Физика конденсированных состояний

ТЕЗИСЫ

II Международной конференции ФКС-2021,

посвященной 90-летию со дня рождения академика

Ю. А. Осипьяна (1931-2008)

Черноголовка, 31 мая -4 июня 2021 г

Российская Академия наук
Министерство науки и высшего образования РФ
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред.
Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна
Научный центр РАН в Черноголовке

Вторая Международная Конференция

«Физика конденсированных состояний»,

посвященной 90-летию со дня рождения академика
Ю. А. Осипьяна (1931-2008)

Под редакцией д.ф-м.н. Б.Б.Страумала

II International conference
“Physics of condensed states”

Черноголовка, 31 мая – 4 июня 2021 г.

С Б О Р Н И К Т Е З И С О В

Черноголовка
2021

Физика конденсированных состояний: сб. тезисов II Международной конференции (31 мая – 4 июня 2021 года, Черноголовка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черноголовка, 396 с. – ISBN 978-5-6045956-0-2 KFS-2 (Осипьян).

ISBN 978-5-6045956-0-2

© Российская Академия наук, 2021
© Страумал Б.Б. (редактор), 2021

Программный комитет Конференции:

Левченко А.А. – д.ф.м.н., директор ИФТТ РАН, председатель
Кведер В.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Кукушкин И.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Сурис Р.А. – академик РАН, ФТИ им. Иоффе РАН
Тимофеев В.Б. – академик РАН, ИФТТ РАН
Долгополов В.Т. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Бородин В.А. – чл.-корр. РАН, ЭЗАН
Карпов М.И. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Абросимова Г.Е. – д.ф.-м.н., научный редактор журнала «Поверхность»
Глезер А.М. – д.ф.-м.н., директор ИМФМ им. Г. В. Курдюмова ЦНИИчермет
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
Волошин А.Э. – проф., ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН
Девятов Э.В. – проф. РАН, ИФТТ РАН
Егоров А.В. – НИИСК - КБОМ
Истомина Н.Л. – д.ф.м.н., ОФН РАН
Левин Ю.Б. – д.т.н., директор «Электронтех» РАН
Рощупкин Д.В. – проф., директор ИПТМ РАН
Рязанов В.В. – проф., ИФТТ РАН
Сафонов О.Г. – проф. РАН, директор ИЭМ РАН
Страумал Б.Б. – проф., председатель НЦЧ РАН

Организационный комитет Конференции:

Левченко А.А. – ИФТТ РАН, председатель
Девятов Э.В. – ИФТТ РАН, зам. председателя
Страумал Б.Б. – НЦЧ РАН, зам. председателя
Колесников Н.Н. – ИФТТ РАН
Терещенко А.Н. – ИФТТ РАН, уч. секретарь
Паленова А.Ю. – ИФТТ РАН
Шалынин А.И. – ИФТТ РАН
Муравьев В.М. – ИФТТ РАН
Страумал А.Б. – ИФТТ РАН
Шевчун А.Ф. – ИФТТ РАН
Поварова Л.И. – ИФТТ РАН
Симонов С.В. – ИФТТ РАН

Устные доклады

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.240

ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДА НА КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ TIO2

[1]Аверкиев И. К., [1]Бакиева О. Р., [2]Хаметова Э.Ф.
[1]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
[2]Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
E–mail:averkiev1997@mail.ru

Существует проблема накопления углерода на поверхности образца при использовании для исследований электронного пучка. Поверхностный углерод дает заметный вклад в спектры, при этом отклики перекрываются с основным составом образца затрудняя анализ спектров. На данный момент основным инструментом для очистки поверхности является ионное травление, которое позволяет избавиться от поверхностного углерода. Однако существенным недостатком ионного травления является его влияние на структуру и химический состав поверхности.

В настоящей работе проведено исследование локальной атомной структуры тестового объекта – оксида титана (TiO_2, анатаз). Методом просвечивающей электронной спектроскопии получены спектры энергетических потерь электронов. Проведен анализ протяженной тонкой структуры (ExEELFS – Extended Electron Energy Loss Fine Structure). При анализе экспериментальных данных было выяснено, что кроме титана и кислорода, существенный вклад дает поверхностный углерод, который накапливается в течении эксперимента под воздействием электронного пучка. Было проведено численное моделирование спектра энергетических потерь электронов в области 520-620 эВ. Предложена методика обработки спектров протяженных тонких структур энергетических потерь электронов с учетом вклада поверхностного углерода и получены параметры локального атомного окружения кислорода и титана – длины химической связи O-O, Ti-O, Ti-Ti, соответствующие координационные числа и фактор Дебая-Валлера.

Предложенная методика обработки спектров с учетом вклада поверхностного углерода, позволяет проводить исследования локальной атомной структуры, без дополнительного ионного травления поверхности образцов.

Работа выполнена по плану НИР №121030100002-0.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.241

КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ЭМИССИОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ СВИНЦА

Аладышкин А.Ю.[(1)], Божко С.И.[(2)], Путилов А.В.[(1)], Уставщиков С.С.[(1)]

[(1)] *Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия*
[(2)] *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*
Электронная почта: aladyshkin@ipmras.ru

В работе методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и спектроскопии (СТС) исследованы электрофизические свойства тонких квазидвумерных островков Pb, выращенных на реконструированной поверхности Si(111)7×7, при температуре 78 К в режимах заданной высоты иглы z над поверхностью образца, а также заданного туннельного тока I и переменной высоты.

Для Pb террас различной высоты построена диаграмма V_n–N, где $|e|V_n$ – энергия n-го размерного резонанса на зависимости дифференциальной туннельной проводимости dI/dV от напряжения V, N – номинальная толщина островка над уровнем смачивающего слоя. Получены оценки скорости и импульса Ферми, эффективной массы электронов и толщины смачивающего слоя, а также восстановить энергетический спектр $E(k)$ в направлении [111]. Показано, что средняя величина дифференциальной туннельной проводимости зависит от локальной толщины плёнки, что позволяет проводить визуализацию террас Pb(111) различной чётности числа слоёв при малых напряжениях (до 2 В).

Возможность синхронного получения топографических изображений и карт проводимости на заданной энергии позволяет исследовать пространственную зависимость электронных свойств Pb плёнок вблизи дефектов (например, монатомных ступеней подложки, скрытых частей дислокационных петель и инородных включений). Обнаруженные крупномасштабные неоднородности туннельной проводимости, проявляющиеся в плавном и согласованном изменении энергий уровней размерного квантования, могут указывать на внутренние напряжения в деформированных Pb плёнках.

Для плёнок Pb значительной толщины (порядка 50 монослоёв) исследован спектр эмиссионных резонансов (т.е. положений максимумов на зависимостях dI/dV и dz/dV от V в диапазоне напряжений от 4 до 10 В). Показано, что спектр эмиссионных резонансов не зависит от локальной толщины плёнки, но зависит от измерительного тока и формы иглы. С помощью квазиклассического соотношения Бора-Зоммерфельда для частицы в треугольной яме получена формула $|e|V_n=W + \mathrm{const}\cdot n^{2/3}$ для оценки положения высших эмиссионных резонансов. Для плёнок Pb(111) с террасами квантованной высоты получена оценка локальной работы выхода (W=3.8±0.1 эВ), которая согласуется с результатами микроскопических расчётов. Показано, что оценка работы выхода является состоятельной, поскольку величина W не зависит от локальной толщины плёнки и формы иглы.

Благодарности.
В работе использовано оборудование ЦКП ИФМ РАН «Физика и технология микро- и наноструктур». Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00528).

1. Уставщиков С.С., Путилов А.В., Аладышкин А.Ю. // Письма в ЖЭТФ. – 2017. – Т. 106. – № 8. – С. 476-482.
2. Путилов А.В., Уставщиков С.С., Божко С.И. и Аладышкин А.Ю. // Письма в ЖЭТФ. – Т. 109. – № 11. – С. 789-796.
3. Aladyshkin A. Yu. // J. Phys.: Condens. Matt. – 2020. – V. 32. – № 435001.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.242

ФАЗОВЫЙ СДВИГ МАГНИТООСЦИЛЛЯЦИЙ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ ТЕЛЛУРИДА РТУТИ С ИНВЕРТИРОВАННОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРОЙ

Боголюбский А.С., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г., Якунин М.В., Дворецкий С.А.*, Михайлов Н.Н.*

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия,
**Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*
bogolubskiy@imp.uran.ru

В квантовых ямах HgTe/(Cd,Hg)Te было продемонстрировано существование различных электронных фаз. Варьируя ширину квантовой ямы (КЯ), можно получить гетероструктуры с зонным спектром, аналогичным спектру однослойного графена, а также двумерные (2D) топологические изоляторы (TI) с краевыми проводящими каналами. Краевые состояния в TI могут быть описаны уравнением Дирака с линейным (бесщелевым) законом дисперсии дираковских фермионов.

Дираковские фермионы имеют безмассовую природу с нетривиальной фазой (фазой Берри), приобретаемой циклотронной орбитой из-за вырождения в точке Дирака. В транспортных экспериментах на системах с дираковским спектром (монослойный графен, КЯ HgTe с бесщелевым спектром, краевые двумерные состояния TI) наличие фазы Берри проявляется в фазовом сдвиге на π магнитоосцилляций или в смещенных положениях плато квантового эффекта Холла [1].

В данной работе представлено исследование осцилляций Шубникова - де Гааза (ШдГ) в квантовой яме HgTe шириной 20.3 нм, выращенной на подложке (013) GaAs, симметрично модулированно легированной индием (In) с обеих сторон квантовой ямы. Обнаружен аномальный сдвиг на π в фазе магнитоосцилляций в этой топологически тривиальной 2D системе.

Показано, что аномальный фазовый сдвиг обусловлен специфическим соотношением зонных параметров (параметров Латтинжера) для зоны Γ_8 теллурида ртути с симметрией p-типа [2-4] и не связан с наличием фазы Берри, присущей топологически нетривиальным системам [1]. Особенность исследуемой системы состоит в том, что формально подуровень H1 принадлежит ветви тяжелых дырок зоны Γ_8 с $J_z = \pm 3/2$, где J - оператор полного углового момента, однако в подзоне H1 реализуется проводимость электронного типа. Именно большое значение z -компоненты полного углового момента приводит к необычной ситуации, когда зеемановское расщепление становится больше циклотронной энергии. В схеме уровней Ландау это проявляется в наличии «лишнего», невырожденного по спину, уровня (при N = 0) и, как следствие, к сдвигу на π фазы осцилляций ШдГ.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. A.Yu. Kuntsevich, A.V. Shupletsov, G.M. Minkov // Phys. Rev. B. – 2018 – T. 97. – C. 195431.
2. M.I. Dyakonov and A.V. Khaetskii // JETP – 1982 – T. 55.– C. 917.
3. L.G. Gerchikov and A. Subashiev // Phys. Status Solidi B – 1990. – T. 160.– C. 443.
4. E.G. Novik, et al // Phys. Rev. B. – 2005. –T. 72. – C. 035321.

10.26201/ISSP.2020/FKS-2.243

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХРЕШЕТОК GAAS/ALAS МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ, РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Волков Ю.О.[1]*, Нуждин А.Д.[1], Рощин Б.С.[1], Пирогов Е. В.[2], Асадчиков В.Е.[1], Горай Л.И.[2,3], Буравлёв А.Д.[4]

[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

[2] *Академический Университет им. Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

[3] *Институт Аналитического Приборостроения, Санкт-Петербург, Россия*

[4] *Университет при МПА ЕврАзЭС, Санкт-Петербург, Россия*

* volkov.y@crys.ras.ru

Периодические многослойные сверхрешётки на основе гетероструктур типа A3B5 представляют существенный интерес для разработки терагерцовых лазерных генераторов [1]. Синтез таких структур методом молекулярно-пучковой эпитаксии требует прецизионного контроля толщин слоёв, их состава и глубины межслойной диффузии на субатомном уровне [2].

В работе представлено исследование серии многослойных структур Al0.3Ga0.7As/GaAs различной степени легирования с количеством периодов от 30 до 400, выращенных на подложках GaAs (100). Структурные параметры слоёв были определены сочетанием неразрушающих методов рентгеновской дифрактометрии, высокоразрешающей рефлектометрии скользящего падения и рентгенофлуоресцен-ции.

Дифракционные кривые были измерены при помощи лабораторного дифрактометра PANanalytical X'Pert Pro (АУ РАН) на излучении CuKα1-линии (длина волны λ = 1.5405 Å) с использованием четырёхкристального монохроматора Ge (220) и однощелевой коллимационной системы (ширина щели ω = 1 мм). Съёмка была проведена в режиме сканирования θ-2θ в окрестностях (004) и (002) GaAs-рефлексов в геометрии θ-2θ параллельного пучка. Расчёт параметров периодов структур был проведён во встроенной программе «Epitaxy and Smoothfit». Рефлектометрические данные были независимо получены на дифрактометре PANanalytical X'Pert Pro, а также на лабораторном дифрактометре ДРШ с подвижной системой источник-детектор (ФНИЦ КиФ РАН) [3] на излучении AgKα1-линии (длина волны λ = 0.5594 Å) с использованием однокристального монохроматора Si (111) и трёхщелевой коллимационной системы, обеспечивающей линейную ширину пучка d ≈ 0.55 мм. Расчёт толщин периодов и шероховатостей структур был проведён в программе Multifitting [4]. Рентгенофлуоресцентные данные были получены на дифрактометре ДРШ одновременно с измерениями рефлектометрии (детектор Amptek X-123SDD).

Параметры структуры сверхрешёток, рассчитанные по измеренным кривым дифракции и зеркального отражения на различных длинах волн, совпадают с оценочными значениями по параметрам синтеза в пределах 5%; при этом относи-тельная неоднородность толщин периодов по глубине, согласно расчётной оценке, не превышает 0.3%. В то же время анализ кривых флуоресценции галлия и мышьяка свидетельствует о снижении концентрации As в приповерхностной области, предпо-ложительно связанной со снижением потока материала в процессе синтеза.

[1] И.В. Алтухов, С.В. Дижур, М. С. Каган и др. // Письма в ЖЭТФ **103**, 122 (2016).
[2] L. I. Goray, E. V. Pirogov, M. S. Sobolev et al. // Semiconductors **53**, 1910 (2019).
[3] В.Е. Асадчиков, В.Г. Бабак, А.В. Бузмаков и др. // Приб. Техн. Экспер. **3**, 99 (2005).
[4] M. Svechnikov // J. Appl. Cryst. **53**, 1-9 (2020).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.244

PHASE MULTISTABILITY AS A CAUSE OF TOPOLOGICAL EXCITATIONS IN A DRIVEN POLARITON FLUID

S. S. Gavrilov

Osipyan Institute of Solid State Physics RAS,142432, Chernogolovka, Russia gavr_ss@issp.ac.ru

Cavity polaritons are mixed states of excitons and photons in layered heterostructures. Under resonant optical driving, they form macroscopically coherent states which can be regarded as highly nonequilibrium analogues of Bose-Einstein condensates. The repulsive interaction of polaritons involves a significant blueshift of their resonance energy with growing amplitude, resulting in optical bistability within a certain range of pump frequencies and intensities. The spin dependence of the interaction manifests itself in the so-called polarization multistability [1], a situation when several coherent states with different amplitudes and/or polarizations are equally feasible under the same driving conditions. Sharp switches between the alternative states can be triggered by varying the pump in the vicinity of critical points [2].

Here, we consider a qualitatively novel kind of multistability. When opposite spin components of polaritons are linearly coupled (because of a lateral mechanical stress, magnetic field, etc.), the spin symmetry of the system is known to break down spontaneously in a finite range of amplitudes [3,4]. Then a pair of alternative states which are feasible under given spin-symmetric pumping can have equal amplitudes and arbitrarily close polarizations but, at the same time, bear opposite phases. Hence, the two alternative domains annihilate each other in space at their interface areas where the wave function experiences phase reversal, which gives rise to such a “topological” sort of excitations as quantized vortices (in a two-dimensional polariton system) or dark solitons (in a one-dimensional system) [5].

Depending on parameters, dark and gray solitons which emerge owing to the phase multistability can either run in space freely (as in Ref. [5]) or sit at a spontaneously chosen location. In the latter case, these topological defects act to robustly separate different polarization domains from each other. Thus, the state of a microcavity can be switched back and forth locally, e.g., using appropriately focused laser pulses. As a result, such a microcavity operates as a network of micron-sized memory cells whose phases are individually controlled.

Acknowledgments. The work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 21-12-00368.

1. N. A. Gippius *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98,** 236401 (2007)
2. T. K. Paraïso *et al.*, Nat. Mater. **9,** 655 (2010)
3. S. S. Gavrilov, Phys. Rev. Lett. **120,** 033901 (2018)
4. S. S. Gavrilov, Phys. Usp. **63,** 123 (2020)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.245

РАЗРАБОТКА ДИЗАЙНА СВЕРХМНОГОПЕРИОДНЫХ ИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР ТГЦ ДИАПАЗОНА, ВЫРАЩИВАЕМЫХ МЕТОДОМ МПЭ

Герчиков Л.Г.[1,2], Горай Л.И.[1,3,*], Дашков А.С.[1], Буравлёв А.Д.[3,4,5]

[1] *Академический Университет им. Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

[2] *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

[3] *Институт Аналитического Приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия*

[4] *Университет при МПА ЕврАзЭС, Санкт-Петербург, Россия*

[5] *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

* lig@pcgrate.com

Одним из наиболее перспективных подходов для создания перестраиваемых компактных источников терагерцового излучения является использование полупроводниковых приборов со сверхрешетками (СР), например, квантово-каскадных лазеров или гетероструктур со множественными сильно-связанными квантовыми ямами (КЯ) [1]. В данном исследовании разработка дизайна сверхмногопериодных полупроводниковых A3B5 структур для ТГц диапазона рассматривается в связи с созданием перестраиваемых лазерных источников, выращиваемых методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) и работающих при комнатной температуре за счет образования соответствующих энергетических уровней Ванье-Штарка и последовательного туннелирования носителей через несколько периодов при условии относительной прозрачности барьеров [2].

Исследуемый в настоящей работе тип структуры включает в себя СР, состоящие из 10–1000 периодов 10-нм слоев GaAs и 2-нм слоев $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$, легированных примесью n-типа (Si) заданной концентраций в диапазоне $\$10^{16}$–$10^{18}$ см$^{-3}$. Ранее нами были предложены метод расчета электронных спектров A3B5 СР, а также методика высокоточной характеризации морфологии и состава подобных структур [3,4], состоящая из согласованного применения нового метода глубокой рентгеновской рефлектометрии, основанного на строгом методе расчета, и известных методов высокоразрешающей рентгеновской рефлектометрии и дифрактометрии и просвечивющей электронной микроскопии. Для рассматриваемой конструкции источника были рассчитаны коэффициент усиления и уровень оптических потерь.

Генерация ТГц излучения происходит при оптических резонансных переходах между туннельно связанными состояниями электрона в СР. Проведенные численные расчеты показали наличие сильного максимума оптического матричного элемента этих переходов в области резонанса. Этот эффект обусловлен сильным перемешиванием туннельно связанных электронных состояний в области резонанса, что было продемонстрировано в работе в рамках двухуровневой модели. Двухуровневая модель была также использована для расчета инверсной заселенности электронных уровней и коэффициента усиления ТГц излучения. Проведенные расчеты коэффициента усиления и оптических потерь позволили определить параметры источника, при которых возможна генерация.

В качестве источника ТГц излучения предложена структура, состоящая из 400-х периодов СР и уровнем легирования активной области ~0^{17} см$^{-3}$. Данная структура также позволяет производить перестройку длины волны генерируемого излучения.

