содержании стронция (x <0,25) структура образцов представлена в основном крупными зернами с выраженными границами и пористыми участками. В образцах с x≥0,25 количество мелких зерен увеличивается примерно в 4-5 раз по сравнению другими составами. Наибольшее количество мелких зерен зафиксировано у образцов $Ba_{0,7}Sr_{0,3}TiO_3$. В таблице представлены значения диэлектрической проницаемости (ε) для образцов BST при комнатной температуре на частоте измерительного поля $10^3$ Гц, а также температура фазового перехода.

| | $Ba_{0,9}Sr_{0,1}TiO_3$ | $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$ | $Ba_{0,75}Sr_{0,25}TiO_3$ | $Ba_{0,7}Sr_{0,3}TiO_3$ | $Ba_{0,65}Sr_{0,35}TiO_3$ |
|---|---|---|---|---|---|
| ε | 1410 | 1440 | 1450 | 2140 | 1360 |
| $T_c$,°C | 100 | 75 | 60 | ~57 | <25 |

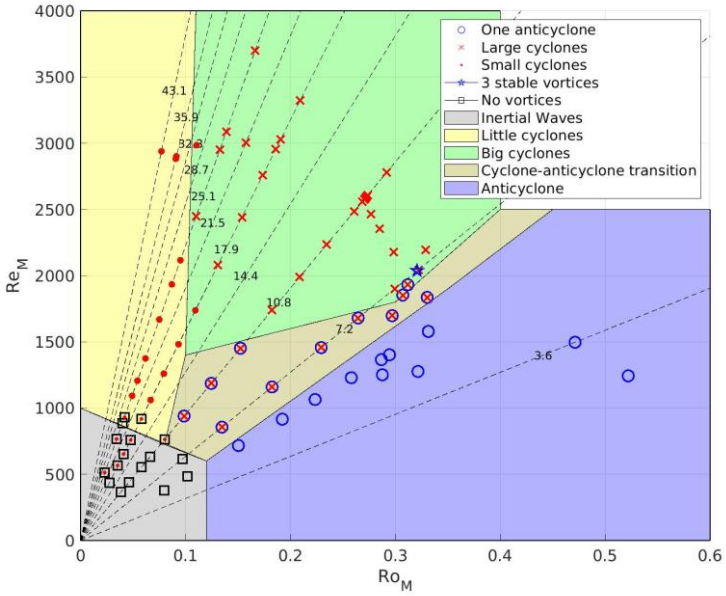
У образца $Ba_{0,7}Sr_{0,3}TiO_3$ температура фазового перехода наиболее приближена к комнатной. Этим и объясняется тот факт, что величина ε в данном материале превышает соответствующие значения в других образцах во всем частотном диапазоне измерительного поля.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.294

# РЕЖИМЫ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

**Тумачев Д. Д.[1], Филатов С. В.[1], Вергелес С. С.[2], Левченко А. А.[1]**
[1]*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия,*
*d.tumachev@mail.ru*
[2]*Институт теоретической физики имени Ландау РАН, Черноголовка, Россия*

В работе представлены результаты экспериментального исследования турбулентности во вращающейся жидкости. Эксперименты проводились в кубическом аквариуме (1 м$^3$) на вращающейся платформе. Поле скорости получалось при помощи метода PIV в горизонтальной плоскости на полувысоте куба. Энергия вносилась в жидкость при помощи специальных мешалок вдоль вертикальных ребер куба. В зависимости от чисел Россби (□□□) и Рейнольдса (□□□) наблюдаются разные турбулентные режимы, которые систематизированы на рисунке.




Основные режимы течения:

**Инерционные волны** (низкие □□□, □□□ ): Характеризуется распространением инерционных волн от углов аквариума, отсутствием вихрей. Спектры показывают пики на частотах, кратных 0.21 Гц (частота смены вращения мешалок).

**Режим с антициклоном**: При 2Ω < 0.21 Гц формируется стабильный центральный антициклон диаметром ∼60 см. Профиль скорости аппроксимируется логарифмическим законом.

**Режим с циклонами и антициклоном**: При попадании частоты мешалок в диапазон инерционных волн появляются 3-4 циклона. Радиус циклонов 35-40 см.

**Режим с крупными циклонами**: 5-7 циклонов, радиус до 30 см. Наблюдается обратный каскад энергии при □ < 0.2 см$^{-1}$ .

**Режим с мелкими вихрями**: При высоких скоростях вращения образуется ∼15 циклонов радиусом 10-15 см. Спектр энергии близок к степенному с показателем -3. Обратный каскад энергии также наблюдается при □ < 0.2 см$^{-1}$.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.295

# Перспективные искусственные джозефсоновские атомы для квантовой симуляции топологических моделей

**Коноплева Е. Е.[1,2], Федоров Г. П.[2] , Астафьев О.В[1,2]**
[1]*Сколковский Институт Науки и Технологий, Москва, 121205, Россия*
[2]*Московский Физико-Технический Институт, Долгопрудный, 141701, Россия*
*Ekaterina.Konopleva@skoltech.ru*

Топологически нетривиальные явления возникают не только в фермионных системах, но и в других платформах, включая фотонные. Фотонные модели, такие как “Zig-Zag" модель [1], имеют дополнительную степень свободы - поляризацию. Джозефсоновские искусственные атомы превосходят фотонные системы в масштабируемости и гибкости топологии, избегая их ограничений. В настоящей работе представлен и численно изучен дизайн поляризационного трансмона как компонентной базы для симуляторов топологических моделей.

Электрическая схема изучаемой нелинейной системы и физический элемент приведены на рис. 1. Емкости и джозефсоновская энергия приведенной топологии имеют следующие значения C = 33.9 фФ, C′ = 7.7 фФ и $E_J$ = 14.9 ГГц. Численно были посчитаны собственные энергии переходов $\omega_{1-3}$ = 7.07, 7.07, 7.83 ГГц в $\Phi_{ext}$ = 0. Два нижних уровня вырождены, а их дипольные поля ортогональны.

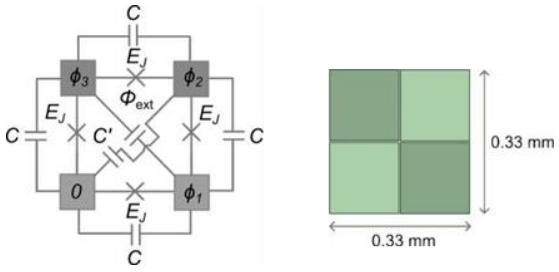



Рис. 1. Электрическая схема и физический элемент

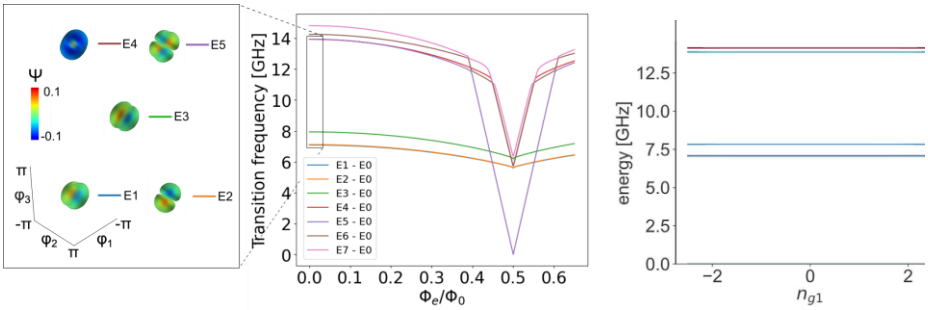



Рис. 2. Спектр от внешнего потока $\Phi_{ext}$ и зарядовая дисперсия

Был построен спектр от внешнего потока, приведенный на рис. 2 . В $\Phi_{ext}/\Phi_0 \approx 0.5$, потенциал становится двухъямным, что приводит к гибридизации состояний. Спектр зависимости от зарядового шума также приведен на рис. 2 , на нем видно подавление зарядового шума за счет высокого соотношения $E_J/E_C \approx 100$

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №25-22-00280

## Литература

1. Poddubny A., Miroshnichenko A., Slobozhanyuk A., Kivshar Y. // ACS Photonics, 1, 101–105 (2014).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.296

# Теплоемкость гидрида и дейтерида никеля

**Усманов Р.И.[1,2], Кулаков В.И.[2]**
[1]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва,* mephistomadjim@mail.ru
[2]*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка,* kulakov@issp.ac.ru

При высоком давлении в ГЦК никеле, помещенном в атмосферу водорода, происходит изоморфное превращение, сопровождающееся скачкообразным увеличением растворимости водорода. Получающийся при этом гидрид никеля относится к довольно многочисленной группе гидридов *d*-металлов, образующихся при высоких давлениях водорода. Динамика решетки большинства из них ранее была изучена методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН). Полученные спектры НРН, дополненные DFT расчетами, были далее использованы для построения спектров плотности фононных состояний $g(E)$ гидридов и расчета их решеточной теплоемкости $C_V(T)$ до 1000 К [1]. Точность расчета, однако, неизвестна и требует экспериментальной проверки, которая была ранее проведена лишь для одного гидрида высокого давления – CrH [2]. Экспериментальное исследование гидридов высокого давления затруднено из-за малой массы образцов и их термической нестабильности при нормальных условиях. Кроме того, гидриды *d*-элементов, включая никель, – это металлы, причем электронный вклад в их теплоемкость значителен и не может быть точно рассчитан.