[1] R.K. Kohler, A. Tredicucci, F. Beltram et al. // Nature **417**, 156 (2002).
[2] A.A. Andronov, A.V. Ikonnikov, K.V. Maremianin et al. // Semiconductors **52**, 431 (2018).
[3] L.I. Goray, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. **53**, 455103 (2020).
[4] Л.И. Горай, Е.В. Пирогов, М.С. Соболев и др. // ЖТФ **90**, 1906 (2020).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.246

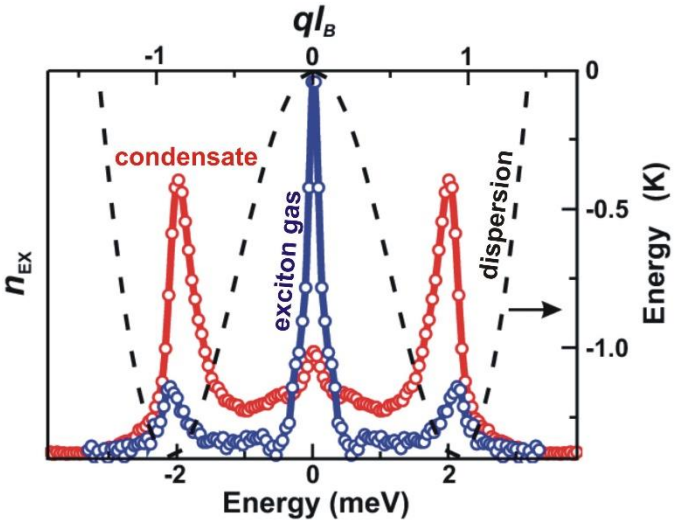
МАГНИТОЭКСИТОННЫЙ КОНДЕНСАТ В ХОЛЛОВСКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Горбунов А.В., Тимофеев В.Б.

Институт физики твердого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия gorbunov@issp.ac.ru

Триплетные циклотронные магнитоэкситоны (ТЦМЭ) в холловском изоляторе являются композитными бозонами со спином 1. При температуре $T < 1$ K и концентрации ТЦМЭ n_{ex} ~ (1-10)% от плотности квантов магнитного потока в холловском изоляторе (электронный фактор заполнения $\nu = 2$) образуется качественно новая фаза – магнитоэкситонный конденсат [1]. Это состояние является экспериментальным примером конденсации композитных бозонов в пространстве обобщенных импульсов – величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [2]. Конденсат способен “растекаться” из области фотовозбуждения в “объем” холловского изолятора на макроскопические расстояния. Прямые эксперименты с высококачественными GaAs/AlGaAs гетероструктурами показали, что транспортная длина ТЦМЭ в конденсированном состоянии, по крайней мере, на три порядка больше, чем длина диффузии магнитоэкситонов в газовой фазе [3]. При этом скорость разбегания экситонов из пятна накачки $\geq 10^3$ см/с [4].

Из-за невозможности одновременно удовлетворить условиям сохранения энергии и импульса в разреженном газе триплетных магнитоэкситонов не происходит полной термализации. Только по достижении некоторой критической экситонной плотности релаксация в нижайшее энергетическое состояние становится возможной за счет экситон-экситонного рассеяния.



Вследствие сверхдлинных времен термализации (вплоть до 1 мс) ансамбль ТЦМЭ является существенно неравновесным. Он состоит из надконденсатных экситонов с обобщенными импульсами $q \approx 0$ и экситонов в энергетическом минимуме, с импульсами порядка обратной магнитной длины, $q \sim 1/l_B$ (см. рисунок). Доказано экспериментально [5], что перенос магнитоэкситонной плотности на большие расстояния осуществляется не всеми ТЦМЭ, а только теми, импульс которых близок к обратной магнитной длине, $1/l_B \sim 10^6$ см$^{-1}$. Магнитоэкситонный конденсат формируется именно из этих экситонов.

1. Kulik L.V., Gorbunov A.V., Zhuravlev A.S., Timofeev V.B., Dickmann S., Kukushkin I.V. // Scientific Reports. – 2015. – V. 4. – P. 10354.
2. Avron J.E., Herbst I.W., Simon B. // Annals of Physics. – 1978. – V. 114. – P. 431.
3. Kulik L.V., Kuznetsov V.A., Zhuravlev A.S., Gorbunov A.V., Solovyev V.V., Timofeev V.B., Kukushkin I.V., Schmult S. // Scientific Reports. – 2018. – V. 8. – P. 10948.
4. Gorbunov A.V., Kuznetsov V.A., Zhuravlev A.S., Kulik L.V., Dickmann S., Timofeev V.B. // Annalen der Physik. – 2019. – V. 531. – P. 1800443.
5. Журавлев А.С., Кузнецов В.А., Горбунов А.В., Кулик Л.В., Тимофеев В.Б., Кукушкин

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.247

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА ГАЗОВОЙ СМЕСИ В ОБЪЁМЕ ВАКУУМНОЙ КАМЕРЫ ПРИ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ ТРАВЛЕНИИ

Бугорков К.Н., Грачев И. Ю., Сагателян Г. Р.

МГТУ им. Н. Э. Баумана (НИУ), г. Москва, Россия, soweo8@gmail.com

Конструкции ряда деталей современного приборостроения, таких как пластины маятниковых гироскопов, представляющих собой МЭМС, а также голограммные и дифракционные оптические элементы (ДОЭ-ГОЭ), основаны на создании функционального рельефа рабочих поверхностей. Для создания такого рельефа применяют плазмохимическое травление (ПХТ), особенности которого применительно к оптическому стеклу в настоящее время изучены недостаточно, что обусловлено сложностью физических и химических процессов, одновременно протекающих на обрабатываемой поверхности. Обычно операции ПХТ производят с ионным ассистированием, обеспечиваемым созданием напряжения автосмещения на столике, несущем обрабатываемую деталь. Однако при необходимости одновременного формирования функционального рельефа на двух оппозитных плоскостях деталей в форме плоскопараллельных пластин создание автосмещения невозможно, а конструкции вакуумных камер представляют собой проточные реакторы.

Процесс ПХТ при этом реализуется при давлении 50 Па, которому соответствует длина свободного пробега молекул химически активного компонента, в качестве которого нами рассматривался элегаз (SF_6), составляет десятые доли миллиметра. В этом случае транспортировка химически активных частиц (ХАЧ) поверхности, а также продуктов химических реакций происходит по механизму диффузии.

Моделирование процесса диффузии для различных схем реакторов осуществляли в программе Matlab при помощи приложения, работающего с уравнениями в частных производных PDE Toolbox. Производили построение геометрии камер, определяли граничные условия задавали участвующие в уравнении диффузии параметры, определяемые режимами технологической операции. В результате получили распределение потоков и концентраций ХАЧ в объёмах вакуумных камер при вертикальном и горизонтальном расположении деталей.

По результатам математического моделирования осуществлена модернизация конструкции установки RIE-300 [1] в рамках замены в НИИ ПМ им. акад. В.И. Кузнецова жидкостного травления плавиковой кислотой пластин из плавленого кварца на ПХТ. Дополнительное рассмотрение особенностей формируемого плоским ВЧ индуктором электромагнитного поля [2] позволило разработать конструкцию средств технологического оснащения, обеспечивающих групповую обработку кварцевых пластин, позволяющую освоить их серийное производство.

Список литературы.

1. Грачев И.Ю., Сагателян Г.Р., Бугорков К.Н. Анализ распределения активного газа в реакторе при плазмохимическом травлении // Естественные и технические науки. 2018. № 4 (118). С. 206–207.
2. Расчет электромагнитного поля плоского индуктора установки плазмохимического травления / Г.Р. Сагателян [и др.] // Нанотехнологии: разработка, применение — XXI век. – 2020. – №1. – С. 29–42.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.248

ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СТРУКТУРАХ InGaAs/GaAs

Гудина С.В., Савельев А.П., Арапов Ю.Г., Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г., Якунин М.В.

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия, svpopova@imp.uran.ru

В полупроводниковых гетероструктурах InGaAs/GaAs с одиночной и двойной квантовыми ямами (КЯ) в интервале температур, $T \cong (10 \div 70)$ К, обнаружен диэлектрический характер температурной зависимости проводимости, $d\sigma(T))/dT > 0$, обусловленный существенным (на 20 – 40 %), линейным по T, ростом подвижности носителей заряда [1]. Мы полагаем, что такое поведение определяется интерференционным вкладом в проводимость, $\delta\sigma^{ee}(T)$, от модифицированного беспорядком электрон-электронного взаимодействия в баллистическом режиме, $k_B T\tau/\hbar >> 1$ (τ - время свободного пробега, $\hbar$ - постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана) [2]. Показано, что значение концентрации носителей заряда ($n \lesseqgtr N_{cross}$) для конкретного вещества однозначно определяет тип температурной зависимости $\delta\sigma^{ee}(T)$: металлический ход при преобладании вклада Хартри и диэлектрический при преобладании обменной части электрон-электронного взаимодействия. Это подтверждается наблюдением перехода диэлектрик-металл для подзон размерного квантования в двойных туннельно-связанных КЯ: $n > N_{cross}$ для подзоны симметричных и $n < N_{cross}$ для подзоны антисимметричных состояний. Получено экспериментальное подтверждение теоретических представлений о существенной роли когерентного рассеяния электронов на осцилляциях Фриделя в процессах переноса носителей заряда в 2D системах.

Зависимости сопротивления от параллельного плоскости структуры магнитного поля в образцах n-InGaAs/GaAs с двойными сильно-связанными КЯ ($\Delta_{SAS} \cong 3.0$ мэВ), измеренные при фиксированных температурах $1.8 \le T \le 50$ К, проанализированы в рамках подхода [3], что позволило получить зависимость квантового времени жизни от температуры $\tau_q(T)$. Зависимость $\tau_q(T)$ оказалась немонотонной с минимумом вблизи $k_B T/E_F = 0.1$ (E_F – энергия Ферми). Увеличение квантового времени жизни $\tau_q(T)$ при $k_B T/E_F > 0.1$ связано с вкладом от электрон-электронного взаимодействия в баллистическом режиме [1, 2]: $\Delta\tau_{ee}^{int}(T) \propto \delta\sigma^{ee}(T) \propto T$, $\tau_q(T) = \tau_q^0(T) + \Delta\tau_q^{int}(T)$. Оставшаяся после вычитания вклада $\Delta\tau_{ee}^{int}$ зависимость $\tau_q^0(T)$, содержащая вклады от различных механизмов уширения уровня, таких как упругое рассеяние на примесях и неупругое рассеяние электронов на электронах, $\frac{1}{\tau_q^0} = \frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_{ee}}$, хорошо описывается выражением [4], соответствующим пределу «грязного» металла $k_B T\tau/\hbar << 1$ с учетом динамически экранированного кулоновского взаимодействия.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» при поддержке РФФИ и Свердловской области 20-42-660004 р_а.

1. Gudina S.V., Arapov Yu.G., Neverov V.N., *et al.* // Phys.E. – 2019 – v. **113**. – P. 14-20.
2. Zala G., Narozhny B.N., Aleiner I.L. // Phys. Rev. B. – 2001. – v. 64. – P. 214204.
3. Berk Y., Kamenev A., Palevski A., *et al.* // Phys. Rev. B. – 1995. – v. 51. – N 4. – P. 2604.
4. Fukuyama H. and Abrahams E. // Phys. Rev. B. – 1983. – v. 27. – P. 5976.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.249

ЗАРОЖДЕНИЕ И КОАЛЕСЦЕНЦИЯ ИЗОТРОПНЫХ КАПЕЛЬ В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ. РОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ

Долганов П.В., Зверев А.С., Спириденко Н.А., Бакланова К.Д., Долганов В.К.

Институт физики твёрдого тела Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия, pauldol@issp.ac.ru

Исследованы особенности фазового перехода первого рода между жидким кристаллом и изотропной жидкостью в тонких плоских ячейках. Результаты работы демонстрируют существенное влияние поверхности на форму и динамику капель жидкости при их зарождении и коалесценции при фазовом переходе. Исследования проведены с использованием высокоразрешающей поляризованной оптической микроскопии и высокоскоростной видеосъёмки. Изучена зависимость числа и среднего размера капель жидкости, образующихся при фазовом переходе, от времени, распределение капель по размерам, определен вклад различных процессов в формирование высокотемпературной фазы. На начальном этапе перехода происходит зарождение и рост изолированных капель. Впоследствии коалесценция капель является доминирующим процессом, что приводит к уменьшению числа частиц и более быстрому увеличению их среднего размера. Определена зависимость числа и среднего размера капель от скорости нагрева. Анализируется различие динамики роста капель на начальном этапе (когда размер капель меньше толщины кюветы) и на более позднем этапе, когда поперечный размер капель больше толщины кюветы.
Движущей силой коалесценции капель является поверхностное натяжение границы. На начальном этапе наблюдается быстрое изменение формы частиц, образующихся при слиянии капель, рост перешейка в месте слияния. На конечном этапе происходит более медленная релаксация капли к равновесной форме, описывающаяся экспоненциальным законом. Определены характерные времена процессов, происходящих при коалесценции. Результаты сопоставлены с экспериментами по коалесценции в двумерной геометрии свободно подвешенных плёнок [1,2] и с теорией [3]. Показано, что используемая система является удобным объектом для изучения двумерной и квазидвумерной коалесценции. Обсуждается влияние поверхности кювет на динамику коалесценции, отличие от коалесценции свободных частиц. Увеличение характерного времени релаксации с увеличением размера частиц находится в количественном согласии с теорией.

Работа поддержана грантом РНФ 18-12-00108.

1. Shuravin N.S., Dolganov P.V., Dolganov V.K. // Phys. Rev. E. – 2019. – V. 99. – № 6. P. – 062702.
2. Dolganov P.V., Shuravin N.S., Dolganov V.K. // Phys. Rev. E. – 2020. – V. 101. – № 5. – P. 052701.
3. Brun P.-T., Nagel M., Gallaire F. // Phys. Rev. E. – 2013. – V. 88. – № 4. – P. 043009.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.250

БЕРНШТЕЙНОВСКИЕ МОДЫ В ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

Дорожкин С.И., Капустин А.А., Кукушкин И.В.

Институт физики твердого тела Российской Академии наук,
г. Черноголовка, Россия, dorozh@issp.ac.ru

Экспериментально и теоретически установлены особенности резонансного микровол-нового поглощения в двумерных электронных системах, обусловленного возбуж-дением бернштейновских мод с волновыми векторами k широкого диапазона. Эк-спериментально наблюдались две моды, расположенные в интервалах частот между первой и второй, а также второй и третьей гармониками циклотронного резонанса. Установлено, что для типичных значений экспериментальных параметров зависи-мость положения резонансов от магнитного поля и волнового вектора парамет-ризуется в координатах $(kR_c, \omega/\omega_c)$ при $kR_c >\approx 1$. Здесь $R_c = V_F/\omega_c$ - циклотронный радиус электронов с фермиевской скоростью V_F, ω_c - циклотронная частота элект-ронов, ω - круговая частота излучения. Зависимость ω/ω_c от kR_c для обеих мод яв-ляется немонотонной. Согласно расчету, минимумы имеют место при универсальных значениях kR_c, являющихся нулями функций Бесселя J_n соответству-ющего порядка, что неплохо согласу-ется с экспериментальными наблюде-ниями (см. рис.).

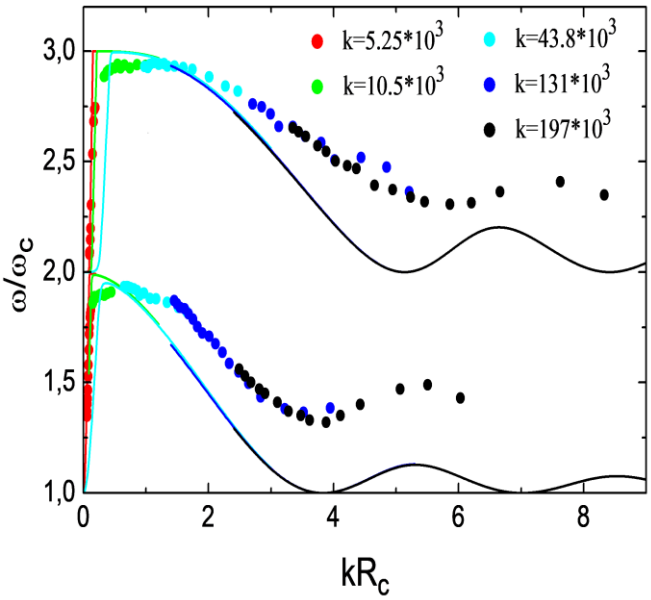


Рис. Экспериментальные положения резонансов микроволнового поглощения (цветные символы), индуцированного ПАВ с различными волновыми векторами k, приведенными на рис. в единицах см$^{-1}$. Сплошными линиями того же цвета пока-заны расчеты магнитодисперсии бернштейновс-ких мод для соответствующих k. При $kR_c > 1$ все вычисленные линии магнитодисперсии прак-тически совпадают. Данные приведены для плот-ности двумерных электронов 2.0x10^{10} см$^{-2}$.

Измерения индуци-рованного поверхностными акусти-ческими волнами (ПАВ) резонансного микроволнового поглощения выпол-нены на серии образцов, изготовлен-ных из одной гетероструктуры GaAs/AlGaAs и отличавшихся перио-дом гребенки встречно - штырьевого преобразователя, использовавшегося для возбуждения ПАВ [1]. Этот пери-од определял значения волнового век-тора возбуждаемых бернштейновских мод. Магнитодисперсия бернштейнов-ских мод для различных значений k, приведенная на рис., получена числен-ным решением дисперсионного урав-нения:

$$1 - \frac{4e^2 m^*}{\hbar^2 k\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 J_n^2(kR_c)}{(\omega/\omega_c)^2 - n^2} = 0,$$

где m^* - эффективная масса двумерных электронов, ε - эффективное значе-ние диэлектрической проницаемости гетероструктуры: $m^* = 0.067 m_e$, $\varepsilon = 6.9$.

1. Кукушкин И.В., Волков В.А. // Двумерная электронная жидкость в сильном магнитном поле. Магнитоплазмоны, магниторотоны, композитные фермионы – 2016. – Физматкнига, Москва.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.251

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ СДВАИВАНИЯ СТУПЕНЕЙ ПОВЕРХНОСТИ Si(100) ПРИ ГОМОЭПИТАКСИИ Si

Есин М.Ю., Дерябин А.С., Тийс С.А., Колесников А.В., Никифоров А.И.

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Россия, yesinm@isp.nsc.ru

Данная работа посвящена исследованию формирования сдвоенных ступеней поверхности Si(100) с малым отклонением (<0,5°). Как известно, при подходящей скорости осаждения и покрытии, S_B-ступени будут догонять более медленные S_A-ступени, формируя двухатомные ступени [1]. Однако, одновременно действуют и силы отталкивания между ступенями, которые возникают из-за полей упругих деформаций поверхности Si(100) и эффективного энтропийного взаимодействия [2]. Появляется нестабильность ступенчатой поверхности Si(100). В связи с этим вопрос определения условий влияющих на кинетику массопереноса между ступенями и террасами остается актуальным. Исследования сдваивания ступеней проводились ранее авторами работы [1] на подложках Si(100) с отклонением от 0,5° до 4°. В нашей работе проведены исследования динамики сдваивания ступеней на подложках Si(100) с отклонением менее 0,5°.

В данной работе представлены результаты исследования динамики сдваивания моноатомных ступеней и восстановления исходной поверхности на подложках Si(100) (переход от двухдоменной к однодоменной структуре поверхности). Использовались подложки Si(100) с отклонением 0,1°, 0,3° и 0,5° в азимутальным направлением [110]. Исследования проведены путем анализа сверхструктурных рефлексов дифракции быстрых электронов (ДБЭ) в установке молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) «Катунь». Установлено, что с увеличением температуры подложки от 600°С до 800°С, время сближения ступеней увеличивается. Также, с уменьшением угла отклонения подложек Si(100) (с увеличением ширины террас) происходит смещение температуры перехода режимов роста (от 2D островков к движению ступеней) в сторону более высоких температур подложки, при этом время сближения ступеней увеличивается. После прерывания потока атомов Si, моноатомная ступенчатая поверхность подложки восстанавливается. С одной стороны, восстановление поверхности зависит от температуры подложки, с другой стороны, от степени сближения ступеней. Время восстановления с уменьшением температуры подложки увеличивалось.