В настоящей работе образцы гидрида NiH и дейтерида NiD были синтезированы при давлении 7.4 ГПа и температуре 873 К с последующим быстрым охлаждением до 100 К. Полученные образцы были исследованы методом дифференциальной сканирующей калориметрии при температурах 120-220 К с помощью калориметра DSC-7 фирмы Perkin-Elmer. Для гидрида никеля ранее было экспериментально построено уравнение состояния при высоких давлениях [3] и рассчитан коэффициент теплового расширения до высоких температур [4], что позволило учесть разницу между $C_P$, которая получается из калориметрических исследований, и $C_V$, которая получается из расчета. Из проведенного в настоящей работе DFT расчета плотности электронных состояний на уровне Ферми был оценен электронный вклад в теплоемкость. Хорошее согласие экспериментальных и расчетных значений $C_P(T)$ свидетельствует о хорошей точности НРН измерений и DFT расчетов. Рассчитанные зависимости $C_P(T)$ были продолжены до температуры 1000 К и использованы для проверки возможности расчета измеренной в нынешней работе изотермы растворимости водорода в никеле при 873 К в модели регулярных твердых растворов.

## Литература

1. Antonov et al. Lattice dynamics of high-pressure hydrides studied by inelastic neutron scattering. J Alloys Compd 2022.
2. M. A. Kuzovnikov et al., Heat capacity and other thermodynamic properties of hcp-CrH and hcp-CrD, International Journal of Hydrogen Energy (2025).
3. V. E. Antonov et al., Neutron spectroscopy of nickel deuteride, J Alloys Compd 2013.
4. Jean-Marc Joubert et al. Thermodynamic Modeling of the Ni−H System. J. Phys. Chem. C 2015, 119, 24546−24557.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.297

# Изучение хеморезистивных свойств полупроводникового оксида ванадия

**Матасов М.Д.[1], Вершинин Н.Ф.[2], Мазилкин А.А.[2], Ионов А.М.[2], Матюшин Н.А.[1], Протасова С.Г.[2] Бармин А.А.[1]**

[1]*АО ГНЦ Центр Келдыша, Москва, ул. Онежская, д.8*

[2]*ИФТТ РАН, Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д.2*

Целью работы являлась разработка хеморезистивного газового сенсора на основе оксида ванадия. Пленки VOx осаждали методом магнетронного распыления на подложки из оксида алюминия, представляющие собой сенсорные модули. Синтез проводился при температуре 900–1000 К, при давлении $5\times10^{-3}$ Торр и длительности осаждения 12 минут. Для изучения электронной структуры и валентных состояний применялся метод РФЭС с использованием спектрометра Kratos AXIS Ultra DLD. Структурные характеристики исследовались методами рентгенофазового анализа, просвечивающей и растровой электронной микроскопии.

Пленки имели гранулированную структуру с размером зерен в несколько микрон и толщину порядка 40 нм. Микрозондовый анализ показал, что состав близок к $VO_{2.2}$. Дифракционные данные подтверждают наличие моноклинной фазы $VO_2$. Метод РФЭС выявил наличие ванадия в различных валентных состояниях, включая формы с кислородными вакансиями.

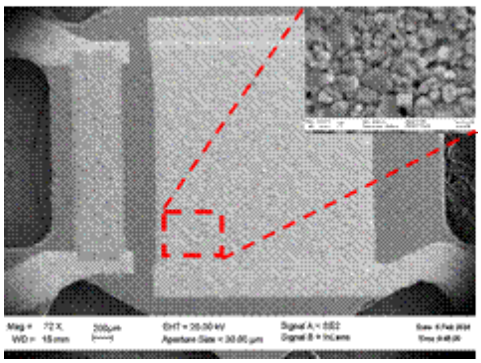


Рис. 1. Общий вид измерительного блока и структура слоя $VO_2$

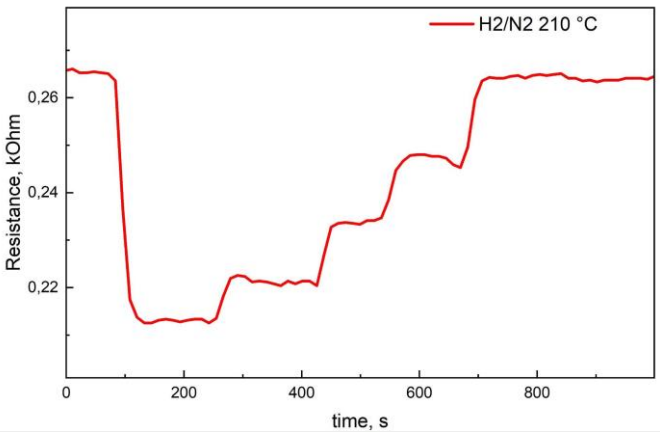



Рис. 2. Сопротивление слоя $VO_2$ при чередовании подачи смеси $N_2/H_2$ с различной концентрацией водорода; температура 210 °C

Для оценки газочувствительности пленки $VO_2$, нанесенные на платформу, размещенную в газовой ячейке. Смесь $N_2/H_2$ подавалась через пробоотборный блок с помощью генератора газовых смесей. Измерения проводились при температурах в диапазоне 170–215 °C. Оптимальной рабочей температурой сенсора является ~210 °C, при которой достигается максимальная чувствительность к водороду. Сенсор демонстрирует высокую селективность: отсутствует отклик на $O_2$, $CO_2$, CO и $H_2O$. Также зафиксирована линейная зависимость отклика от концентрации $H_2$ и высокая воспроизводимость результатов при повторных измерениях. Полученные результаты подтверждают перспективность использования оксида ванадия в качестве чувствительного слоя для водородных сенсоров.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.298

# Индуцированные фазовые переходы в доменной структуре пленки феррита-граната

**Сирюк Ю.А.[1], Безус А.В.[1], Кононенко В.В.[2]**
*[1]ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», г. Донецк, РФ*
*juliasiryuk@gmail.com*
*[2]ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, РФ*

Экспериментально исследованы фазовые переходы, инлуцированые магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, в двух видах решеток цилиндрических магнитных доменов: РЦД$_1$ и РЦД$_2$. Показано влияние структуры доменных границ на фазовые переходы в доменной структуре.

Для исследования выбрана пленка с развитой поверхностью <111>, выращенная методом жидкофазной эпитаксии на гадолиний-галлиевой подложке, состава $(TmBi)_3(FeGa)_5O_{12}$. Фактор качества $Q>5$ при температуре $T=300$ *К*. В работе используются два магнитных поля, перпендикулярных плоскости пленки: 1-монополярное импульсное; 2 – постоянное поле (поле смещения $H_{см}$) двух направлений. Исследуются два вида решеток цилиндрических магнитных доменов (ЦМД). Обе решетки формируются монополярным импульсным полем: РЦД$_1$ - в отсутствии поля смещения; РЦД$_2$ – в присутствии $H_{см}$. При формировании обе решетки являются равновесными. Но при наложении поля смещения РЦД1 оказывается неравновесной, а РЦД$_2$ – равновесной.

При формировании решетки ЦМД монополярным импульсным полем создается сложная доменная граница ЦМД, имеющая большое число вертикальных блоховских линий (ВБЛ). Длина окружности ЦМД ограничивает число ВБЛ. Расстояние между линиями Блоха $S=\pi d/2N$, где $d$ - диаметр ЦМД, N- число оборотов спинов. При $d=(4-15)$ мкм максимальное число $N\leq 90$, что соответствует 180 линиям Блоха [1]. При формировании решеток ЦМД соотношение числа оборотов спинов: $N_1 > N_2$. Под влиянием поля смещения, антипараллельного намагниченности внутри ЦМД ($\uparrow \overrightarrow{H_{см}}, \downarrow \overrightarrow{M_S}$), в решетках происходят фазовые переходы первого рода в новые решетки с большим периодом, меньшим диаметром ЦМД и меньшим числом ВБЛ. При этом соотношение полей фазовых переходов $\left|\overrightarrow{H_{K1}}\right| < \left|\overrightarrow{H_{K2}}\right|$ , т.к. РЦД$_2$ с меньшим числом ВБЛ ($N_1 > N_2$) более устойчива. С увеличением поля смещения таких фазовых переходов наблюдается несколько. Экспериментально наблюдается квантуемость решетки ЦМД, домена, доменной границы и полевой устойчивости решеток ЦМД.Под влиянием поля смещения, сонаправленного с намагниченностью внутри ЦМД ($\uparrow \overrightarrow{H_{см}}, \uparrow \overrightarrow{M_S}$), в решетках происходят фазовые переходы второго рода в сотовую структуру, а каждый ЦМД приобретает форму шестиугольника. При этом ВБЛ распределяются в углах шестиугольного домена. Соотношение числа поворотов спинов и полей фазовых переходов: $N_1 > N_2, \left|\overrightarrow{H_{C1}}\right| < \left|\overrightarrow{H_{C2}}\right|$, т.е. РЦД$_2$ более устойчива. При дальнейшем увеличении поля в СДС$_1$ и СДС$_2$ происходят фазовые переходы первого рода в новую сотовую структуру путем уменьшения числа доменов и увеличением периода. Соотношение числа оборотов спинов и полей фазовых переходов: $N_1 > N_2; \left|\overrightarrow{H_{C1}}\right| > \left|\overrightarrow{H_{C2}}\right|$, т.е. СДС$_1$ более устойчива.

Экспериментально доказано: фазовые переходы в доменной границе вызывают фазовые переходы в доменной структуре и определяют род фазовых переходов.Работа выполнена в рамках государственного задания (регистрационный номер 124012400345-8).

1. *Малоземов А., Слонзуски Дж. Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами, М: Мир, 1982, 382 с.*

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.299

# Особенности поведения магнитных биоклеток при фазовых переходах в доменной структуре пленки феррита-граната

**Сирюк Ю.А[1]., Капшуков Р.А[1]., Кононенко В.В[2]., Легенький Ю.А[1].**
[1]*ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», г. Донецк, РФ*
*juliasiryuk@gmail.com*
[2]*ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, РФ*

Экспериментально исследовано влияние фазовых переходов в доменной структуре, индуцированных магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, на особенности поведения магнитных биоклеток.