В дополнение представлены результаты исследований плотности изломов S_B-ступеней от температуры и длительности отжига поверхности Si(100) с отклонением 0,5°. Изображения ступенчатой поверхности Si(100) получали методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). По изображениям СТМ, определялось количество изломов ступеней. Полученная зависимость имеет минимум при 650°С. При температуре минимума (650°С), кривая плотности изломов от длительности отжига вначале резко падает и через 40 минут выходит на стационарный уровень. В результате показано, что равновесная концентрация изломов S_B-ступеней определяется температурой и длительностью отжига поверхности Si(100).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 19-42-543010.

1. Sakamoto K., Sakamoto T., Miki K., Nagao S. // J. Electrochem. Soc. – 1989. – V. 136. № 9. – P. 2705-2710.
2. Swartzentruber B.S., Kitamura N., Lagally M.G., Webb M.B. // PRB. – 1993. – V. 47. № 20. – P. 13432-13441.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.252

ОСОБЕННОСТИ КАПИЛЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАСПЛАВА СЕРЕБРА С ТВЕРДЫМИ ЖЕЛЕЗОМ, НИКЕЛЕМ И КОБАЛЬТОМ В ПРИСУТСТВИИ УГЛЕРОДА

Жевненко С.Н., Петров И.С., Антонова В.Е.,
НИТУ МИСиС, Москва, Россия
zhevnenko@misis.ru

В работе исследовали взаимодействие жидкого чистого (99,999%) серебра с железом, никелем и кобальтом на оригинальных установках, подробно описанных в [1, 2]. Измерения поверхностного натяжения расплава серебра проводили методом пластинки Вильгельми и методом висящей капли. Кинетику растекания и контактного угла смачивания при растекании определяли методом перенесенной капли с помощью высокоскоростной съемки. Измерения проводили в интервале температур от 1000 – 1150 ^{o}C высоком вакууме 10^{-5} мм.рт.ст. Особенностью оборудования является использование дозатора и нагревателя из высокочистого углерода. Это обусловило обнаружение ряда эффектов, связанных с влиянием углерода на поверхностную энергию расплава серебра и растекание. Углерод значительно снижает поверхностную энергию жидкого серебра и с повышением температуры этот эффект уменьшается. Контактные углы и кинетика растекания существенно отличается в случае никеля, железа и кобальта. При высоких температурах наблюдается эффект кажущегося затвердевания капли серебра, связанного с образованием твердого углеродного каркаса на поверхности расплава.

В докладе будут приведены кинетические зависимости кинетики растекания, установления контактных углов смачивания, продемонстрированы указанные эффекты и обсуждены причины их возникновения.

Работа выполнена в рамках гранта Президента Российской Федерации, проект № МД-1161.2020.2

Список литературы

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. – 2020. – С. 157886.
2. Жевненко С. Н., Гершман Е. И., Метод измерения поверхностного натяжения границы раздела «твердое-газ» «insitu» // Физика металлов и металловедение. 2010. т. 110. № 1. с. 1-7

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.253

ПЛАЗМЕННЫЕ РЕЗОНАНСЫ В ДИСКЕ С 2D ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ: РОЛЬ ЭФФЕКТОВ ЗАПАЗДЫВАНИЯ

Загороднев И.В., Родионов Д.А., Заболотных А.А.

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Россия, 125009, г. Москва, ул. Моховая, 11, корп. 7, igor.zagorodnev@gmail.com

Хотя плазменные колебания в 2D электронных системах изучаются более 40 лет, все ещё возникают довольно простые вопросы, ответы на которые неизвестны. Так, недавно систематические экспериментальные исследования плазменных резонансов в больших дисках из двумерного электронного газа в квантовых ямах GaAs/GaAlAs, в режиме когда важны эффекты электромагнитного запаздывания, выявили целую область, в которой практически отсутствует теоретическая база для описания таких колебаний [1]. И если частоту плазменных резонансов в таких дисках ещё можно качественно описать, используя размерное квантование волнового вектора плазмона размером диска в законе дисперсии для бесконечной системы (с учётом электромагнитного запаздывания), то затухание плазменных колебаний таким способом найти не удается. В данном докладе, основанном на работах [2,3], будут теоретически проанализированы частота и затухание осесимметричной (с орбитальным моментом $l = 0$) и фундаментальной ($l = 1$) плазменных мод. Хорошо известно, что мода с $l = 1$, не имеющая узлов плотности заряда вдоль радиуса, обладает более низкой частотой, поэтому её и называют фундаментальной.

Будет показано, что затухание плазменных колебаний определяется не только столкновительным временем релаксации, но и параметром электромагнитного запаздывания, причем зависимость затухания от параметра запаздывания немотонна [3].

При наличии постоянного магнитного поля, ортогонального плоскости 2D системы, в отсутствие электромагнитного запаздывания с ростом величины магнитного поля частота плазменного резонанса выходит на циклотронную частоту, т.е. линейно зависит от магнитного поля. С увеличением параметра электромагнитного запаздывания график зависимости положения плазменного резонанса от магнитного поля пересекает ветвь циклотронного резонанса и выходит на постоянное значение (“зигзагообразное” поведение магнитодисперсии). Затухание основного плазменного резонанса при этом увеличивается.

Работа выполнена за счет средств гранта РНФ 21-12-00287.

1. P.A. Gusikhin, V.M. Muravev, A.A. Zagitova, I.V. Kukushkin, Phys. Rev. Lett. 121, 176804 (2018).
2. I.V. Zagorodnev, D.A. Rodionov, A.A. Zabolotnykh, V.A. Volkov, Semiconductors 53, 1873 (2019).
3. I.V. Zagorodnev, D.A. Rodionov, A.A. Zabolotnykh, arXiv:2011.00877.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.254

RESIDUAL BULK VISCOSITY OF A 2D ELECTRON GAS

Захаров[1] В.А., Бурмистров[2,3] И.С.
[1]*Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia,* zahkarov.vl.cld@gmail.com
[2]*L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka, Russia*
[3]*Laboratory for Condensed Matter Physics, HSE University, Moscow, Russia*

The nonzero bulk viscosity signals breaking of the scale invariance. We demonstrate that a disorder in two-dimensional noninteracting electron gas in a perpendicular magnetic field results in the nonzero disorder–averaged bulk viscosity. We derive analytic expression for the bulk viscosity within the self-consistent Born approximation. This residual bulk viscosity provides the lower bound for the bulk viscosity of 2D interacting electrons at low enough temperatures [1].

1. V. A. Zakharov and I. S. Burmistrov, arXiv 2102.10533 (2021)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.255

УЛЬТРАКОРОТКАЯ ЛАЗЕРНАЯ ИНЖЕНЕРИЯ АМОРФНЫХ МИКРОПРОВОДОВ PrDyFeCoB

Коплак О.В.[1], **Ходос И.И.**[2], **Королев Д. В.**[3], **Погорелец Ю.С**[1]., **Моргунов Р.Б.**[1]

[1]*Институт проблем химической физики РАН. Черноголовка. Россия,*
[2]*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка. Россия,*
[3]*ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов. Москва, Россия*
o.koplak@gmail.com

Сплавы группы RE-TM-B (RE - редкоземельные металлы, TM-переходные металлы, B- бор) являются основой для постоянных магнитов с самой высокой запасенной магнитной энергией и остаточной намагниченностью [1, 2]. Лазерная литография открывает возможность инженерии магнитных микроструктур, для быстрого локального нагрева выбранного участка, что приводит к локальной кристаллизации исходно аморфного ферромагнетика, создавая на его поверхности нужный рисунок с распределением намагниченности. В аморфных микропроводах PrDyFeCoB, с помощью одиночного лазерного импульса с энергией 1 mJ, длительностью 120 ns и длиной волны 1040 nm, создана магнитомодулированная структура (рис.1a).

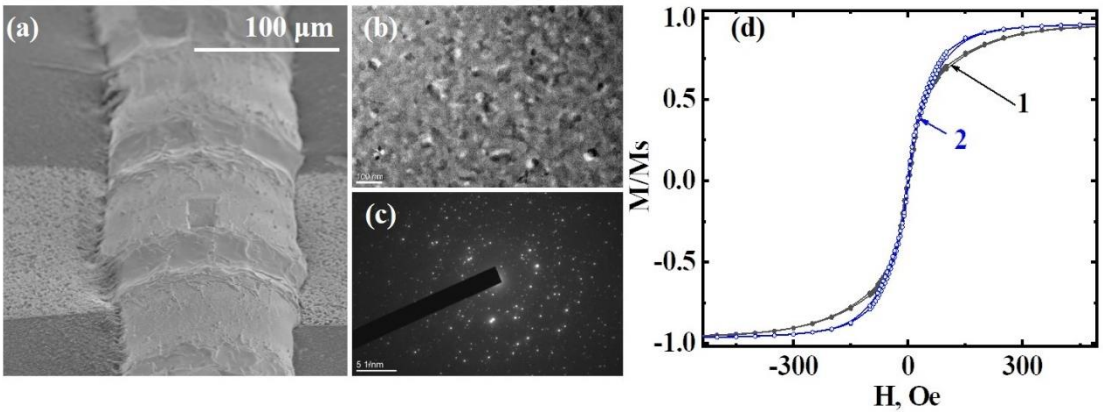


Рис.1. СЭМ - изображение микропровода с лазерной гравировкой (a); ПЭМ изображение необлученной (b) и облученной (c) области. Петли гистерезиса (d) намагниченности M целого микропровода, нормированные на намагниченность насыщения Ms до лазерного облучения (1), и после лазерного облучения (2).

В облученных областях формируется нанокристаллическая структура (рис.1b), содержащая фазы мягкого ферромагнетика $(PrDy)_1(FeCoB)_2$ и $(PrDy)_1(FeCoB)_4B_4$, идентифицированные по рефлектограммам просвечивающей электронной микроскопии (рис.1c). Появление магнитомодулированных областей в микропроводе приводит к увеличению магнитной анизотропии (рис.1.d).

Благодарности.
Работа выполнена в соответствии с программой Института проблем химической физики РАН АААА-А19-119092390079-8, Российского фонда фундаментальных исследований (20-32-70025) и гранта Президента РФ 2644.2020.2.

1. Пискорский В.П., Королев Д.В., Валеев Р.А., Моргунов Р.Б., Куницына Е.И. «Физика и инженерия постоянных магнитов», М.: ВИАМ, 2018. – 392 с.
2. Morgunov R.B., Koplak O.V., Piskorskii V.P., Korolev D.V., Valeev R.A., Talantsev A.D., // JMMM.-2020. – 497. – с. 166004.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.256

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭКСИТННЫЕ ПОЛЯРИТОНЫ В ОДНОСЛОЙНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ, СВЯЗАННЫЕ С ОПТИЧЕСКИМИ СВЯЗАННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ В КОНТИНУУМЕ

В. Кравцов[1], Е. Хестанова[1], Ф. А. Бенимецкий[1], Т. Иванова[1], А. К. Самусев[1], И. С. Синев[1], Д. Пидгайко[1], А. М. Можаров[2], И. С. Мухин[1,2], М. С. Ложкин[3], Ю. В. Капитонов[3], А. С. Бричкин[4], В. Д. Кулаковский[4], И. А. Шелых[1,5], А. И. Тартаковский[6], П. М. Уокер[6], М. С. Скольник[1,6], Д. Н. Крижановский[6], И. В. Йорш[1]

[1]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Санкт-Петербургский академический университет, Санкт-Петербург, Россия*
[3] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
[4] *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*
[5] *Science Institute, University of Iceland, Dunhagi 3, IS-107, Reykjavik, Iceland*
[6] *Department of Physics and Astronomy, University of Sheffield, Sheffield S3 7RH, UK*
kulakovs@issp.ac.ru

Высокодобротные оптические связанные состояния в континууме (ССвК), поддерживаемые фотонно-кристаллическими структурами привлекают большое внимание как новый подход к генерации чрезвычайно узких в спектральном отношении резонансных откликов [1,2]. ССвК не связаны с континуумом излучения по симметрийным соображениям[3], поэтому они устойчивы к возмущениям геометрических параметров фотонного кристалла. Это обеспечивает широкий спектр практических приложений, включая недавно продемонстрированную спектральную фильтрацию, химическое и биологическое зондирование и генерацию.

Большое время затухания ССвК мод обеспечивает их длинные времена взаимодействия и открывает перспективы их использования для нелинейных оптических процессов и разработки следующего поколения активных оптических устройств. Однако из-за чисто фотонного характера оптических ССвК взаимодействие этих мод может быть обеспечено только при смешивании с взаимодействующими квазичасицами. В данной работе ССвК в пластине фотонного кристалла смешивались с экситонами в атомарно тонком MoSe2, чтобы позволило сформировать экситонные поляритоны с большим (~ 27мэВ) расщеплением Раби.

Благодаря наследованному от ССвК компоненты асимптотическому уменьшению поляритонного излучения в дальней зоне при стремлении планарного квазиимпульса к нулю, и эффективному уменьшению неоднородной ширины экситонного резонанса движущихся экситонов, в структуре была достигнута относительно небольшая полуширина поляритонной линии, не превышающая 3 мэВ. В результате при резонансном возбуждении поляритонных мод лазерными импульсами длительностью 130 фс с плотностью 3 мкДж/см^2 были реализованы фиолетовые сдвиги нижней поляритонной ветви до 5 мэВ на масштабе ~ 100 фс.

Таким образом, показано, что формирование поляритонов на основе ССвК может обеспечить не только значительно усиленные, но и контролируемые быстрые нелинейные оптические отклики в фотонно-кристаллических системах с однослойными полупроводниками, характеризующимися сильным экситон-экситонным взаимодействием, что открывает новый путь для разработки нелинейных полностью оптических элементов для оптоэлектронных устройств.

[1] Marinica, D., et al.. Phys.Rev. Lett. 100, 183902 (2008).

[2] Hsu, C. W., et al Nat. Rev. Mater. 1, 16048 (2016).

[3] Lee, J. et al.. Phys. Rev. Lett. 109, 067401 (2012).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.257

ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ A^3B^5

Лебедев М.В., Львова Т.В., Седова И.В.

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе,
г. Санкт-Петербург, Россия, mleb@triat.ioffe.ru

Характеристики современных наноструктурных приборов в существенной степени определяются свойствами поверхностей и интерфейсов. Поверхности полупроводников A^3B^5 характеризуются высокой плотностью состояний в запрещенной зоне, приводящих к закреплению уровня Ферми и высокой скорости поверхностной безызлучательной рекомбинации. Поэтому для снижения уровня электронных и оптических потерь необходима модификация поверхности. В общем случае, для электронной пассивации поверхности необходимо изменить ее атомную структуру и, в частности, удалить слой естественного окисла и насытить оборванные химические связи. Одновременно необходимо обеспечить условия для удаления заряда с поверхностных состояний, исчезающих в процессе пассивации. В данной работе исследуется механизм электронной пассивации поверхности полупроводника A^3B^5 на примере взаимодействия n-InP(100) с водными и спиртовыми сульфидными растворами. Исследования проводились с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), фотолюминесценции (ФЛ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Показано, что даже кратковременный (в течение 1 мин) контакт поверхности полупроводника с сульфидным раствором приводит к удалению с поверхности полупроводника слоя естественного окисла, состоящего, в основном, из фосфата индия, и к формированию сульфидного пассивирующего покрытия, состоящего из сульфидов и оксидов индия [1]. Эти химические процессы приводят к многократному возрастанию интенсивности ФЛ, что свидетельствует о существенном снижении скорости безызлучательной рекомбинации на поверхности n-InP(100). Более длительная выдержка полупроводника в растворе не приводит к существенному изменению химического состава его поверхности и ФЛ свойств. Методом спектроскопия КРС было установлено, что при обработке поверхности n-InP(100) сульфидными растворами происходит снижение плотности поверхностных состояний, проявляющееся в виде уменьшения ширины приповерхностной обедненной области. Установлено, что модификация электронной структуры поверхности полупроводника происходит в результате гетерогенных химических реакций на границе полупроводник/раствор протекающих с изменением степеней окисления входящих в состав реагирующих веществ ионов за счет перераспределения электронов между поверхностными состояниями полупроводника и компонентами раствора.
Таким образом, модификация электронной структуры поверхности полупроводника происходит вследствие обмена зарядом между полупроводником и раствором в результате окислительно-восстановительной реакции.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00523).

1. Lebedev M.V., Serov Y.M., Lvova T.V., Endo T., Masuda T., Sedova I.V. // Appl. Surf. Sci. – 2020. – V. 533. – 147484.

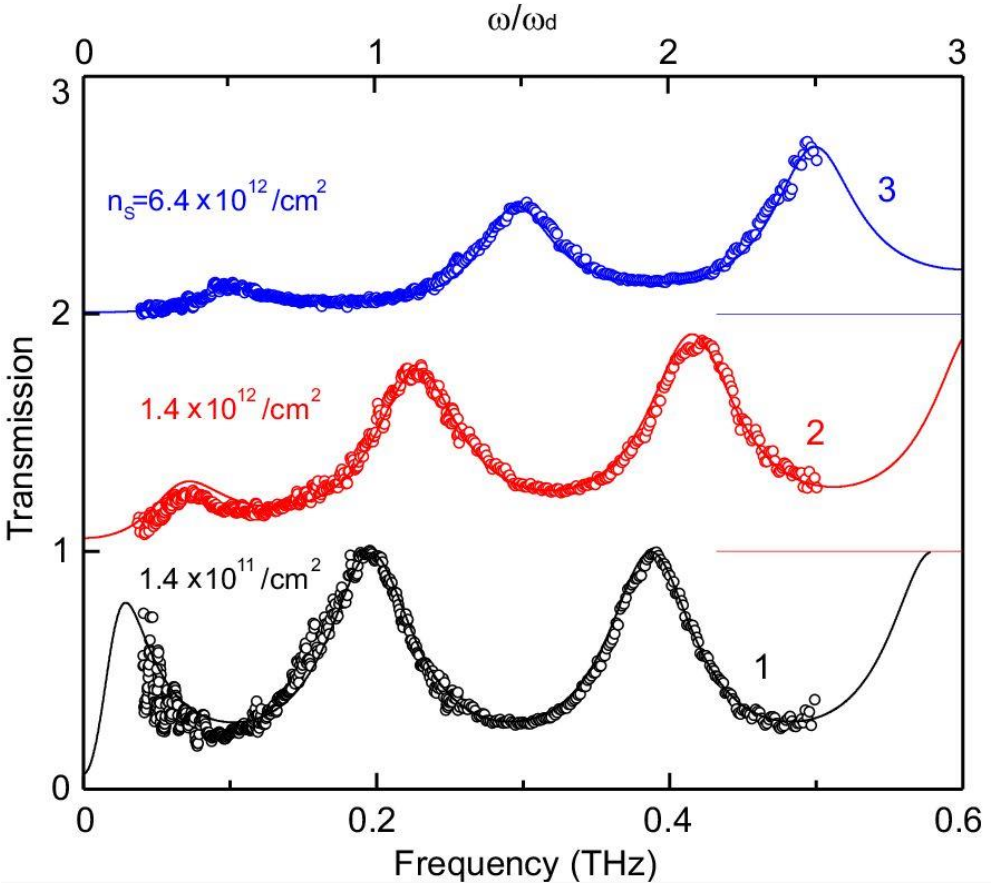
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.258

ОТКРЫТИЕ ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ ВОЛН

Муравьев В.М., Гусихин П.А., Кукушкин И.В.

ИФТТ РАН, 142432, Черноголовка, Московская обл., ул. Академика Осипьяна, д.2
**e-mail: muravev@issp.ac.ru*

В электромагнитном отклике высококачественных двумерных электронных систем на базе GaAs/AlGaAs наноструктур, выращенных на диэлектрической подложке были экспериментально открыты двумерные электромагнитные плазменные волны. Был измерен их спектр и магнитодисперсия. В отличие от хорошо изученных двумерных плазмонов, являющихся продольными колебаниями зарядовой плотности, открытые моды являются поперечными электромагнитными плазменными волнами. Основным свойством данных плазменных волн является «надсветовая» дисперсионная зависимость частоты от составляющей волнового вектора в плоскости ДЭС.
Установлено, что при больших плотностях двумерных электронов существует сильная гибридизация между плазменными и световыми модами Фабри-Перо. Показано, что возбуждение новых плазменных волн тесно связано с проблемой локального усиления электромагнитного поля. Полученный результат потенциально может позволить повысить на порядки чувствительность терагерцовых и инфракрасных детекторов электромагнитного излучения.