Результаты исследования могут быть использованы в разных областях науки: в микроэлектронике и спинтронике – запись и хранение информации; в биологии и медицине – направленная транспортировка биологических частиц, т.е. локальное лечение; в химии – сортировка частиц по их размерам и тд. При создании микроустройств можно совместить указанные области применения.

Для исследования выбрана пленка с развитой поверхностью *<111>*, выращенная методом жидкофазной эпитаксии на гадолиний-галлиевой подложке состава $(YSmLuCa)_3(FeGe)_5O_{12}$. При температуре $T=300\ K$ намагниченность насыщения пленки $258\cdot10^{-4}\ Тл$, фактор качества $Q>5$. В качестве магнитных частиц используются магнитомаркированные ионами $Fe_3O_4$ дрожжевые клетки Saccharomyces cerevisiae. Решетка цилиндрических магнитных доменов (ЦМД) создается монополярным импульсным магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки. На поверхность пленки наносится подготовленная суспензия магнитных биоклеток. Доменная граница генерирует сильный градиент магнитного поля, который оказывает влияние на особенности поведения магнитомаркированых биоклеток. Биоклетки выстраиваются вокруг границ ЦМД. При исследовании транспортировки биоклеток применяются два магнитных поля: 1 – постоянное, перпендикулярное плоскости пленки (поле смещения $H_{см}$), двух направлений; 2-циркулярное поле в плоскости пленки, индукция $B=54\ мТ$, частота $\nu=2\ Гц$. Визуальное наблюдение производится благодаря эффекту Фарадея. Под действием циркулярного поля биоклетки совершают локальное движение вокруг ЦМД. Такое движение наблюдается в присутствии в пределах $H_{см}=(-10+45)\ Э$, т.е. в пределах существования исходной решетки ЦМД. С увеличением поля, антипараллельного намагниченности внутри ЦМД $(\overrightarrow{\uparrow H_{см}}, \overrightarrow{\downarrow M_S})$, при $H_{см}>45\ Э$ в решетке ЦМД происходит фазовый переход первого рода. Биоклетки хаотически распределяются по поверхности пленки. С увеличением поля смещения, сонаправленного с намагниченностью внутри ЦМД $(\overrightarrow{\uparrow H_{см}}, \overrightarrow{\uparrow M_S})$, при $H_{см}>|-10|\ Э$ в решетке ЦМД происходит фазовый переход второго рода. Каждый ЦМД приобретает форму шестиугольника. Биоклетки визуализируют эту структуру. При дальнейшем увеличении поля происходит фазовый переход первого рода с уменьшением числа доменов в новую сотовую структуру с большим периодом. Биоклетки распределяются на доменных границах, а некоторые - внутри домена (т.к. там создается устойчивое равновесное состояние).

Доменные границы очень чувствительны к изменению магнитного поля. В них происходят фазовые переходы, которые вызывают фазовые переходы и в доменной структуре. А поскольку доменная граница генерирует сильный градиент локального магнитного поля, то она притягивает к себе магнитные биоклетки, которые визуализируют картину происходящих фазовых переходов. Работа выполнена в рамках государственного задания (регистрационный номер 124012400345-8).

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.300

# FUNCTIONALIZED MWCNT-ENHANCED NANOCOMPOSITES OF $Fe_2O_3$, NiO, AND PVDF FOR ADVANCED SENSING AND ENERGY APPLICATIONS

**Guluzade S.A.[1], Musayeva N.N.[2].**
[1]*Khazar University, Baku, Azerbaijan,* sgseva92@gmail.com
[2]*Institute of Physics of AMSE, Baku, Azerbaijan, nmusayeva@physics.science.az*

This study explores the enhancement of electrophysical properties in $Fe_2O_3$, NiO, and PVDF-based nanocomposites by incorporating functionalized multiwalled carbon nanotubes (f-MWCNTs). It demonstrates how these nanocomposites are synthesized and how the integration of f-MWCNTs [1] influences their electrical and structural performance. NiO/f-MWCNT composites demonstrated high sensitivity to $NO_2$ gas, exhibiting improved selectivity and long-term stability compared to pure NiO structures. The presence of f-MWCNTs significantly enhanced charge transport and overall sensor performance [2]. Similarly, $Fe_2O_3$/f-MWCNT nanocomposites were synthesized to evaluate the effects of f-MWCNTs on the electrical behavior of $Fe_2O_3$. Electrical characterization showed that the incorporation of f-MWCNTs led to improved electron mobility and reduced interfacial resistance, thereby enhancing conductivity. The strong interaction between $Fe_2O_3$ nanoparticles and f-MWCNTs facilitated effective charge transfer. Structural analyses confirmed the homogeneous distribution of f-MWCNTs within the $Fe_2O_3$ matrix, contributing to improved stability and electrical uniformity. These results indicate the potential of f-MWCNTs in optimizing $Fe_2O_3$-based composites for flexible electronic applications [3].