1. P.A. Gusikhin, V.M. Muravev, and I.V. Kukushkin, Phys. Rev. B 102, 121404(R) (2020).

2. A. Shuvaev, V.M. Muravev, P.A. Gusikhin, J. Gospodaric, A. Pimenov and I.V. Kukushkin, Phys. Rev. Lett. 126, 136801 (2021).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.259

ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В МОНОКЛИННОЙ ФАЗЕ NbS_3 И ИХ СВЯЗЬ С ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРОЙ КРИСТАЛЛА

Покровский В.Я.[1], Зыбцев С.Г.[1], Никонов С.А.[1], Майзлах А.А.[1], Табачкова Н.Ю.[2,3], Пай Воей Ву[4,5]

[1]*ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия,* vadim.pokrovskiy@mail.ru
[2]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*
[3]*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*
[4]*Center for Condensed Matter Sciences, National Taiwan University, Taipei, Taiwan*
[5]*Department of Physics, National Taiwan University, Taipei, Taiwan*

Моноклинная модификация NbS3 (NbS3–II) – один из трихалькогенидов переходных металлов V группы. Это семейство квазиодномерных соединений известно благодаря образующимся в них волнам зарядовой плотности (ВЗП). NbS3–II отличается многообразием ВЗП и высокими температурами переходов, при которых они образуются. Так, ВЗП-1 формируется при TP1≈360 K [1]. При комнатной температуре она сосуществует с ВЗП-0, образующейся при рекордно высокой температуре TP0≈465 K [2]. Ещё одна ВЗП, ВЗП-2, образуется при TP2≈150 K, причём, только в низкоомных образцах. До сих пор всё многообразие фаз и дефектная структура NbS3–II до конца не изучены. Все три ВЗП в NbS3 –II могут скользить в электрическом поле.

В триклинной фазе NbS3 (NbS3–I) наблюдается удвоение решётки вдоль оси b, параллельной цепочкам. Такая ВЗП не может переносить заряд.

В докладе будут представлены результаты недавних транспортных и структурных исследований вискеров NbS3–II. Будет предложена предварительная систематизация данных. Перечислим основные тезисы.

1) Для образования ВЗП-2 необходима определённая дефектная структура. Это подтверждается тем, что отжиг высокоомных кристаллов приводит к повышению их проводимости, но не приводит к возникновению ВЗП-2. По-видимому, ВЗП-2 возникает на дефектах упаковки и, таким образом, состоит из двумерных слоёв атомной толщины. Этот предварительный результат подтверждается исследованиями в СТМ и в ПЭМ [3], однако требует дальнейшей проверки.

2) Среди обычных кристаллов NbS3–II обнаружены «аномальные» вискеры, в которых ВЗП-1 не образуется, но присутствует ВЗП-0. На это указывают их транспортные свойства. Напрямую результат подтверждён исследованиями в ПЭМ. Кроме того, в ПЭМ наблюдалось неизвестное ранее искажение решётки – близкое к удвоению вдоль b, но несоизмеримое. При этом, отклонение постоянных решётки от значений, известных для обычных образцов, незначительно.

3) Есть указания на существование и других «подфаз» NbS3–II.

Многообразие свойств NbS3–II объясняется особенностями межатомных связей S-S. Так, слабая связь между парами цепочек Nb может приблизить по свойствам NbS3–II к фазе I: элементарную ячейку NbS3–II, состоящую из 8 цепочек, можно представить как комбинацию четырёх ячеек NbS3–I, каждая из которых содержит 2 цепочки Nb [4]. Таким образом, «аномальные» образцы NbS3–II можно считать промежуточными по структуре между фазами I и II.

Работа поддержана РФФИ (гранты 20-02-00827 и 20-32-90231).

1. Monceau P. // Adv. Phys. – 2012. – V. 61. – P. 325 .
2. Zybtsev S.G. et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 854. – P. 157098.
3. Zupanic E. et al. // Phys. Rev. B. – 2018. – V. 98. – P. 174113.
4. Prodan A. et al. // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1988. – V. 21. – P. 4171.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.260

ИНТЕРКАЛЯЦИЯ КОБАЛЬТА ПОД БУФЕРНЫЙ СЛОЙ УГЛЕРОДА НА SIC(0001) ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МАГНИТНО-СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ГРАФЕНА

А. А. Рыбкина, С. О. Фильнов, А. В. Тарасов, А. В. Ерыженков, А. М. Шикин, А. Г. Рыбкин

Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб. 7-9, Санкт-Петербург, 199034, a.rybkina@spbu.ru

Исследование графена является одним из перспективных научных направлений в современной физике конденсированного состояния. Безмассовость квазичастиц в графене и линейность дисперсионной зависимости E(k) обеспечивают аномально высокую проводимость графена и другие уникальные свойства. А гигантское спиновое расщепление электронных состояний, обнаруженное в «магнитно-спин-орбитальном» графене при контакте с тяжелыми и магнитными металлами, открывает широкие перспективы для применения в устройствах спинтроники, в частности, в области хранения информации и квантовых вычислений [1]. Однако для успешного применения «магнитно-спин-орбитального» графена в элементах устройств необходимо использовать неметаллические подложки, например, SiC(0001). Ранее была изучена возможность интеркаляции магнитного металла Co под графен на SiC(0001), но она приводила к формированию двухслойного графена [2,3]. Для получения монослойного графена в данной работе была проведена интеркаляция магнитного металла под буферный слой углерода на подложке SiC.

В работе исследован процесс интеркаляции атомов магнитного металла Co под буферный слой графена на 6H-SiC(0001), в результате которого происходит трансформация буферного слоя в монослой графена. Интеркаляция Co (толщина наносимых слоёв кобальта – до 20 Å) под буферный слой графена была проведена двумя способами. В первом случае напыление Co производилось при комнатной температуре и сопровождалось отжигом системы до температуры 550oC. А во втором случае напыление Co осуществлялось уже на нагретую до 450oC подложку. Было показано, что интеркаляция кобальта на нагретой подложке происходит в 2-3 раза быстрее, чем в случае напыления кобальта при комнатной температуре с последующим отжигом. Исследования проводились с использованием широкого спектра экспериментальных методов: XPS, ARPES, LEED и AFM.

В ходе работы разработана усовершенствованная технология синтеза буферного слоя графена/SiC(0001) с последующей интеркаляцией атомов кобальта, в результате которой получен квазисвободный графен на поверхностном силициде кобальта, терминированном кремнием. Наличие атомов Si под графеном приводит к блокировке сильного взаимодействия графена с кобальтом, что объясняет линейный характер Дираковского конуса электронных состояний.

Полученные результаты являются основой для дальнейших экспериментов по реализации магнитно-спин-орбитального графена на изолирующей подложке.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 51126254), Российского научного фонда (грант № 20-72-00031, № 18-12-00062) и Министерства науки и высшего образования (грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

1. A. G. Rybkin et al. // Nano Letters. – 2018. – 18 (3). – P. 1564–1574
2. Г.С. Гребенюк и др. // ФТТ. – 2020. – 62. – 3.
3. Y. Zhang et al. // Nanotechnolgy. – 2017. – 28. – P. 075701

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.261

TERAHERTZ DETECTION WITH TUNNEL FIELD-EFFECT TRANSISTORS

D. Svintsov[1], D. Bandurin[2], I. Gayduchenko[3], G. Alymov[1], A. Geim[2], G. Fedorov[1]

1. *Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny 1414700, Russia*
2. *School of Physics, University of Manchester, Manchester M13 9PL, UK.*
3. *Moscow Pedagogical State University, Moscow 119435, Russia*

Tunnel field-effect transistors (TFETs) are considered as main candidates for future low-power electronic circuits. The origin of low-power switching is the steep dependence of source-drain interband tunneling current on the overlap between conduction and valence bands [1]. The normalized steepness of gate-current characteristic d ln Isd/d Vg is not limited by e/kT, where e is the elementary charge and kT is the thermal energy. Such sub-thermal switching was demonstrated experimentally (for review see [2]).

Despite numerous applications of TFETs in logic circuits, it was not realized that strong (nonlinear) sensitivity of tunnel current to gate and drain voltages also implies efficient rectification of high-frequency signals by such transistors. Here, we study the operation of tunnel field-effect transistors with gate-induced tunnel junctions as detectors of sub-THz (0.13 THz) radiation [3]. We show high responsivity (~4 kV/W) and low noise equivalent power (~0.2 pW/Hz1/2) at T = 10 K.

Our devices were made of bilayer graphene encapsulated in hexagonal boron nitride. Induction of finite band gap and excess carrier density was achieved by simultaneous action of back and top gates. Short sections of graphene bilayer (~300 nm) close to the source and drain contacts were not covered by the top gate, and were controlled by the bottom one only. Thus, by application of gate voltages of opposite polarity to the gates, it was possible to induce a p-n junction between single-gated and double-gated regions. Further enhancement of gate voltages could result in overlap between conduction and valence bands at the two sides of the junction, thus pushing it to tunneling regime. The radiation was fed to TFET from THz antenna coupled between source and gate, the photovoltage was read out between source and drain.

We have found that dependence of photoresponse on top gate voltage differs drastically in the gapless and gapped regimes of transport. In the gapless regime, the voltage responsivity is quite low (max ~100 V/W) and symmetric with respect to charge neutrality point. In the gapped regime (i.e. at finite back gate voltage), the responsivity reaches 4 W/W, is highly non-linear in intensity, and is strongly asymmetric with respect to charge neutrality. The strongest responsivity is achieved at opposite doping of channel and contacts. We have verified that both current and voltage responsivities grow in the tunneling regime, compared to the regime of intraband ohmic transport.

The observed dependences are in a good agreement with the theory of rectification at gate-controlled junctions near the contacts. The responsivity of the device can be calculated known the quasi-static non-linearities of TFET conductance G(Vg,Vd)-characteristics, dG/dVg and dG/dVd. The latter were calculated under assumption of quantum ballistic transport at the contacts and drift-diffusive transport in the long channel. Being in a good agreement with current measurements, our theory shows that even higher responsivity can be achieved in TFETs with junction at the middle of the channel, as well as in TFETs with extra ‘doping gates’.

The work was supported by grant 21-79-20225 of the Russian Science Foundation.

1. *A.M. Ionescu, H. Riel Nature **479**, 329–337 (2011)*
2. *H. Lu, A. Seabaugh IEEE J. Electron. Dev. Soc. **2**, 44–49 (2014)*
3. *I. Gayduchenko, S. G. Xu, G. Alymov, M. Moskotin, I. Tretyakov, T. Taniguchi, K. Watanabe, G. Goltsman, A. K. Geim, G. Fedorov, D. Svintsov, D. A. Bandurin Nat. Commun. **12**, 543 (2021)*

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.262

КОЛЛЕКТИВНОЕ ДВИЖЕНИЕ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В УЛЬТРАКОРОТКИХ ОБРАЗЦАХ КВАЗИОДНОМЕРНОГО ПРОВОДНИКА $NbSe_3$

А.В. Фролов[1], А.П. Орлов[1], А.А. Синченко[1,2], П. Монсо[3]

[1] *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*
[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*
[3] *Институт Нееля НЦНИ, Гренобль*

Коллективное движение (скольжение) волны зарядовой плотности (ВЗП) возможно только при приложении определенного (порогового) электрического поля, E_t [1]. В случае пропускания тока поперек цепочкам ВЗП в перпендикулярном магнитном поле достижение E_t может быть реализовано бесконтактно, под действием электрического поля Холла [2]. В этом случае скольжение ВЗП начинается и происходит при полном отсутствии сопутствующего тока нормальных носителей, что приводит к существенному увеличению проводимости ВЗП. В данной геометрии длина цепочек ВЗП, вдоль которых происходит скольжение, определяется шириной мостиковой структуры. Применение методов электронной литографии и травления фокусированным ионным пучком, в принципе, позволяет приготовить такие структуры с шириной субмикронного масштаба, что соответствует длинам цепочек, существенно меньше длины Фукияма-Ли-Райса (длины когерентности ВЗП).

В настоящей работе исследовались структуры такого типа на основе монокристаллов $NbSe_3$ с длиной цепочек от 200 до 5000 нм в магнитных полях до 18 Т и в диапазоне температур 0.1-50 К. Показано, что скольжение ВЗП под действием поля Холла реализуется для всех исследованных структур при высоких температурах (Т >30 К). В тоже время нелинейные свойства прекрасно проявляются и при самых низких температурах, до 0.1 мК. Пороговые характеристики депиннинга ВЗП в этом случае очень резкие. Установлено, что E_t становится не зависящим от температуры ниже Т = 4-5 К, что может указывать на переход от тепловых флуктуаций к туннельному механизму депиннинга ВЗП.

При низких температурах обнаружен размерный эффект: пороговое поле скольжения ВЗП демонстрирует сильную зависимость от магнитного поля в образцах с длиной цепочек менее 3 мкм. В структурах с большей длиной цепочек данный эффект отсутствует полностью, и в таких структурах скольжение ВЗП наблюдалось и при сверхнизких температурах в магнитном поле B >3-4 Т.

Предложено качественное объяснение данного эффекта на основании полевой зависимости ларморовского радиуса. В квантующих магнитных полях возбуждения, обусловленные краевыми деформациями ВЗП, локализованы на ларморовских орбитах. В случае сравнения ларморовского диаметра с длиной цепочек данные возбуждения перекрываются, и эффективно «аннигилируют», тем самым делая невозможным собственно деформацию ВЗП. При возрастании магнитного поля ларморовский диаметр уменьшается, нормальные возбуждения пространственно разделяются, деформация ВЗП и ее движение становятся возможными.

1. P. Monceau, Advances in Physics 61, 325 (2012).
2. A.V. Frolov, A.P. Orlov, A.A. Sinchenko and P. Monceau, Phys. Rev. B, 100, 245126 (2019).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.263

СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

[1]Усеинов Н.Х., [2]Lin H.H., [3]Усеинов А.Н., [4]Тагиров Л.Р.

[1]Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия, nuseinov@mail.ru
[2]National Tsing Hua University, 30010, Hsinchu, Taiwan
[3]National Yang Ming Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan
[4]Казанский Физико-Технический Институт - ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

Работа представляет собой теоретическое обобщение и моделирование спин-поляризованной проводимости (кондактанса) в магнитных наноразмерных гетеро-структурах на основе расширенной модели магнитного точечного контакта (ТК) [1,2]. Теория описывает диффузный, квазибаллистический, баллистический и квантовый режимы проводимости и создаёт удобный формализм для моделирования и исследования устройств спинтроники. Модель ТК предполагает, что средний слой между ферромагнитными электродами может быть заменён различными материалами: диэлектриком, ферроэлектриком, магнитной доменной стенкой или полупроводником. Согласно теоретической модели, спин-поляризованная проводимость ТК с учётом квантовых граничных условий может быть найдена из общего выражения для спиновой компоненты электрического тока [1]:

$$I_s = G_0 \frac{k_{F,s}^2 a^2 V}{2} \int_0^\infty \left[T_{b,s} - \left(\Omega_{1,s}(k) + \Omega_{2,s}(k) \right) \right] \frac{J_1^2(ka)}{k} dk, \tag{1}$$

где s – спиновый индекс, G_0 – квант проводимости, $k_{F,s}$ – минимальный из волновых векторов Ферми спиновых подзон электродов, a – радиус точечного контакта, V – приложенное напряжение, $J_1(y)$ – функция Бесселя. $T_{b,s}$ и $\Omega_{1,s(2,s)}$ – функции от интегралов, зависящих от коэффициента прохождения $D_s(\theta, V)$ электронов (где θ – угол падения электрона на границу раздела сред от нормали к плоскости ТК), длин свободного пробега l, волновых векторов Ферми $k_{F,s}$. Функции $T_{b,s}$ и $\Omega_{1,s(2,s)}$ – ответственны за баллистический (туннельный) и диффузионный режимы проводимости ТК, см. их точные выражения в [1,2]. Коэффициент прохождения $D_s(\theta, V)$ может быть найден методом трансфер матрицы как функция ширины L, энергетической высоты UB барьера и др. параметров структуры.

В общем случае немагнитных и симметричных ТК выражение (1) сводится к виду [2]:

$$G = 4G_S \left(\frac{1}{4} - \int_0^\infty \frac{dy}{y} \frac{J_1^2(y)}{1 + y^2K^2 + \sqrt{1 + y^2K^2}} \right), \tag{2}$$

где $K = l/a$. Из выражения (2) легко показать, что в случае K >> 1 проводимость соответствует пределу Шарвина $G = G_S = \partial I / \partial V = e^2 a^2 k_F^2 / (4\pi\hbar)$; в случае $K \to 0$ проводимость соответствует диффузионному пределу Максвелла $G \to G_M = 2a\sigma$, где σ – удельная проводимость.

1. Useinov A., Lin H., Useinov N., Tagirov L. //JMMM. – 2020. – V. 508. – P. 166729(7).
2. Useinov A., Lin H., Useinov N., Tagirov L. // Data in Brief. – 2020. – V. 32. – P. 106233(11).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.264

ОПТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯМИ ОБЛАСТЕЙ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ (ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР), ВОЗНИКАЮЩИХ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $Eu_{0.8}Ce_{0.2}Mn_2O_5$ ЗА СЧЕТ САМООРГАНИЗАЦИИ

Ханнанов Б.Х., Головенчиц Е.И., Санина В.А.

Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург, Россия, khannanov@mail.ioffe.ru

RMn_2O_5 (где R – редкоземельные ионы) являются мультиферроиками, в которых магнитное упорядочение с TN ≈40-45 K индуцирует сегнетоэлектрический порядок с TC ≈ 30-35 K. Они содержат одинаковое количество ионов Mn3+ и Mn4+ в слоях перпендикулярных оси с кристалла и при комнатной температуре имеют симметрию Pbam. Конечная вероятность туннелирования электронов между ионами Mn3+ и Mn4+ (двойной обмен) приводит к появлению наноскопических областей фазового расслоения, занимающих малый объем кристалла.

Немагнитные ионы Eu3+ (основное состояние 7F0) слабо влияют на состояние ионов Mn3+ и Mn4+. Равновесное состояние областей фазового расслоения формируется при балансе сильных взаимодействий: двойного обмена (с энергией E≈0.3 eV), эффекта Яна-Теллера (E≈0.8 eV) и Кулоновского отталкивания(E≈1eV), что обеспечивает существование областей фазового расслоения до температур, выше комнатной. Эти области обладают взаимосвязанными магнитным и электрическим полярным упорядочениями и представляют собой полупроводниковые гетероструктуры. Слои этих гетероструктур являются ферромагнитными и содержащими пары ионов Mn3+-Mn4+, а также перезаряжающие их электроны в различных соотношениях. Измерение параметров ферромагнитных резонансов от отдельных слоев гетероструктур, позволяет судить о состояниях слоев и всей гетероструктуры. В Eu0.8Ce0.2Mn2O5 частичное замещение Eu3+ ионами Ce4+ увеличивает концентрацию гетероструктур.

В настоящей работе исследовалось влияние оптической накачки на свойства гетероструктур в Eu0.8Ce0.2Mn2O5. Оптическая накачка изменяет соотношение ионов Mn3+ и Mn4+ в отдельных слоях гетероструктур, изменяя баланс указанных выше взаимодействий и, соответственно, их магнитные и электрические полярные свойства. Равновесные состояния областей фазового расслоения как до, так и после оптической накачки устанавливается при циклировании магнитного поля. Усиление или ослабление магнитного поля приводит к увеличению или уменьшению количества ферромагнитно ориентированных пар ионов Mn3+ и Mn4+ соответственно, что позволяет влиять на двойной обмен. При релаксации оптического возбуждения преимущественно заселяются электронами слои с более глубокими ямами, увеличивая в этих слоях концентрацию Ян-Теллеровских ионов Mn3+ и усиливая Ян-Теллеровское взаимодействие. При этом изменяется и Кулоновское отталкивание электронов. Таким образом, в результате оптической накачки изменяется баланс взаимодействий и состояния гетероструктур. При более мощной оптической накачке удается получить гетероструктуры, существующие до более высокой температуры, чем до накачки [1].