For piezoelectric applications, PVDF/PZT/f-MWCNT structures fabricated via electrospinning demonstrated a significant increase in β-phase content (up to 96.56%) and enhanced piezoelectric output. The optimized composite containing 0.7 wt% f-MWCNTs achieved a maximum power output of 0.16 μW, exceeding that of the binary PVDF/PZT system (0.12 μW). This improvement is attributed to strong interfacial interactions and improved molecular dipole alignment induced by both f-MWCNTs and the electrospinning process [4].

Characterization techniques including XRD, FTIR, Raman, and SEM confirmed the uniform distribution of f-MWCNTs and their successful incorporation into the host matrices. These findings underscore the multifunctional role of f-MWCNTs in enhancing conductivity, structural integrity, and energy conversion efficiency. Thus, f-MWCNTs offer promising potential for next-generation gas sensing and piezoelectric energy harvesting applications in smart and flexible systems.

As a result, the presence of f-MWCNTs improved conductivity, sensitivity, and stability in gas sensing systems and promoted higher piezoelectric output in polymer-based generators. Structural analyses verified the uniform dispersion of f-MWCNTs and their effective integration into the host matrices. These findings support the potential application of these multifunctional materials in developing high-performance, flexible devices for innovative systems and environmental technologies.

## References

1. Guluzade S., Musayeva N. // DJNB. – 2023. – Vol.18 – № 4. – pp. – 1364-1370.
2. Musayeva N., Hashimov A., Khalilova H., Izzatov B., Guluzade S., Alizade M.// Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2023. – Vol. 31. – № 12. – pp. 1-8.
3. Musayeva N., Hashimov A., Khalilova H., Izzatov B., Guluzade S., Alizade M.// AJP FIZIKA. – 2024. – Vol. XXX. – № 2. – pp. 17-20.
4. Koç M., Tatardar F., Musayeva N., Guluzade S., Sari A., Parali L. // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – Vol. 1003. – pp. 175578.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.301

# Низкоразмерные метаматериалы для терагерцовой фотоники

**Ковалева П.М.[1], Кузнецов К.А.[1,2], Кузнецов П.И.[2], Китаева Г.Х.[1]**
[1]*МГУ им. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*ФИРЭ РАН им. В.А. Котельников, Фрязино, Россия*
kovaleva.pm19@physics.msu.ru

Терагерцовое (ТГц) излучение, охватывающее диапазон 0.1–10 ТГц, обладает уникальными свойствами — высокой проникающей способностью, безопасностью для биологических объектов[1,2] и чувствительностью к колебательным и вращательным модам различных молекул. Эти характеристики определяют его широкую применимость в спектроскопии[3], визуализации и высокоскоростной передаче данных[4]. Однако эффективное использование ТГц-излучения требует компактных и мощных источников, пригодных для интеграции в современные оптоэлектронные системы.

Фотопроводящие антенны (ФПА), возбуждаемые фемтосекундными импульсами, представляют собой перспективное решение[5]. Их эффективность оценивается через коэффициент оптико-терагерцового преобразования, зависящий от временных характеристик межзонной релаксации, поглощения накачки и подвижности носителей заряда. Для повышения этого коэффициента реализуются наноструктурированные просветляющие покрытия, улучшающие локальное усиление оптического поля, а также легирование дополнительными примесями, ускоряющее релаксационные процессы.

Ключевую роль играет материал активного слоя. Использование топологических изоляторов с дираковским спектром обеспечивает высокую подвижность носителей за счёт их малой эффективной массы. Дополнительно, инженерия встроенных электрических полей в гетероструктурах (например, InGaAs/InAlAs) через механические напряжения позволяет модулировать ширину запрещённой зоны, способствуя более эффективной генерации ТГц-излучения.

В антеннах на основе топологических изоляторов $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$ (BSTS) с плазмонными решетками наблюдалось увеличение спектральной плотности и расширение частотного диапазона до 2.5 ТГц, обусловленные высокой подвижностью топологических носителей с почти нулевой эффективной массой. Гетероструктуры InGaAs/InAlAs с внутренними напряжениями демонстрировали усиление генерации в низкочастотной области за счёт встроенных электрических полей. Численные модели подтвердили, что пространственное перераспределение поля и локальное усиление в решетках критично влияет на выходные характеристики. Работа подчёркивает роль электронной структуры и поляризации в процессах генерации.