[1]. Головенчиц Е.И., Ханнанов Б.Х., Санина В.А. // Письма в ЖЭТФ. – 2020. - Т. 111. - № 12.- С.-826 - 832.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.265

КИРАЛЬНАЯ НЕЛОКАЛЬНАЯ ТЕРАГЕРЦОВАЯ ФОТОПРОВОДИМОСТЬ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ФАЗЫ $Hg_{1-x}Cd_xTe$

Казаков А.С.[1], Галеева А.В.[1], Артамкин А.И.[1], Иконников А.В.[1], Рябова Л.И.[1], Михайлов Н.Н.[2], Дворецкий С.А.[2], Банников М.И.[3], Данилов С.Н.[4], Хохлов Д.Р.[1,3]

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[3]*ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*
[4]*University of Regensburg, Regensburg, Germany*
E-mail: khokhlov@mig.phys.msu.ru

Представлены результаты по нелокальной терагерцовой фотопроводимости в толстых эпитаксиальных пленках $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с инвертированным энергетическим спектром (x <~ 0.16).

В работе прямо продемонстрировано существование нелокальной компоненты терагерцового фотоответа в толстых эпитаксиальных пленках $Hg_{1-x}Cd_xTe$ в магнитном поле. Знак нелокального фотоответа зависит от положения потенциального зонда и направления магнитного поля, что указывает на киральность индуцированного неравновесного транспорта. Наблюдаемые нетривиальные особенности фототранспорта можно интерпретировать как проявление образования концевого хирального краевого проводящего канала в топологической фазе сплавов $Hg_{1-x}Cd_xTe$. Мы обсуждаем результаты в терминах качественной модели, которая учитывает сосуществование объемного транспортного и граничного проводящих каналов.

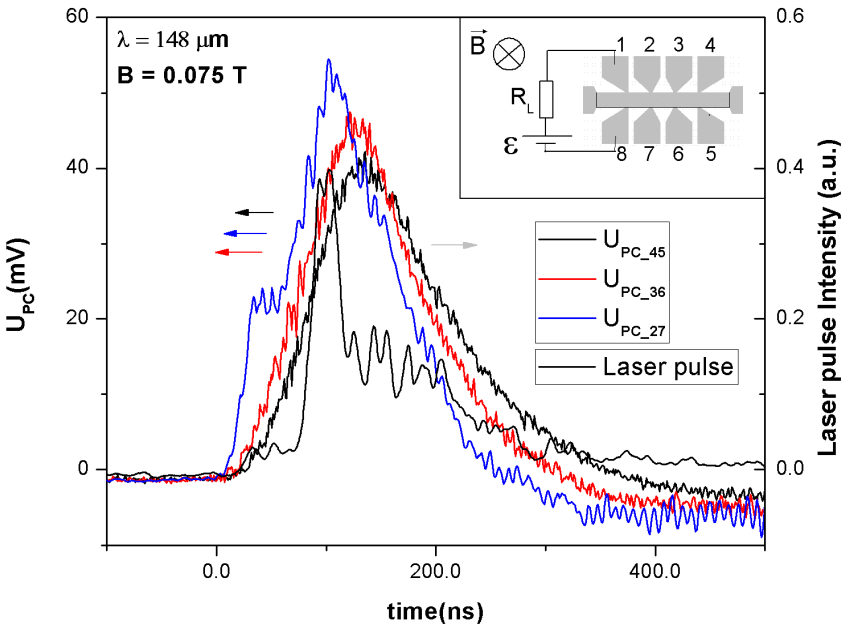


Рис.1. – Кинетика фотоответа, измеренного в образце с составом x = 0.13 при терагерцовом фотовозбуждении с длиной волны λ = 148 мкм в магнитном поле B = 0.075 T. Синие, красные и черные кривые соответствуют кинетике фотоответа, измеренной с использованием 2-7, 3-6 и 4-5 пар потенциальных зондов соответственно. Серая кривая соответствует временному профилю лазерного импульса. На вставке схематично показана геометрия образца и электрическая схема измерения

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.266

СТРУКТУРА ОБЪЕМА И ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ FE

Язовских К.А.[1], Ломаева С.Ф.[1], Сюгаев А.В.[1], Маратканова А.Н.[1], Шаков А.А.[1], Коныгин Г.Н.[1], Петров Д.А.[2]

[1]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск, Россия,
[2] Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, г. Москва, Россия,
k.yazovskikh@bk.ru

Композиционные радиопоглощающие материалы используются для защиты от электромагнитных помех в решении многих актуальных задач [1]. Перспективными наполнителями, позволяющими существенно расширить диапазон рабочих частот, являются порошки на основе железа и его соединений [2,3]. С точки зрения эксплуатационных характеристик композита важно повысить коррозионную устойчивость железосодержащего наполнителя. Предлагаемый в работе подход использует высокоэнергетический механический размол порошков на основе железа в жидких органических средах для модификации их поверхности и, как следствие, повышения коррозионной стойкости. В результате такой обработки частицы порошка приобретают форму тонких пластинок (толщиной в среднем 0.2-0.6 μm), что повышает их магнитную проницаемость по сравнению с камневидными и сферическими частицами [4]. Пластинчатая форма размолотых наполнителей в сочетании с их высокой дисперсностью позволяет снизить удельный вес композита, что является важным требованием, предъявляемым к данным материалам.

В работе рассматриваются три серии образцов нанокристаллических порошков на основе железа, полученных размолом в шаровых планетарных мельницах Fritsch: железа карбонильного; сплава Fe85.9Si8.6Al5.5 и железа карбонильного с добавлением 20 об.% SiO2 (кварц). В качестве среды размола использовали растворы фенилантраниловой, стеариновой и перфторнонановой кислот. Целью такой обработки является создание на поверхности частиц тонких органических и/или неорганических слоев, которые стабилизируют металлическую частицу и предотвращают ее дальнейшее окисление.

Структурное состояние образцов и состав поверхностных слоев были исследованы методами рентгеноструктурного анализа, мессбауэровской, РФЭ и ИК спектроскопии, также проведено испытание коррозионной стойкости порошковых образцов. Определена сверхвысокочастотная магнитная проницаемость образцов по результатам измерений частотных зависимостей эффективных материальных параметров (ε и μ) композитов, наполненных полученными порошками.

Показано, что наиболее эффективно использование в качестве сред размола растворов поверхностно-активных веществ и/или ингибиторов коррозии, химически взаимодействующих с поверхностью порошков.

Работа выполнена в рамках ГЗ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 121030100003-7) с использованием оборудования ЦКП "Поверхность и новые материалы" УдмФИЦ УрО РАН.

1. Stergiou Ch., Koledintseva M., Rozanov K.N. // In book: Hybrid Polymer Composite Materials. – 2017. – P. 53-106.
2. Bhattacharyya R., Roy S., Prakash O. et al. // SN Appl. Sci. - 2019. – V. 38.
3. Shah A., Wang Y., Huang H. et al. // Compos. Struct. – 2015. – V. 131. – P. 1132-1141.
4. Li W., Cai H., Kang Y. et al. // Acta Materialia. – 2019. – V. 167. – P. 267-274.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.267

INTERACTION OF A NÉEL-TYPE SKYRMION AND A SUPERCONDUCTING VORTEX

E. S. Andriyakhina[1, 2] and I. S. Burmistrov [2, 3]
[1]*Moscow Institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudnyi, Moscow Region, Russia*
[2]*L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Semenova 1-a, 142432 Chernogolovka, Russia*
[3]*Laboratory for Condensed Matter Physics, National Research University Higher School of Economics, 101000 Moscow, Russia*

Superconductor–ferromagnet heterostructures hosting vortices and skyrmions are new area of an interplay between superconductivity and magnetism. We study an interaction of a Néel–type skyrmion and a Pearl vortex in thin heterostructures due to stray fields. Surprisingly, we find that it can be energetically favorable for the Pearl vortex to be situated at some nonzero distance from the center of the Néel–type skyrmion. The presence of a vortex–antivortex pair is found to result in increase of the skyrmion radius. Our theory predicts that a spontaneous generation of a vortex–anti-vortex pair is possible under some conditions in the presence of a Néel–type skyrmion.

References:

1. E. S. Andriyakhina and I. S. Burmistrov, "Interaction of a N eel-type skyrmion with a superconducting vortex", Phys. Rev. B,103, 174519 (2021),
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.174519

Acknowledgements:

The work was funded in part by Russian Science Foundation under the grant No. 21-42-04410.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.268

СВОЙСТВА ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ ДЕЛЬТА-БАРЬЕРОМ

Беспалов А.А.

Институт физики микроструктур РАН,
г. Нижний Новгород, Россия, bespalovaa@gmail.com

В работе теоретически исследованы свойства коротких джозефсоновских контактов, содержащих ферромагнитную прослойку, которая моделируется как дельта барьер, имеющий электрический потенциал и обменное поле. Ранее в рамках подобной модели было показано [1], что при определённых параметрах ферромагнетика равновесная разность фаз между сверхпроводящими берегами контакта равна не нулю, а пи – образуется так называемый пи-контакт. В настоящей работе рассчитан джозефсоновский ток одно-, двух- и трёхмерного контакта при температуре, близкой к температуре сверхпроводящего перехода T_c, и при нулевой температуре. Определены параметры, при которых существует пи-контакт. Кроме того, для трёхмерного контакта рассчитана локальная подщелевая электронная плотность состояний, которая может быть измерена методом туннельной спектроскопии. Вблизи температуры T_c ток-фазовая характеристика синусоидальная. Зависимость критического тока от параметров контакта при этом представлена на рис. 1.

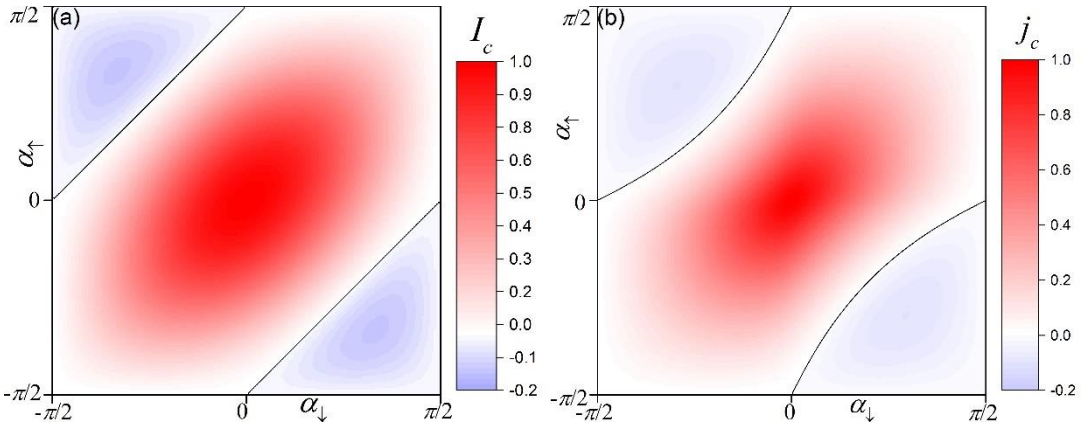


Рис. 1. Зависимости критического тока одномерного джозефсоновского контакта (I_c) и критической плотности тока трёхмерного контакта (j_c) от фаз рассеяния электрона со спином вверх ($\alpha_\uparrow$) и вниз ($\alpha_\downarrow$) при нормальном падении на ферромагнитный барьер. Ток нормирован на максимальное значение, соответствующее отсутствующему барьеру. Чёрные линии разделяют области, где равновесная разность фаз между сверхпроводящими берегами равна нулю и пи.

При нулевой температуре ток-фазовая характеристика может быть сильно не синусоидальной. Тогда при некоторых параметрах ферромагнетика оказывается, что состояния с разностью между сверхпроводящими берегами, равной нулю и пи, могут одновременно соответствовать локальным минимумам свободной энергии. Таким образом, на фазовой диаграмме появляются области с метастабильными состояниями.

Благодарности.
Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 20-12-00053.

1. Y. Tanaka, S. Kashiwaya // Physica C. – 1997. – T 274. C. – 357-363.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.269

ЯМР ^{11}B И ^{89}Y В СВЕРХПРОВОДНИКЕ YB_6.

О. М. Вяселев[1], А. А. Гиппиус[2,3], Н. Е. Случанко[4], Н. Ю. Шицевалова[5], В. Б. Филиппов[5]

[1] *ИФТТ РАН, Черноголовка, vyasel@issp.ac.ru*

[2]*Физический факультет МГУ им.Ломоносов, Москва, gippius@mail.ru*

[3]*ФИАН, Москва, gippius@mail.ru*

[4]*ИОФ РАН, Москва, nes@lt.gpi.ru*

[5]*ИПМ НАНУ, Киев, Украина*

Методом ЯМР на ядрах 11B и 89Y исследовано два поликристаллических образца сверхпроводника YB6 с TC = 7,4 K и 4,2 K, аналогичных образцам “№1” и “№4” из работы [1]. Образцы получены измельчением кристаллов, выращенных с различными весовыми концентрациями бора и иттрия в исходном составе. Основной вопрос исследования — поиск механизма, ответственного за изменение сверхпроводящих свойств данной системы.

Спектры ЯМР изотопа 11B (спин 3/2) неизменны во всём температурном интервале 6-300 K, практически неразличимы для двух изученных образцов YB6 и представляют собой характерную ‘двугорбую’ линию центрального перехода (1/2↔ −1/2) и сателлиты (переходы ±3/2↔ ±1/2), отстоящие от центрального перехода на ±300 кГц. Качественно и количественно они сходны со спектрами 11B других гексаборидов (LaB6, SrB6, YbB6, BaB6) [2]. Наши измерения указывают на то, что форма линии центрального перехода 11B обусловлена диполь-дипольными взаимодействиями, а не наличием каких бы то ни было неоднородностей в подрешётке бора. Сдвиг линии 11B не превышает 10-20ppm.

Скорость спин-решёточной релаксации 11B, 11T1-1, крайне низка в обоих образцах. Температурная зависимость 11T1-1 при T > 50 K имеет вид 11T1-1 = $\alpha+\beta T$ с α = 0,014±0,001 с−1, β=2,3×10−4 и 2,7×10−4(с·K)−1 для образцов с TC=4,2 и 7,5 K. Эти данные подтверждают выводы расчётов зонной структуры [3] о низкой плотности состояний электронов проводимости на позициях бора.

Резонансная линия 89Y (спин 1/2) в обоих образцах представляет собой безликий симметричный пик шириной ~1,6 кГц, форма и ширина которого не зависят от температуры. Позиция пика в образце с TC =7,5 K при всех температурах на ~20ppm выше, чем в образце с TC =4,2 K. Скорость спин-решёточной релаксации 89Y, 89T1-1, линейна по T: 89(T1T)-1 = 0,0014 и 0,0017 (с·K)−1 в образцах с TC=4,2 и 7,5 K.

Однородная магнитная восприимчивость, измеренная в двух исследованных образцах, показала, что образец с более высоким TC имеет больший температурно-независимый вклад. Количественный анализ позволил выделить спиновую часть сдвига линии иттрия, Ks, и построить температурную зависимость ‘Корринговской’ величины T1TKs2. С другой стороны, 89(T1T) −1, линейно связанная с квадратом плотности состояний, больше у образца с более высоким TC. Изменение 89(T1T)−1 и соответствующее изменение плотности состояний, согласно теории БКШ, количественно согласуется с наблюдаемым изменением TC, с учётом значения температуры Дебая 1160 K, выведенной в работе [1] для аналогичных образцов.

1. N.Sluchanko *et al.*// Phys. Rev. B. — 2017. — T. 96. — №14. — C. 144501.
2. J.L.Gavilano *et al.*//, Phys. Rev. B. — 2001. — T. 63. — №14. — C. 140410(R); J.L.Gavilano *et al.*//, Physica B. — 2003. — T. 329–333. — №2. — C. 570-571; Sh.Mushkolaj *et al.*//, Acta Phys. Pol. B. — 2003. —T. 34. — №2. — C. 1537-1540.
3. B.Jäger *et al.*//, J. Alloy. Compd. — 2004 — T. 383. — №1-2. — C. 232–238.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.270

ЭФФЕКТИВНЫЙ G-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ, ИЗМЕРЯЕМЫЙ ПО МАГНИТНЫМ КВАНТОВЫМ ОСЦИЛЛЯЦИЯМ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Григорьев П.Д.[1,2], Рамазашвили Р.[3], Карцовник М.В.[4]

[1] *L.D. Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka 142432, Russia*
[2] *National University of Science and Technology "MISiS", Moscow 119049, Russia*
[3] *Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France*
[4] *Walther-Meißner-Institut, D-85748 Garching, Germany,* ivanov@maul.ru

Используя симметрийные аргументы показано [1], что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Экспериментальное исследование этого эффекта проводится в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника κ-(BETS)2FeBr4 не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова-де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спину, предсказанное для антиферромагнитных проводников. Аналогично, мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова-де Гааза в оптимально легированном электронами купрате Nd2−xCexCuO4. Это указывает на наличие неелевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

Обнаруженный эффект обнуления эффективного g-фактора электронов происходит из-за его сильной зависимости от импульса и даже смены знака на границе магнитной зоны Брюллюэна, образованной антиферромагнитным упорядочением. Наблюдаемый эффект впервые экспериментально демонстрирует так называемое зеемановское спин-орбитальное взаимодействие, которое оказывается намного сильнее обычного вблизи границы магнитной зоны Брюллюэна.

Работа поддержана РФФИ № 21-52-12027, 19-02-01000 и 21-52-12043.

2. R. Ramazashvili, P.D. Grigoriev, T. Helm, F. Kollmannsberger, M. Kunz, W. Biberacher, E. Kampert, H. Fujiwara, A. Erb, J. Wosnitza, R. Gross, M.V. Kartsovnik// npj Quantum Materials – 2021. – T. 6, C. 11-18.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.271

МИКРОСТРУКТУРА, МАГНЕТИЗМ И СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ ПАЛЛАДИЯ С ИМПЛАНТИРОВАННОЙ ПРИМЕСЬЮ 3d-ЭЛЕМЕНТОВ

Гумаров А.И.[1,2], Янилкин И.В.[1,2], Юсупов Р.В.[1], Столяров В.С.[1,3], Валеев В.Ф.[2], Тагиров Л.Р.[1,2], Хайбуллин Р.И.[2]

[1)]Казанский федеральный университет, Казань, Россия, amir@gumarov.ru
[2)]Казанский физико-технический институт им. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия
[3)]Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

Сегодня, в условиях исчерпания потенциала развития полупроводниковых технологий, задача создания базовых элементов для быстрой одноквантовой логики важна и актуальна. В частности, для ее решения активно исследуются магнитные джозефсоновские переходы на основе структур сверхпроводник-ферромагнетик-сверхпроводник (SFS-структуры), где в качестве сверхпроводящего S-слоя используются Pb, Nb, VN, а в качестве ферромагнитного F-слоя предлагается использовать слаборазбавленный ферромагнитный сплав Pd1-xFex ($x \leq 0.1\%$) нанометровой толщины [1]. Обычно такие сплавы получают методом магнетронного распыления [2] или молекулярно-лучевой эпитаксии [3]. Однако, ионная имплантация также является эффективным методом разбавления матрицы палладия магнитной примесью [4] и, как показывают наши недавние исследования, весьма перспективным для получения новых наноструктурированных материалов с уникальными магнитными характеристиками.

Мы провели имплантацию ионов 3d-металлов (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) с энергией 40 кэВ и дозами в диапазоне $(0.5\text{-}3.0)\cdot 10^{16}$ ион/см2 в эпитаксиальные пленки Pd различной толщины (40-80 нм) для индуцирования в них магнетизма и исследования его зависимостей от концентрации и типа внедряемой примеси, а также последующего отжига в условиях высокого вакуума. Методами дифракции медленных электронов и рентгеноструктурного анализа была исследована кристаллическая структура пленок. Концентрация и профили распределения атомов внедренных примесей по глубине были получены методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с использованием методики ионного травления (послойного анализа). Магнитные свойства изучены методами вибрационной магнитометрии и ферромагнитного резонанса в широком интервале температур, в различной геометрии измерений. Показано влияние дозы имплантируемой примеси на температуру ферромагнитного упорядочения. В пленках палладия с имплантированной примесью железа обнаружен спинодальный распад иформирование многофазной магнитной системы. Выявлено влияние последующего термического отжига на температуру перехода T_C. Проведен сравнительный анализ полученных магнитных характеристик.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 20-02-00981 а) с использованием оборудования ФЦКП ФХИ КФУ.

1. T.I. Larkin *et al*. // Appl. Phys. Lett. 2012. V.100. P.222601.
2. Л.С. Успенская и др. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т.97, Вып.3. С.176-179.
3. A. Esmaeili *et al*. // Thin Solid Films. 2019. V.669. P.338-344.
4. M. Hitzfeld *et al*. // Phys. Rev. B. 1984. V.29, N.9. P.5023-5030.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.272

THEORY OF MAGNETIC PHASES IN EU BASED FERROMAGNETIC SUPERCONDUCTORS

Devizorova Zh.A., Mironov S.V, Buzdin A.I.

Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia,
DevizorovaZhanna@gmail.com
Institute for Physics of Microstructures Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russia
University Bordeaux, LOMA UMR-CNRS 5798, Talence Cedex, France

We present the theory of the non-uniform magnetic phases in easy-axis ferromagnetic superconductors with the dominant electromagnetic mechanism of interaction between superconductivity and ferromagnetism and superconducting critical temperature substantially exceeding the ferromagnetic transition temperature. [Zh. Devizorova, S. Mironov, A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. 122, 117002 (2019)]. We demonstrate how the initial sinusoidal magnetic structure smoothly transforms into a solitonlike domain one with decrease of the temperature. The size of the domains appears to be of the order of the London penetration depth. We also calculate the parameters of the first order phase transition into the vortex state, which may occur upon further lowering the temperature. The size of the domains in the vortex state is basically the same as in usual ferromagnet. Thus, the transition into the vortex state is accompanied by the increase of the magnetic structure period. At the same time, we predict that the domain walls should generate the set of vortices perpendicular to the ones in the domains. The results qualitatively describe the magnetic structures recently observed in P-doped EuFe2As2 compound [V. S. Stolyarov et al., Sci. Adv. 4, eaat1061 (2018)].

We also propose the possible scenario of the appearance of the short-period (with the period of the order of several lattice parameters) helicoidal magnetic structure recently observed in EuRbFe4As4 compound [K. Iida et al., Phys. Rev. B 100, 014506 (2019)]. We argue that this structure may appear due to the presence of superconductivity [Zh. Devizorova, A. Buzdin, Phys. Rev. B 100, 104523 (2019)]. In spite of EuFe2As2 and EuRbFe4As4 seems to be very similar, in the later one the main mechanism between superconductivity and ferromagnetism seems to be the exchange one. This results in the appearance of the magnetic structure with the period less than the superconducting coherence length.

Zh.D. acknowledges the funding from Russian Presidential Scholarship SP-5551.2021.5.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.273

ВОЗМОЖНОСТЬ УПРАВЛЕНИЯ СПИНОВЫМ КЛАПАНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

Камашев А.А., Леонтьев А.В., Гарифуллин И.А., Мамин Р.Ф.

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия, kamandi@mail.ru

Сверхпроводящая спинтроника имеет очевидные перспективы практического применения и поэтому вызывает огромный интерес во всем мире. Одним из ключевых элементов сверхпроводящей спинтроники может оказаться сверхпроводящий спиновый клапан. Сверхпроводящий спиновый клапан представляет собой слоистую тонкопленочную структуру, состоящую из одного сверхпроводящего (С) слоя и двух ферромагнитных (Ф) слоев. Сверхпроводящий ток, протекающий через эту конструкцию, может быть включен или выключен путем изменения направления намагниченности в одном из ферромагнитных слоев при приложении небольшого магнитного поля. Последние работы нашей группы [1] и исследования других групп [2,3] показывают, что максимальные величины эффектов сверхпроводящего спинового клапана были получены при использовании достаточно больших магнитных полей (2.5-10 кЭ). Такие сильные магнитные поля, накладывают ограничения для внедрения сверхпроводящего спинового клапана в логистику современной спинтроники.

Мы разрабатываем принципиально новую возможность управления сверхпроводящим спиновым клапаном за счет воздействия внешнего электрического поля. Эту задачу мы решаем путем использования в конструкции сверхпроводящего спинового клапана сегнетоэлектрика в качестве функциональной подложки. Изменение направления вектора намагниченности в одном из Ф-слоев будет происходить за счет магнитоупругого эффекта, вызванной деформацией Ф-слоя. Деформация генерируется сегнетоэлектрической подложкой под действием внешнего электрического поля. Таким образом, мы сможем изменять эффективную температуру перехода в сверхпроводящее состояние в С-слое. В результате, состояние сверхпроводящего спинового клапана будет контролироваться электрическим полем.

Мы приготовили гетеростуктуру, напылив пленку железа на сегнетоэлектрическую подложку ниобата лития. Далее мы исследуем возможность переориентации направления намагниченности ферромагнитного слоя при помощи приложения электрического поля к сегнетоэлектрической подложке. Проведены эксперименты по изменению ориентации намагниченности ферромагнитного слоя при приложении электрического поля к сегнетоэлектрической подложке ниобата лития. Методом эффекта Керра удалось зарегистрировать изменение ориентации намагниченности ферромагнитного слоя при приложении внешнего электрического напряжения от 100 до 200 В.

Таким образом, можно предположить, что цель по созданию сверхпроводящего спинового клапана, управляемого электрическим полем, реализуема.

1. A. Kamashev, N. Garif'yanov, A. Validov et al., *Phys. Rev. B* **100**, 134511 (2019).
2. Y. Gu, G. B. Halász, J. W. A. Robinson, and M. G. Blamire, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 067201 (2015).
3. A. Singh, S. Voltan, K. Lahabi, and J. Aarts, *Phys. Rev. X* **5**, 021019 (2015).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.274

МАГНИТНЫЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Л.Н. Карелина[1], Ш.А. Эркенов[1,2], Р.А. Оганнисян[2], В.И. Чичков[3], И.А. Головчанский[2,3], В.В. Больгинов[1]

[1]Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Моск. обл., ул. Академика Осипьяна д.2, 142432, Россия, lkarelina@issp.ac.ru
[2]Московский Физико-Технический институт, г. Долгопрудный, Моск. обл., Институтский пер. 9, 141701, Россия;
[3]Национальный Исследовательский Технологический Университет МИСиС, Москва, Ленинский просп. 4, 119049, Россия

В работе рассмотрены возможности совершенствования сверхпроводящих элементов памяти на основе многослойных джозефсоновских контактов с композитным барьером, включающим туннельный (I) и ферромагнитный (F) слои. Логическое состояние определяется перемагничиванием ферромагнитного слоя, а туннельный барьер обеспечивает частотную совместимость с элементами быстрой одноквантовой логики (БОК). Преимуществом такой памяти является меньший размер по сравнению с интерферометрическими структурами, хранящими квант магнитного потока. Для обеспечения технологической совместимости с БОК-технологией мы используем ниобий в качестве материала для сверхпроводящих берегов, оксид алюминия для создания туннельного барьера и сильноразбавленный сплав Pd0.99Fe0.01 в качестве ферромагнетика. Включение прослойки сверхпроводящего ниобия толщиной 10 нм между туннельным и ферромагнитным слоями (SIsFS-контакт) увеличивает критический ток и характеристическую частоту контакта [1]. В настоящее время решается задача масштабирования SIsFS-элементов до субмикронных размеров. Главная проблема связана со считыванием логического значения, поскольку величина напряжения в резистивном состоянии определяется потоком намагниченности через сечение контакта. Нами представлено изготовление и исследование прямоугольных SIsFS-контактов, в которых логическое состояние определяется ориентацией намагниченности по отношению к длинной стороне. Численное моделирование показывает, что короткая сторона может быть уменьшена до субмикронных размеров (около 300 нм) при сохранении функциональности.

Возможной альтернативой является использование FsF-гетероструктур, в которых взаимная ориентация намагниченностей ферромагнитных слоев влияет на сверхпроводящий параметр порядка в разделительном s-слое. Мы обнаружили, что заметные магниторезистивные явления имеют место даже при использовании крайне слабого ферромагнетика Pd0.99Fe0.01. Например, в области температуры сверхпроводящего перехода при коэрцитивном магнитном поле обнаружены отрицательные пики магнитосопротивления с эффектом памяти. Показано также, что ниже критической температуры изменение намагниченности слоев позволяет управлять критическим током образца. Продемонстрировано, что FsF-микромостики PdFe-Nb-PdFe являются логическими элементами, способными переключаться между уровнями напряжения порядка сотен микровольт.

Благодарности. Работа представлена при поддержке проекта РФФИ 19-32-90162.

3. T. I. Larkin et al., Appl. Phys. Lett., vol. 100, no. 22, pp. 222601, 2012.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.275

СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ МЕЗА-ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С ПРОСЛОЙКОЙ ИЗ ИРИДАТА С СИЛЬНЫМ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Константинян К. И.,[1#] Овсянников Г. А.,[1] Петржик А. М.,[1] Кислинский Ю. В.[1], Шадрин А. В.[1,2], Christiani G.[3], Logvenov G.[3]

[1]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук Москва, 125009, Россия.*
[2]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный 141701, Московская область, Россия.*
[3]*Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart 70569, Germany.*
[#]*karen@hitech.cplire.ru*

Сверхпроводниковые структуры с прослойкой, в которых обменное взаимодействие играет определяющую роль, активно исследуются уже более двух десятилетий. В то же время изучение структур с выраженным спин-орбитальным взаимодействием находится только лишь на начальном этапе. Недавно нами были получены первые экспериментальные данные [1, 2] по сверхпроводящим меза-гетероструктурам Nb/Au/Sr2IrO4/YBa2Cu3Ox, у которых прослойка из иридата стронция Sr2IrO4 обладает сильным спин орбитальным взаимодействием (СОВ) с энергией ESO~0.4 eV. Наличие эффекта Джозефсона было подтверждено измерениями вольт-амперных характеристик под воздействием постоянного магнитного поля H и СВЧ облучения.

В данном сообщении будет обсуждаться влияние СОВ на магнитно-полевые зависимости IC(H) и асимметрию амплитуд критического тока IC+≠IC-, наблюдаемую при смене полярности задания электрического тока, а также отклонение от эквидистантности осциллирующих с магнитным полем ступеней Фиске. При этом отметим, что для ступеней Шапиро эквидистантность по напряжению и соответствие джозефсоновскому соотношению частота/напряжение выполнялось с высокой точностью. Также отметим, при смене направления воздействия магнитного поля от параллельного к перпендикулярному значения напряжений ступеней Фиске оставались неизменными.

Работа выполнена в рамках государственного задания и частично поддержана РФФИ (проект 19-07-00274).

1. Petrzhik A.M., Constantinian K.Y., Ovsyannikov G.A., Zaitsev A.V., Shadrin A.V., Grishin A.S., Kislinski Yu.V., Cristiani,G., and Logvenov G. // Phys. Rev. B. – 2019. – V. 100. – 024501.
2. Constantinian K.Y., Petrzhik A.M., Ovsyannikov G.A., Shadrin A.V., Kislinskii Yu.V., Cristiani G., Logvenov G. // Journal of Physics Conference Series. – 2020. – V. 1559. –012023.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.276

GEOMETRY CONTROLLED JOSEPHSON DIODE BASED ON CURVED PROXIMITIZED NANOWIRES

Kopasov A.A.[1], Kutlin A.G.[2], Mel'nikov A.S.[1,3]

Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences, 603950 Nizhny Novgorod, GSP-105, Russia
Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, D-01187 Dresden, Germany
Sirius University of Science and Technology, 1 Olympic Ave, 354340 Sochi, Russia
kopasov@ipmras.ru

It has been recently predicted that the Josephson junctions formed by proximitized semiconducting nanowires connected with an offset angle should exhibit the anomalous Josephson effect [1-3] which is characterized by the appearance of a spontaneous phase shift in the ground state of such junctions (the so-called anomalous phase). However, the analysis of this effect has been restricted to the limit of large Zeeman fields so that the proximitized nanowire is in the topologically nontrivial phase and realizes the spinless p-wave superconductivity. The main goal of our work is to study the key features of the Josephson transport through a curved semiconducting nanowire within the full range of the Zeeman fields covering both topologically trivial and nontrivial regions of the phase diagram.

Based on numerical simulations and analytical estimates within the framework of the Bogoliubov – de Gennes equations we reveal the magnetic field driven crossover from conventional to anomalous Josephson effect as the system undergoes the topological phase transition. The distinctive features of the Josephson effect are studied for two inequivalent orientations of the spin splitting field. First, we consider the case when a curved nanowire junction is placed in the external magnetic field directed perpendicular to the substrate. We find that in this regime the anomalous phase shift vanishes for small Zeeman fields and saturates at the geometrical offset angle for large fields in the topologically nontrivial phase. We have also considered the possibility of a textured profile of the spin splitting field directed parallel and antiparallel to the nanowire axis in different parts of the system. We show that in this regime the crossover region extends far into the topologically nontrivial phase, so that the anomalous phase shift doesn't saturate at the geometrical offset angle even for rather large spin splitting fields.

The analysis of the behavior of the anomalous phase demonstrates that this phase can be tuned by the spin splitting field and, thus, the curved nanowire junctions may realize a tunable phase battery. We find that for both orientations of the spin splitting field the presence of the above-mentioned crossover reveals itself in the superconducting diode effect: the magnitude of the critical current depends on the direction of the applied current.

Acknowledgements.

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research under Grant No. 19-31-51019. The work involving numerical calculations for the case of a textured spin splitting field was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 20-12-00053).

1. Ying Z.-J., Cuoco M., Gentile P., Ortix C. // 16th International Superconducting Electronics Conference (ISEC) – 2017. – pp. – 1-3.
2. Spanslatt C. // Phys. Rev. B – 2018. – 98. – 054508.
3. Kutlin A.G., Mel'nikov A.S. // Phys. Rev. B – 2020. – 101. – 045418.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.277

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Путилов А. В[1,*], Девизорова Ж. А.[2], Чайкин И.[2,3], Миронов С. В.[1], Буздин А. И.[4]

[1]Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород,
[2]Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный,
[3]Институт радиотехники и электроники им. Котельникова РАН, г. Москва,
[4]University Bordeaux, Talence Cedex, France
*alputilov@mail.ru

В работе рассматриваются особенности сверхпроводящего фазового перехода в тонких пленках сверхпроводника (S), покрытого слоем ферромагнитного изолятора (F). Ранее было показано, что спин-орбитальное взаимодействие (SOC) типа Рашбы на S/F границе приводит к возникновению спонтанного сверхпроводящего тока, текущего вдоль S/F границы в слое атомной толщины и экранирующего мейсснеровского тока в объеме сверхпроводника [1]. При этом в случае, когда толщина слоя сверхпроводника L существенно превышает длину когерентности ξ и лондоновскую глубину λ, спонтанные токи не оказывают влияния на критическую температуру и критический ток распаривания S/F структуры. В данной работе выполнены расчеты в рамках теории Гинзбурга-Ландау и показано, что при $L \ll \xi$ спонтанные токи и соответствующий скачок магнитного поля на S/F границе ΔH приводит к повышению критической температуры системы и к анизотропии критического тока распаривания (для сверхпроводников II рода).

Для сверхпроводника I рода с толщиной L, удовлетворяющей условию $\lambda \ll L \ll \xi$, показано, что за счет SOC критическая температура Tc превышает критическую температуру изолированной пленки сверхпроводника Tc0. Во внешнем магнитном поле H0, направленном в плоскости слоев, выражение для критической температуры имеет вид: Tc/Tc0=1+(1/8)(λ0/L)2(ΔH/Hcm)4±2|H0|/ΔH. Здесь знак «+/-» соответствует параллельной / антипараллельной взаимной ориентации H0 и обменного поля ферромагнетика h (ε>0), Hcm – термодинамическое критическое поле.

В случае сверхпроводника II рода при анализе сверхпроводящего фазового перехода необходимо учитывать неоднородное распределение параметра порядка в направлении поперек слоев. Для структур с толщиной $L \ll \xi \ll \lambda$ критическая температура превышает Tc0 на величину Tc/Tc0=1+(1/2)(λ0/L)2(ΔH/Hcm)2. Также показано, что для S/F структур со сверхпроводником II рода величина критического тока распаривания Jc в плоскости слоев зависит от взаимной ориентации внешнего тока и обменного поля ферромагнетика: Jc=Jc0(1± ΔHL√τ/(2√6Hcmλ0). Здесь знак «+/-» соответствует направлению тока по/против [n×h], где n - нормально к S/F границе, направленная из F в S слой, τ=1-Tc/Tc0, Jco – критический ток распаривания для изолированной сверхпроводящей пленки толщины L. Таким образом, должен наблюдаться диодный эффект - критический ток в противоположных направлениях оказывается различным. Данный эффект может быть использован для разработки экспериментальной методики детектирования спонтанных токов в S/F структурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-72-10027). Ж.А.Д. благодарит за финансовую поддержку российский президентский грант SP-5551.2021.5

1. S. Mironov and A. Buzdin // Phys. Rev. Lett. 118, 077001 (2017).
2. Zh. Devizorova, A. V. Putilov, I. Chaikin, S. V. Mironov, A. I. Buzdin // Phys. Rev. B 103, 064504 (2021).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.278

КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА ОДИНОЧНОГО ФЛАКСОНА В ЦЕПОЧКЕ ПАРАЛЛЕЛЬНО РАСПОЛОЖЕННЫХ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ

Сеидов С. С., Фистуль М. В.

НИТУ "МИСиС", Москва, alikseidov@yandex.ru

В работе изучена квантовая динамика одиночного магнитного флаксона в цепочке параллельно расположенных джозефсоновских контактов с высокой кинетической индуктивностью. Магнитный флаксон представляет собой скачок фаз джозефсоновских контактов в цепочке на 2π, так называемый кинк. Высокая кинетическая индуктивность позволяет уменьшить размер флаксона, сделав его меньше размера одной ячейки в цепочке.

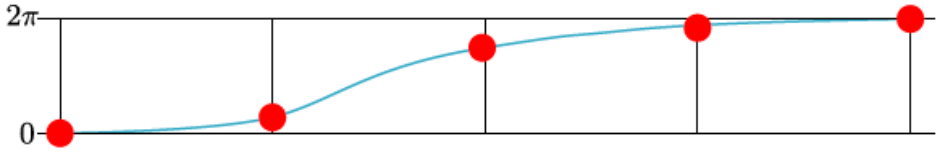


Рис. 1. Конфигурация фаз джозефсоновских контактов во флаксоне

Исследованы две конфигурации цепочки: линейная и кольцевая. В линейном случае к системе приложен ток, который приводит к возникновению блоховских осцилляций флаксона. К кольцевой конфигурации приложено напряжение, благодаря которому в системе наблюдается эффект Ааронова-Кашера.