## Литература

1. Chen, H., Han, J., Wang, D., Zhang, Y., Li, X., Chen, X. // Front. Genet. – 2021. – В. 12.
2. Borwen Y., Chen Ch.-Yu., Yu Ch.-P., Wang P.-H., Lu Ja-Yu. // Opt. Express. – 2018. – Т. 26. - С. 22709-22721.
3. Koch, M., Mittleman, D.M., Ornik, J. и др. // Nat. Rev. Methods Primers. – 2023. – Т. 3. – В. 48.
4. Rong B., // IEEE Wireless Communications. – 2021. – В. 28. – № 5. – С. 8.
5. Burford N. M., El-Shenawee M. O., // Opt. Eng. – 2017. – Т. 56. – В. 1. – С. 010901.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.302

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ β-GA2O3 ИЗ РАСПЛАВА ДЛЯ ПРИБОРОВ СИЛОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

**Бородин В. А.[1,2], Юдин М. В.[1], Мошаров Т. А.[2], Ушницкий Я. И.[1]**
*[1]ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*
*[2]АО "ЭЗАН" Черноголовка, Россия*

Благодаря уникальному сочетанию электрофизических свойств бета-оксид галлия (β-Ga2O3) рассматривается как перспективный материал для силовой электроники и возможная альтернатива в ряде приложений карбиду кремния (SiC) и нитриду галлия (GaN). На основе β-Ga2O3 созданы МОП-транзисторы, диоды Шоттки с более высоким напряжением пробоя по сравнению с приборами на основе привычных полупроводниковых материалов. Кроме того, β-Ga2O3 для производства ультрафиолетовых светодиодов, высокотемпературных датчиков газов и солнечно «слепых» датчиков [1,2]. В отличие от GaN и SiC, кристаллы β-Ga2O3 могут быть выращены из расплава, что при должном развитии технологий выращивания и обработки этого материала позволит снизить себестоимость производства, как подложек оксида галлия, так и приборов на его основе по сравнению с приборами на карбиде кремния [3,4].

АО «ЭЗАН» разработал установки «Ника-Ga2O3», для выращивания монокристаллов оксида галлия методами Чохральского и Степанова. В настоящее время на данном оборудовании проводится ОКР по получению кристаллов методами Чохральского и Степанова.

Процессы получения кристаллов включали следующие стадии:

- таблетирование, отжиг и наплавление исходного сырья Ga2O3 (99,999%) в иридиевый тигель;
- получение прессованием и отжигом заготовок для поликристаллических затравочных кристаллов;
- выращивание кристалла β-Ga2O3 на поликристаллическую затравку методом Чохральского;
- ориентирование монокристаллической части выращенного блочного кристалла, и вырезание из крупных блоков монокристаллических затравок;
- выращивание кристалла β-Ga2O3 на монокристаллическую затравку методом Чохральского;
- выращивание кристалла β-Ga2O3 на монокристаллическую затравку методом Степанова.

Получены первые образцы кристаллов.

Работа выполняется в рамках Соглашения № 020–11–2021–1165 с Минпромторгом России.

## Литература

1. Sharma R. et al. Diffusion of dopants and impurities in β-Ga2O3 // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. American Vacuum Society AVS, 2021. Vol. 39, № 6. P. 060801.

2. Ueda N. et al. Anisotropy of electrical and optical properties in β-Ga2O3 single crystals // Appl Phys Lett. American Institute of PhysicsAIP, 1998. Vol. 71, № 7. P. 933.

3. Reese S. et al. How Much Will Gallium Oxide Power Electronics Cost? // Joule 3, 2019. P. 899.

4. Karen N. Heinselman, Drew Haven, Andriy Zakutayev, and Samantha B. Reese. Projected Cost of Gallium Oxide Wafers from Edge-Defined Film-Fed Crystal //Growth Cryst. Growth Des. 2022, 22, p. 4854−4863.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.303

# Влияние старения перед деформационной обработкой заготовок на механические свойства проволок из сплава Al-0.36Zr

**Комельков А. В., Нохрин А. В., Бобров А. А., Сысоев А. Н., Шишулин Е. О., Морозкина Е. О.**

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Российская Федерация, komelkov@unn.ru*

Целью работы является разработка новых проводниковых алюминиевых сплавов, которые могут быть использованы для изготовления тонких проволок с повышенной термической стабильностью зеренной структуры и механических свойств. Такие проволоки могут найти применение в современной высокотемпературной электротехнике [1, 2].

Одним из перспективных легирующих элементов для создания термостойких проводниковых алюминиевых сплавов является Zr [3, 4]. В работе исследовали свойства тонкой проволоки (∅ 0.3 мм) из сплава Al-0.36Zr. Сплав изготовлен методом литья с индукционным нагревом и перемешиванием, проволока получена методом ротационной ковки с последующим холодным волочением. Для двух образцов проволоки перед деформационной обработкой выполнено старение при 500°C с различными временами выдержки. Проведены исследования микроструктуры, микротвердости, удельного электросопротивления (УЭС) проволоки в состоянии после волочения и после испытаний на термостойкость по ГОСТ Р МЭК 62004-2014. УЭС измерено при температурах 25, 100, 200, 300 °C. Выполнены испытания проволоки на растяжение при комнатной и повышенных температурах.