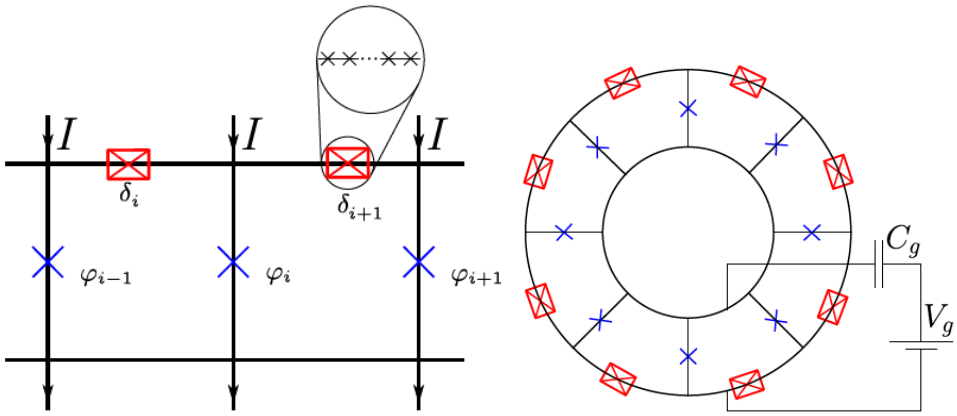


Рис 2. Линейная и кольцевая конфигурации цепочки

Динамика флаксона сведена к движению частицы в периодическом эффективном потенциале, минимумы которого соответствуют положению флаксона в различных ячейках цепочки. Это позволяет использовать развитый теоретический аппарат для описания динамики, в частности, блоховских осцилляций[1] и эффекта Ааронова-Кашера[2].

1. K. Likharev and A. Zorin, Theory of the bloch-wave oscillations in small josephson junctions, Journal of low temperature physics 59, 347 (1985).
2. J. R. Friedman and D. V. Averin, Aharonov-casher-effect suppression of macroscopic tunneling of magnetic flux, Physical review letters 88, 050403 (2002).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.279

НЕОДНОРОДНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ДОДЕКАБОРИДАХ $LU_XZR_{1-X}B_{12}$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

Азаревич А.А[1], Богач А.А.[1], Глушков В.В.[1], Демишев С.В.[1], Хорошилов А.Л.[1], Красиков К.М.[1], Шицевалова Н.Ю.[2], Филипов В.Б.[2], Габани С.[3], Флахбарт К.[3], Кузнецов А.В.[4], Гаврилкин С.Ю.[5], Мицен К.В.[5], Бланделл С.Дж.[6], Случанко Н.Е.[1]

[1]*Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Москва 119991, Россия*
[2]*Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАНУ, 03680 Киев, Украина*
[3]*Институт экспериментальной физики САН, 04001 Кошице, Словакия*
[4]*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*
[5]*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия,*
[6]*Физический факультет университета Оксфорда, Кларендонская Лаборатория, Оксфорд OX1 3PU, Великобритания,*
nes@lt.gpi.ru

Исследованы характеристики нормального и сверхпроводящего состояния (удельное сопротивление, коэффициент Холла, теплоемкость и намагниченность) модельных сильно коррелированных электронных систем LuxZr1-xB12 с кооперативной ян-теллеровской неустойчивостью жесткого ковалентного борного каркаса и динамическими зарядовыми страйпами. Показано, что эти металлы являются сверхпроводниками s-типа в грязном пределе с малой длиной свободного пробега носителей заряда l = 5 - 140 Å, в которых реализуется немонотонное изменение размера куперовской пары в диапазоне 450 - 4000 Å [1]. Найдено, что додекабориды ZrB12 и LuB12 являются сверхпроводниками I-рода, замещение Zr на Lu вызывает переход к сверхпроводимости II-рода, при этом параметр Гинзбурга-Ландау-Маки немонотонно меняется в пределах 0,65 ≤ κ1,2 ≤ 6. Приводятся аргументы в пользу двухщелевой сверхпроводимости в LuxZr1-xB12 со значениями щелей Δ1 ~ 14 K и Δ2 ~ 6-8 K, причем спаривание в верхней зоне соответствует условию сильной связи (λe-ph ~ 1), тогда как в нижней зоне реализуется предел слабой связи (λe-ph ~ 0.1 - 0.4).

В LuxZr1-xB12 выше Tc наблюдается псевдощель Δps-gap ~ 60- 110 K, величина которой определяется высотой барьера в двухъямном потенциале в окрестности тяжелого иона. Обсуждается также альтернативный сценарий анизотропной однозонной сверхпроводимости, в котором разрыв пары и анизотропия щели оказываются обусловленными динамическими зарядовыми страйпами. Анализируется происхождение уникальной поверхностной сверхпроводимости с характеристиками, превосходящими параметры, регистрируемые в объеме ZrB12 [1].

1. Azarevich A., Bogach A., Glushkov V., Demishev S., Khoroshilov A., Krasikov K., Voronov V., Shitsevalova N., Filipov V., Gabáni S., Flachbart K., Kuznetsov A., Gavrilkin S., Mitsen K., Blundell S. J., Sluchanko N.E.// Phys. Rev. B. – 2021. –V. 103. – № 10. – 104515(1-15).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.280

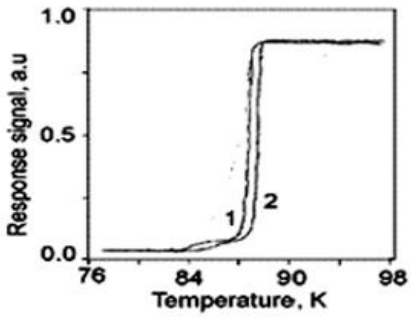
KINETICS OF MAGNETIZATION REVERSAL OF SUPERCONDUCTOR-FERROMAGNET HETEROSTRUCTURES IN LONGITUDINAL AND PERPENDICULAR MAGNETIC FIELDS

Uspenskaya L.S.,[1] Nurgaliev T.[2]

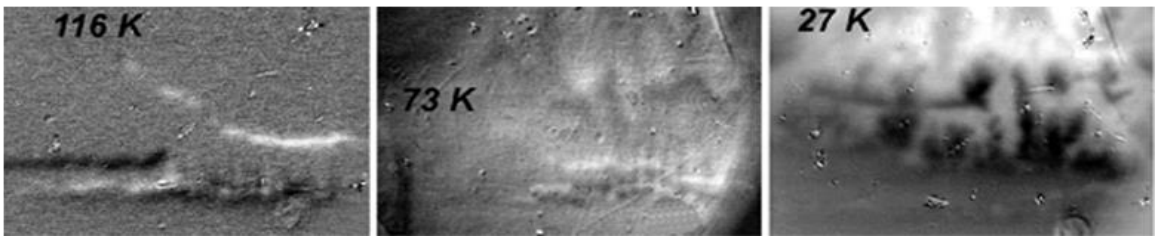
[1]*Institute of Solid State Physics RAS,*
Chernogolovka, Russia, uspenska@issp.ac.ru
[2] *Institute of Electronics BAS,*
Sofia, Bulgaria

The attractive idea to create artificial superconductor/ferromagnet heterostructures (SC/FM) for easy control of the superconductor properties by magnetic field is widely considered last decades. Of a special interest for applications are the HTSC/FM heterostructures, particularly the YBCO/LSMO, where the magnetization value of LSMO could be adjusted by doping, by variation of oxygen content, and magnetic domain structure could be controlled by reasonable magnetic field.

In this work we concentrate on the influence of manganite on the critical current and superconducting transition temperature of the heterostructure and its correlation with magnetization reversal of manganite under an in-plane and perpendicular magnetic field. The study of magnetization reversal is performed by the magneto-optic visualization technique at T down to 7 K. We found a striking transformation of the in-plane external field into a wave of alternating perpendicular flux, the particular features of which depended on the temperature and magnetic prehistory at temperature above superconducting transition. To shed light on the mechanism of the effect, we have investigated the magnetic domain pattern of manganite film and its transformations due to variation of temperature and application of the external field. The results are discussed taking into account the finite size of the hybrid structure and the magnetostatic field redistribution because of the superconductor vicinity.



The shift of the superconducting transition in YBCO/LSMO comparing with YBCO, and variation of kinetics of magnetization reversal in LSMO with temperature decrease because of the magnetic field screening by YBCO (T = 116, 73, and 27 K)



Acknowledgments. The study in performed at the ISSP RAS with financial support of the state task of ISSP RAS.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.281

КРИТИЧЕСКИЙ ТОК В ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК / НОРМАЛЬНЫЙ МЕТАЛЛ С БОЛЬШИМ ОТНОШЕНИЕМ НОРМАЛЬНЫХ ПРОВОДИМОСТЕЙ

Уставщиков С.С., Левичев М.Ю., Пашенькин И.Ю., Клушин А.М., Водолазов Д.Ю.

Институт Физики Микроструктур РАН,
г. Нижний Новгород, Россия, sergey@ipmras.ru

Токонесущая способность тонких "грязных" сверхпроводящих мостиков зачастую ограничена внутренними неоднородностями, а также краевыми и поверхностными дефектами. Основной вклад в подавление критического тока Ic дают неоднородности с пространственными масштабами сравнимыми с длиной когерентности ξ. В "грязных" сверхпроводниках малость ξ обусловдена малостью коэффициента диффузии (ξMoN ~ 6.5 nm, при D ~ 0.4 cm2/s), что делает ток распаривания Idep трудно достижимым в практических приложениях. Для тонкопленочных гибридных структур сверхпроводник (S) - нормальный металл (N) с большим коэффициентом диффузии DN / DS ~ 102 возможно большее приближение критического тока к току распаривания, за счет большой длины когерентности в нормальном металле ξN / ξS ~ √DN / √DS [1]. Этот эффект является следствием наведенной сверхпроводимости в слое нормального металла (с открытием минищели в спектре квазичастиц) за счет эффекта близости, ее большого вклада в сверхпроводящие свойства гибридной SN структуры и большей чувствительности к протекающему току, чем у базового сверхпроводника [2].

Экспериментально исследовались особенности электронного транспорта в мостиках полученных из тонкопленочных структур MoN / Cu с отношением проводимостей ρCu / ρMoN от 12 до 60 раз, и толщинами dMoN = 20 nm, dCu = 5 - 100 nm. Установлено, что (i) напыление металла существенно уменьшает пинниг вихрей, (ii) экспериментальные результаты имеют хорошее качественное соответствие модели входа вихрей управляемых краевым барьером [3], (iii) качественное соответствие эксперимента и расчета в рамках теории Узаделя при температуре 0.1 Tc показывает рост критического тока от ~0.4 Idep без металлического слоя до ~0.7 Idep в SN структуре, (iiii) приближение к току распаривания значительно усиливает нелинейные свойства, что важно для приложений, принцип действия которых базируется на зависимости кинетической индуктивности от протекающего тока. В дополнение, мы обнаружили, что в присутствии нормального слоя возрастает максимальная скорость вихрей в резистивном состоянии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №19-02-00528.
Использовалось оборудование ЦКП ИФМ РАН.

1. Ustavschikov S.S., Levichev M.Yu., Pashenkin I.Yu. *et al.* // SuST.- 2021. - v. 34, p. 015004
2. Vodolazov D.Yu., Aladyshkin A.Yu., Pestov E.E. *et al.* // SuST. - 2018. - v. 31, p. 115004
3. Maksimova G.M., Zhelezina N.V. and Maksimov I.L. // Europhys. Lett. - 2001. - v. 53, p. 639

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.282

ОСОБЕННОСТИ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННОГО НЕСОРАЗМЕРНОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СВЕРХПРОВОДНИКА κ-(BEDT-TTF)$_4$Hg$_{2.89}$Br$_8$

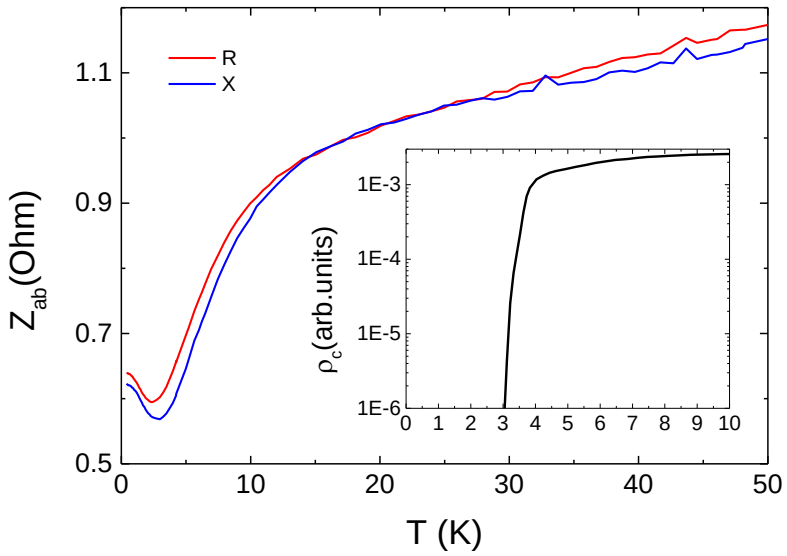
Шевчун А.Ф.[1], Бардин А.А.[2], Котов А.И.,[3] Шовкун Д.В.[1]
[1]*Институт Физики Твердого Тела РАН,*
[2]*Институт Проблем Технологии Микроэлектроники РАН,*
[3]*Институт Проблем Химической Физики РАН,*
г. Черноголовка, Россия, shevchun@issp.ac.ru

Весьма необычные результаты измерений динамической магнитной восприимчивости и поверхностного импеданса уникального органического сверхпроводника κ-(BEDT-TTF)$_4$Hg$_{2.89}$Br$_8$ (**κ-HgBr**), в котором сильные корреляции сосуществуют со слабым допированием, связанным с несоразмерностью решётки, указывают на глубокую физику процесса электронного транспорта требующую детального изучения. Монокристаллы **κ-HgBr** были выращены методом контролируемого тока. Исследования особенностей строения и подтверждение подлинности образцов были проведены методами дифрактометрии.

Сверхпроводящие свойства этого материала изучались несколькими методиками: были проведены измерения температурных зависимостей сопротивления поперек проводящих слоев, динамической магнитной восприимчивости и поверхностного импеданса в проводящих плоскостях.

Типичные результаты, полученные на наших образцах, приведены на представленных ниже графиках. Результаты измерений сопротивления и динамической магнитной восприимчивости на частоте 100 kHz продемонстрировали наличие сверхпроводящего состояния при температурах ниже T_c=3 K.

Результаты измерения температурной зависимость поверхностного импеданса Z(T)=R(T)+iX(T) нескольких образцов на частоте 28 ГГц в температурном интервале от 0.5 K до 50 K оказались необычными. У исследованных образцов при T<3 K не наблюдалось резкое изменение Z(T), а некоторые образцы при низкой температуре даже демонстрирует слабую “диэлектризацию”, как можно увидеть из рисунка.



Благодарности.

Работа частично выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН. Работа частично выполнена в рамках госзадания ИПХФ РАН № АААА-А19-119092390079-8.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.283

PHYSICAL PHENOMENA IN SFS Φ0 JOSEPHSON JUNCTIONS

Yu. M. Shukrinov[1,2], I. Rahmonov[1], A. Plecenik[3]

[1]*BLTP, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, 141980, Russia,* shukrinv@theor.jinr.ru.
[2]*Dubna State University, Dubna,* 141980*, Russia.*
[3]*Department of Experimental Physics, Comenius University, Bratislava, Slovakia*

This report is devoted to one of the most relevant areas of modern condensed matter physics - the anomalous Josephson effect, which consists in the appearance of a phase shift in a hybrid structure, leading to a finite superconducting current at zero phase difference [1,2]. We present the results of studying the magnetic dynamics along the current-voltage characteristic of the φ0 - junction and analysis of the spin dynamics in such junction [3]. The possibility of controlling the magnetic precession by the appearance of higher harmonics in the current-phase ratio, as well as the dc component of the current, which significantly increases near ferromagnetic resonance, are discussed [4] Interesting phenomena in the φ0 - junction relate to the dynamics of magnetization precession and also occur when exposed to external electromagnetic radiation. Magnetization reversal [5-7] and a resonance method for determination of intensity of spin-orbit interaction and Gilbert damping in φ_0 junction are also discussed.

Acknowledgements.
The work was partially funded by the RFBR, according to the project 20-37-70056. Numerical calculations have been done within the framework of the project 18-71-10095 of the Russian National Fund.

1. A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. **101**, 107005 (2008).
2. Yu. M. Shukrinov, Phys. Usp., (2021) (accepted, DOI: 10.3367/UFNe.2020.11.038894).
3. Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, and K. Sengupta, Phys. Rev. B **99**, 224513 (2019).
4. Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, and A. E. Botha., Low Temp. Phys. **46**, 932 (2020).
5. A. A. Mazanik, I.R. Rahmonov, A.E. Botha, and Yu.M. Shukrinov, Phys. Rev. Applied **14**, 014003 (2020).
6. I. V. Bobkova, A. M. Bobkov, I.R. Rahmonov, A.A. Mazanik, K. Sengupta, Yu.M. Shukrinov, Phys. Rev. B **102**, 134505 (2020).
7. Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, K. Sengupta and A. Buzdin, Applied Physics Letters, **110**, 182407, (2017).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.284

МИКРОМЕХАНИКА ДЕФЕКТОВ В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Романов А.Е.

Университет ИТМО
Санкт-Петербург, Россия, alexey.romanov@niuitmo.ru

Рассматриваются результаты расчетов упругих полей и энергий дислокаций и дисклинаций в 2D и 3D кристаллах с внутренними и внешними поверхностями раздела. Анализируются различные математические методы решения граничных задач теории упругости для дефектов. Найденные соотношения применяются для исследования устойчивости дислокаций и дисклинаций в современных функциональных материалах, обладающих внутренней структурой, например, тонкопленочных полупроводниковых гетероструктурах, нано- и микрочастицах, нанопроводах и т.д. Обсуждается, как наличие дефектов и связанных с ними упругих полей влияет на свойства современных функциональных материалов и характеристики электронных и оптоэлектронных устройств на их основе.

Представленные в доклады результаты подводят итог цикла исследований последних двух десятилетий и основываются на публикациях [1-10].

Благодарность. В 2019-2021 гг. исследования были поддержаны грантом РНФ 19-19-0061.

1. Romanov A.E. // Eur. J. Mech. A . – 2003. – v. 22. – No 5. – p. 727-741.
2. Kolesnikova A.L., Romanov A.E. // J. Appl. Mech. – 2004. – v. 71. – No 3. – p. 409-417.
3. Romanov A.E., Baker T.J., Nakamura S., Speck J.S. // J. Appl. Phys. – 2006. – v. 100. – No 2. – p. 023522 (1-10).
4. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. // Prog. Mater. Sci. – 2009. – v. 54. – No 6. – p. 740-769.
5. Romanov A.E., Young E.C., Wu F., Tyagi A., Gallinat C.S., DenBaars S.P., Nakamura S., Speck J.S. // J. Appl. Phys. – 2011. – v.109. – No 10. – p. 103552 (1-12).
6. Vlassov S., Polyakov B., Dorogin L.M., Vahtrus M., Mets M., Antsov M., Saar R., Romanov A.E, Lohmus A., Lohmus R. // Nano Letters. – 2014. – v.14. – No 9. – p. 5201-5205.
7. Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Orlova T.S., Hussainova I., Bougrov V.E., Valiev R.Z. // Carbon. – 2015. – v. 81. – No 1. – p. 223-231.
8. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Proskura A.V., Morozov N.F., Romanov A.E. // Int. J. Sol. Struct. – 2016. – v. 99. – No1. – p. 82-96.
9. Rozhkov M.A., Kolesnikova A.L., Yasnikov I.S., Romanov A.E. // Low Temp. Phys. – 2018. – vol. 44. – No 9. – p. 1171-1179.
10. Romanov A.E., Kolesnikova A.L,. Gutkin M.Yu, Dubrovski V.G. // Scripta Mat. – 2020. – v. 176. – No1. – p. 42-46.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.285

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ СЛУЧАЙНЫМИ ДЕФОРМАЦИЯМИ В КРИСТАЛЛАХ $LaAlO_3$, АКТИВИРОВАННЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ

Н.М. Абишев[1], К.Н. Болдырев[2], Б.З. Малкин[1], И.Э. Мумджи[1], С.И. Никитин[1], М.Н. Попова[2]

[1]*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, г. Казань*

[2]*Институт Спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк*

Кристаллы $LaAlO_3$ имеют широкое применение в качестве подложки для эпитаксиального роста кристаллов и синтеза тонкопленочных гетероструктур. При температуре T_S=813 K в кристаллах $LaAlO_3$ имеет место структурный переход из высокотемпературной кубической фазы в ромбоэдрическую, сопровождающийся формированием сегнетоэластических доменов с различными ориентациями тригональной оси симметрии. Исследования спектральных характеристик микроскопически неоднородных кристаллов являются актуальными задачами спектроскопии конденсированных сред.