Проволока в исходном состоянии имеет предел прочности ($\sigma_B$) более 200 МПа, УЭС - менее 3.4 мкОм·см. При повышенных температурах испытаний предел прочности и пластичность проволоки резко снижаются, УЭС возрастает. Анализ полученных результатов показывает, что предварительное старение заготовок перед изготовлением проволоки приводит к снижению $\sigma_B$ до 160 МПа, и небольшому увеличению пластичности в состоянии после волочения, при этом УЭС снижается на ~ 0.5 мкОм·см. Снижение УЭС обусловлено распадом твердого раствора Al-Zr в ходе предварительного старения. Снижение прочности, вероятно, связано с увеличением размера первичных частиц $Al_3Zr$ при предварительном старение сплава. Такие крупные некогерентные частицы служат концентраторами напряжений, так как на них происходит накопление дислокационных петель при пластической деформации материала.

## Литература

1. Телешов В.В., Захаров В.В., Запольская В.В. Развитие алюминиевых сплавов для термостойких проводов с повышенной прочностью и высокой удельной электропроводимостью // Технология легких сплавов. – 2018. – №1. – С. 15-27.
2. Yang C., Masquellier N., Gandiolle C., Sauvage X. Multifunctional properties of composition graded Al wires // Scripta Materialia. – 2020. – Vol. 189. – P. 21-24.
3. Захаров В. В. О совместном легировании алюминиевых сплавов скандием и цирконием // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2014. – № 6. – С. 3-8.
4. Belov N., Murashkin M., Korotkova N., Akopyan T., Timofeev V. Structure and properties of Al-0.6wt.%Zr wire alloy manufactured by direct drawing of electromagnetically cast wire rod // Metals. – 2020. – Vol. 10. – Iss. 6. – C. 769.

DOI: 10.24412/cl-37349-FKS-4.304

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И AB INITIO РАСЧЕТЫ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ СИСТЕМЫ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $TlGa_xIn_{1-x}Te_2$

**А.И. Наджафов[1], Г.Р. Махмудова[1], З.А. Джахангирли[1,2], В.Б. Алиева[1], З.И. Бадалова[1], Т.Г. Мамедов[1], Н.А. Абдуллаев[1,2]**

[1]*Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*

[2]*Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

E-mail: abnadir@mail.ru

Полупроводниковые соединения $TlGaTe_2$ и $TlInTe_2$ и их структурные аналоги стали в последнее время объектами интенсивных исследований в связи с тем, что, наряду с перспективами их практического применения в оптоэлектронике и фотовольтаике [1] , в них обнаружены ультранизкие значения решеточной теплопроводности [2]. Эти соединения принадлежат к одномерным 1D материалам со структурой типа TlSe и характеризуются центросимметричной тетрагональной структурой с пространственной группой симметрии $D_{4h}^{18}$ ($I4/mcm$). В настоящей работе приводятся результаты экспериментального и теоретического изучения из первых принципов Рамановских спектров кристаллов твёрдых растворов $TlGa_xIn_{1-x}Te_2$.

Монокристаллы исследуемых твердых растворов с интервалом 20 мол.% были получены методом направленной кристаллизации. Определены концентрационные зависимости параметров *a, c* и объема решетки *V.* Из экспериментальных исследований Рамановских спектров в кристаллах твёрдых растворов $TlGa_xIn_{1-x}Te_2$ выявлены частоты Раман-активных мод, идентифицированы сами моды, выявлен характер перестройки фононных спектров. Показано, что мода $^2E_g$ проявляет одномодовую перестройку фононного спектра при изменении состава твёрдых растворов, а моды $A_{1g}$ и $^3E_g$ - двухмодовую перестройку фононного спектра.

Из расчётов из первых принципов определены вклады колебаний различных атомов в плотность фононных состояний (PDOS), изучена дисперсия фононных мод, рассчитаны частоты оптических мод для различных составов $TlGa_xIn_{1-x}Te_2$. Показано, что колебания тяжёлых атомов Tl вносят вклад в плотность фононных состояний в основном в области низких частот (<80 $см^{-1}$), а вклад в моду $A_{1g}$ (120-130 $см^{-1}$) в основном вносят колебания атомов Te. Получено хорошее согласие экспериментально полученных и рассчитанных теоретически из первых принципов результатов.

## Литература

1. T. Helaimia, S. Maabed, A. Benmakhlouf, A. Bouhemadou , F. Fares, M. Bouchenafa, A. Bentabet and S. Bin-Omran, Physica Scripta 99 (4), 045931 (2024).

2. M. Wu, Enamullah, and Li Huang, Phys. Rev. B 100, 075207 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevB.100.075207

**Научное издание**

**Физика конденсированных состояний**

Сборник тезисов IV Международной конференции
«Физика конденсированных состояний» ФКС-2025

(2 – 6 июня 2025 г., Черноголовка)

**Публикуется в авторской редакции**

ISBN 978-5-6053681-0-6