В настоящей работе представлены результаты измерений оптических спектров поглощения и люминесценции высокого разрешения и селективной лазерной спектроскопии кристаллов $LaAlO_3$, активированных редкоземельными (РЗ) ионами (Ho^{3+}, Tm^{3+}, Pr^{3+}). Особый интерес представляют обнаруженные в измеренных спектрах линии с дублетной структурой. Мы предполагаем, что наблюдаемая тонкая структура и сильное неоднородное уширение линий обусловлено наличием в кристаллах алюмината лантана внутренних полей деформаций, индуцированных границами доменов и собственными точечными дефектами. Аналогичные профили спектральных линий наблюдались ранее в кристаллах различной структуры, содержащих РЗ ионы [1,2].

Анализ штарковской структуры спектров РЗ ионов был выполнен в рамках теории кристаллического поля. Операторы Гамильтона РЗ ионов в $LaAlO_3$, включающие операторы энергии свободного иона и энергию взаимодействия с кристаллическим полем, были построены и диагонализированы в пространстве состояний основной электронной конфигурации $4f^N$. Параметры кристаллического поля были вычислены в рамках модели обменных зарядов. Моделирование огибающих линий с дублетной структурой включало расчеты параметров электрон-деформационного взаимодействия с последующим усреднением спектральных распределений интенсивностей оптических переходов с функцией распределения случайных деформаций, обусловленных точечными дефектами либо доменными стенками.

Расчеты штарковской структуры мультиплетов и моделирование формы спектральных линий выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 19-32-90044).

1. N.M. Abishev, E.I. Baibekov, B.Z. Malkin, M.N. Popova, D.S. Pytalev, S.A. Klimin. Deformation Broadening and the Fine Structure of Spectral Lines in Optical Spectra of Dielectric Crystals Containing Rare-Earth Ions, Phys. Solid State 61, 795 (2019)

2. B.Z. Malkin, N.M. Abishev, E.I. Baibekov, D.S. Pytalev, K.N. Boldyrev, M.N. Popova, M. Bettinelli, Distribution function of random strains in elastically anisotropic continuum and defect strengths of impurity Tm^{3+} ions in crystals with the zircon structure, Phys. Rev. B 96, 014116 (2017)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.286

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНЫХ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛИНЕЙКИ ЛАЗЕРНЫХ ДИОДОВ ПУТЕМ РЕГИСТРАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ БЛИЖНЕГО ПОЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Апарников А.Н., Бурый Е.В., Орлов Н.Е., Шашурин В.Д.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия, alexander.aparnikov@gmail.com

Экспериментально зарегистрированы изображения ближнего поля излучения линейки лазерных диодов (ЛЛД) с длиной волны излучения 808 нм в квазинепрерывном режиме генерации в диапазоне токов инжекции от порогового значения до наступления деградации отдельных лазерных диодов (ЛД) в составе ЛЛД. На основании выполненного анализа распределения интенсивности ближнего поля излучения ЛЛД в направлении, перппендикулярном эпитаксиальным слоям, предложена система параметров, позволяющих получать вероятностную оценку предельного значения тока инжекции отдельных ЛД её в составе. При оптическом контроле поверхности ЛЛД после деградации ее параметров установлено, что отказ отдельных ЛД в большинстве случаев наступал вследствие явления катастрофической оптической деградации (КОД) полупрозрачного зеркала лазерного резонатора. Известно, что КОД является фактором, ограничивающим как предельное значение оптической мощности излучения мощных ЛД квазинепрерывного режима генерации, так и ресурс их работы. При этом существующие методы анализа КОД являются либо разрушающими, либо характеризуются значительной погрешностью прогнозирования момента наступления КОД [1].

Предложенная система параметров включает известный параметр количественной оценки неоднородности распределения интенсивности ближнего поля излучения в направлении, перппендикулярном эпитаксиальным слоям [2], а также дополнительно введенные параметры: отношение максимального и среднего значений интенсивности в распределении; параметр, учитывающий интенсивность излучения краевых ЛД. При прогнозировании выполняется разбиение ЛД на подгруппы в зависимости от получаемых значений указанных параметров. Таким образом, в результате регистрации изображения ближнего поля излучения на рабочем участке оптической ватт-амперной характеристики ЛЛД становится возможным прогнозирование значение тока инжекции, при котором наступит явление КОД отдельных ЛД в её составе. В совокупности с доступностью необходимого аппаратного инструментария, предложенная система параметров может стать основой метода получения неразрушающей вероятностной оценки предельных характеристик и ресурса работы отдельных ЛД, ЛЛД и решёток ЛД квазинепрерывного режима генерации в условиях серийного производства вне зависимости от материала гетероструктуры и длины волны излучения.

1. Tomm J. W. et al. Mechanisms and fast kinetics of the catastrophic optical damage (COD) in GaAs-based diode lasers // Laser & Photonics Reviews. – 2011. –Т. 5. – №. 3. – С. 422-441.
2. Leonhäuser B. et al. Feedback-induced catastrophic optical mirror damage (COMD) on 976 nm broad area single emitters with different AR reflectivity // High-Power Diode Laser Technology and Applications XII. – International Society for Optics and Photonics. – 2014. – Т. 8965. –С. 061-0610.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.287

РЕНТГЕНОВСКИЕ МЕТОДЫ ТРЁХМЕРНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ

Асадчиков В. Е.[1], Бузмаков А. В.[1], Дьячкова И.Г.[1], Золотов Д. А.[1], Суворов Э. В.[2], Чуховский Ф. Н.[1]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия,* asad@crys.ras.ru
[2]*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,* suvorov@issp.ac.ru

Неразрушающие методы исследования и контроля реальной структуры кристаллических объектов являются основой современного материаловедения. Традиционные рентгеновские топографические методики позволяют получить лишь двумерную картину расположения дефектов в кристаллах. Однако несомненный интерес представляет получение объемного изображения реальной структуры кристаллических объектов. Для решения данной задачи широкое развитие получили методы рентгеновской томографии и топо-томографии. Для выполнения соответствующих исследований в ИК РАН созданы лабораторные рентгеновские приборы [1, 2]. В качестве примера приводятся результаты микротомографических исследований кристаллов алмаза, где удалось выявить микровключения с пространственным разрешением на уровне десятков микрон. При этом монохроматизация рентгеновского излучения позволяет сделать заключение о природе данных включений. Методика вращения образца вокруг нормали к отражающей плоскости, позволяет регистрировать целый набор рентгеновских топограмм. Эти топограммы затем можно обработать с помощью традиционных томографических алгоритмов реконструкции, модифицировав их с учетом дифракционной схемы. Именно в этом состоит суть метода топо-томографии (или дифракционной томографии) [3]. С применением данного подхода выявлено пространственное расположение кристаллических дефектов структуры природных и синтетических алмазов (причем некоторые дефекты были обнаружены впервые), а также кристаллов фторида лития. Отметим, что многие работы Ю.А. Осипьяна [4] посвящены проблеме зарождения и развития дефектов в различных материалах, включая и кристаллы, при внешних воздействиях. Это важно для современной микроэлектроники и более всего по отношению к монокристаллам кремния. В данной работе теоретически обосновывается возможность наблюдения и выявления пространственного расположения даже одиночных дислокаций в таких кристаллах. Представлены экспериментальные результаты по восстановлению трехмерного расположения одиночных дислокаций и их полигональных скоплений, полученных методом топо-томографии, как с использованием синхротронного излучения, так и в лабораторных условиях. Для контролируемого введения дислокаций использовался метод четырехопорного изгиба [5], разработанный в ИФТТ РАН.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части «рентгеновских исследований» и при поддержке РФФИ (проект № 19-02-00556) в части «интерпретации томографических данных».

1. Бузмаков А.В. и др. Кристаллография. – 2018. – Т. 63. – № 6. – С. 1007–1011.
2. Асадчиков В.Е. и др. Патент на изобретение № 2674584, 11.12.2018 г.
3. Ludwig W. et al. J. Appl. Cryst. – 2001. – V. 34. – P. 602-607.
4. Осипьян Ю.А. Избранные труды. - 2012. – Москва. Борей – 482. С.
5. Ерофеев В.Н. и др. Кристаллография. – 1971. – Т. 16. – № 1. – С. 191-197.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.288

СПИНОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ (SIC) И ГЕТОРОСТРУКТУРАХ НА ЕГО ОСНОВЕ

Бреев И.Д.[1], Лихачев К.В.[1,2], Яковлева В.В.[1,3], Баранов П.Г.[1], Анисимов А.Н.[1]

[1]*Физико-Технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург, Россия*
[3]*СПбГЭТУ «ЛЭТИ», г. Санкт-Петербург, Россия*
breev.ilia.d@mail.ioffe.ru

Дефекты атомного масштаба в объемном и нанокристаллическом карбиде кремния (SiC) перспективны для обработки квантовой информации, нанофотоники, и зондирования. Недавно были обнаружены перспективные квантовые свойства семейства одноосно ориентированных спиновых центров, относящихся к вакансии кремния, гексагонального (4H-SiC, 6H-SiC) и ромбического (15R-SiC) политипов [1].

Вакансии кремния (VSi, со спином S = 3/2) в SiC представляют особый интерес, поскольку они могут быть выстроены по спину оптически и считываться даже при повышенных температурах до 250 Со с помощью метода оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР). Они обладают длинными временами спиновой когерентности, что позволяет реализовать на их основе высокочувствительную квантовую магнитометрию и термометрию [1]. Также, центры VSi обладают высокой контрастностью считывания и высокой спектральной стабильностью, что является перспективным для реализации квантово-оптических устройств.

Тонкая настройка спиновых и оптических свойств спиновых центров в SiC имеют решающее значение для квантового зондирования и связи. Наиболее частый подход основан на штарковском сдвиге бесфононной линии и расщепления в нулевом поле. В качестве альтернативы можно использовать резонансное взаимодействие с акустическими волнами. Совсем недавно было продемонстрировано, что механическое напряжение изменяет расщепление в нулевом поле центров VSi в SiC. С этой целью проводились исследования гетероструктур AlN/6H-SiC и AlN/4H-SiC. Механическое напряжение индуцируется на гетерогранице за счет различных параметров решетки и коэффициентов теплового расширения AlN и SiC. Используя конфокальную спектроскопию комбинационного рассеяния света (КРС) и метод ОДМР, возможно одновременно отслеживать механические напряжения решетки и спиновое расщепление в нулевом магнитном поле. Подложка AlN представляет собой пьезоэлектрический материал, который уже используется для изготовления электроакустических преобразователей. Таким образом, наши результаты обеспечивают основу для контролируемой и локальной настройки спинового расщепления в нулевом магнитном поле в VSi и других спиновых центрах [2].

Благодарности.
Работа была поддержана грантом Российского научного фонда № 20-12-00216.

1. G. V. Astakhov and V. Dyakonov, Defects in Advanced Electronic Materials and Novel Low Dimensional Structures. Defects for Quantum Information Processing in SiC (Woodhead Publishing, 2018), pp. 211–240.
2. I. D. Breev, A. V. Poshakinskiy, V. V. Yakovleva, S. S. Nagalyuk, E. N. Mokhov, R. Hübner, G. V.Astakhov, P. G. Baranov, and A. N. Anisimov, “Stress-controlled zero-field spin splitting in silicon carbide”, Appl. Phys. Lett. 118, 084003 (2021)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.289

УЧАСТИЕ ДЕФЕКТОВ В ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ $LiMgPO_4$

Келлерман Д.Г*., Калинкин М.О., Акулов Д.А., Медведева Н.И., Абашеев Р.М., Сюрдо А.И., Меленцова А.А., Зубков В.Г.

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия, kellerman@ihim.uran.ru

LiMgPO4 - фосфат со структурой оливина, рассматривается в настоящее время как один из самых перспективных дозиметрических материалов для термически стимулированной люминесценции (ТСЛ). При ионизирующем облучении фосфата возникают свободные электроны и дырки (рис.1-1), мигрирующие по зоне проводимости и валентной зоне. В ходе миграции они могут захватываться донорными и акцепторными ловушками (рис.1-2). Высвобождение носителей при нагревании (рис.1-3) и последующая их рекомбинация на центрах свечения порождает термолюминесценцию ((рис.1-4). В роли ловушек выступают дефекты, в первую очередь заряженные и нейтральные кислородные вакансии, которые могут занимать одну из трех кристаллографически неэквивалентных позиций. В работе рассмотрено влияние газовой среды, в которой проводилась обработка, и морфологии материала на оптические и термолюминесцентные свойства LiMgPO4.

Ab initio расчетами определено положение энергетических уровней нейтральных и заряженных дефектов в запрещенной зоне и предложена схема термолюминесценции в чистом и допированном LiMgPO4 с участием этих дефектов.

Проведено детальное изучение спектров рентгенолюминесценции (РЛ), фотолюминесценции (ФЛ) и термолюминесценции LiMgPO4, допированного редкоземельными элементами. Обнаружено, что люминесценция может осуществляться по двум сценариям: для одной группы РЗЭ спектры РЛ, ФЛ и ТСЛ содержат набор линий, отражающих 4f-4f переходы соответствующего РЗЭ, а для другой группы этих линий нет, и наблюдается многократно усиленный двугорбый спектр, характерный для чистой матрицы. Высказано предположение о том, что в последнем случае происходит передача энергии от РЗЭ молекулярным комплексам, включающим в себя дефекты.

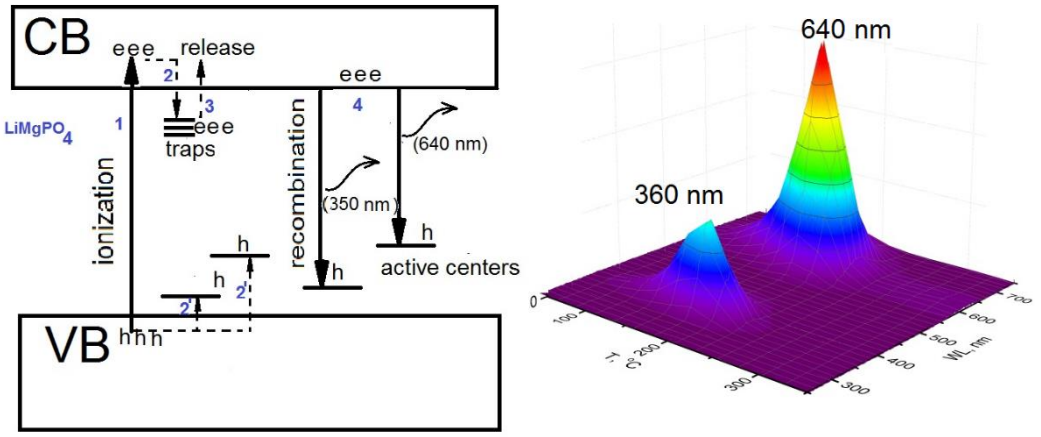


Рис. 1. Схема и спектры термолюминесценции в LiMgPO4.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Гр.№ 20-13-00121)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.290

СРАВНЕНИЕ СПЕКТРОВ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ В СКРЕЩЕННЫХ СВЕРХНИЗКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ СО СПЕКТРАМИ ЭПР В КРИСТАЛЛАХ NaCl

Колдаева М.В.[1], Петржик Е.А.[1], Еремина Р.М.[2], Шестаков А.В.[2], Альшиц В.И.[1], Даринская Е.В.[1]

[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова*
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
г. Москва, Россия, mkoldaeva@ns.crys.ras.ru
[2]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН*
г. Казань, Россия, reremina@yandex.ru

В немагнитных кристаллах в условиях типа ЭПР, когда постоянное поле близко по величине к геомагнитному (~100 мкТл), а поле накачки является переменным магнитных полем с частотой в диапазоне 10 кГц–10 МГц и амплитудой 1–6 мкТл, происходят перемещения дислокаций, носящие резонансный характер. В первом наблюдении более десяти лет назад [1] был обнаружен резкий пик дислокационных пробегов в кристаллах NaCl в постоянном магнитном поле Земли BEarth на частоте переменного магнитного поля νr, связанных условием hνr = gμBBEarth с g ≈ 2. С тех пор, нами были подробно изучены основные свойства резонансной магнитопластичности, основным из которых оказалась сильная анизотропия эффекта по отношению к ориентации образца в постоянном магнитном поле [2, 3].

Частотный спектр дислокационных пробегов в условиях скрещенных сверхнизких магнитных полей представляет собой практически непрерывный набор отдельных, достаточно узких резонансных пиков в широчайшем диапазоне частот от 10 кГц до почти 3 МГц при BEarth = 50 мкТл. Левая, низкочастотная, часть спектра объясняется анизотропией, связанной с существованием в кристаллах локальных магнитных полей Bloc, причем Bloc >> BEarth, используемого в качестве внешнего поля. Резонансные частоты в этом случае будут связаны условием νr = ν0cosθ, где ν0 – частота резонанса в случае BEarth || Bloc, а θ – угол между этими векторами, отражающий различные структурные позиции примеси в ядре дислокации. В резонансе примесный комплекс меняет свое состояние, что приводит к открепленню дислокации.

В правой части спектра наблюдаются резонансные пики дислокационной подвижности с g > 2. Их происхождение, возможно, связано с взаимодействием иона примеси с полем лигандов хлора. Нами была предпринята попытка получить обычные (высокочастотные) спектры ЭПР на наших кристаллах NaCl. Наличие примеси Ni с концентрацией ~2 ppm позволило измерить наборы спектров ЭПР кристалла NaCl:Ni при температуре 4 К для разных углов поворота кристалла относительно вектора магнитного поля в X-диапазоне (ν = 9.4 ГГц). Сравнение спектров ЭПР с частотными спектрами пробегов дислокаций в кристаллах NaCl:Ni для одинаковой ориентации (B || <001>, плоскость {100}) проводилось в единых координатах эффективного g - фактора, рассчитанного по формуле hν = gμBB с использованием специфичных для каждого типа экспериментов набора значений ν и B. Оказалось, что области активности дислокаций и ЭПР-поглощения хорошо коррелируют друг с другом.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Морозов В.А., Кац В.М., Лукин А.А. // Письма в ЖЭТФ. – 2010. Т. 91. – № 2. – С. 97–101.
2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Письма в ЖЭТФ. – 2016. – Т. 104. – № 5. – С. 362–373.
3. Альшиц В.И., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Письма в ЖЭТФ. – 2018. – Т. 107. – №10. – С. 650–655.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.291

ДИСЛОКАЦИОННЫЕ СЛЕДЫ СКОЛЬЖЕНИЯ - АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ

Орлов В.И.[1,2], Якимов Е.Б.[2]
1 Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская обл., Россия, orlov@issp.ac.ru
2 Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, г. Черноголовка, Московская обл., Россия, yakimov@iptm.ru

В докладе обсуждаются проблемы, связанные с образованием дефектов в результате скольжения дислокаций в полупроводниках - так называемых дислокационных следов, природа и даже условия образования, которых до сих пор не выяснены. Интерес к этим исследованиям вызван тем, что в последние годы для изготовления солнечных элементов широко используется поликристаллический кремний, где дислокации и связанные с ним дефекты являются основными причинами низкого КПД.

В работе использовались методы тока, наведенного электронным пучком (EBIC) и лазерным излучением (LBIC). Существенное отличие методов заключается в разной форме и размере областей, в которых генерируются электрон-дырочные пары. В случае LBIC глубина проникновения света может варьироваться в широких пределах путем изменения длины волны света и достигать десятков и сотен микрометров. Именно большая глубина проникновения света позволила получить в данной работе квази-3D LBIC изображения дефектов в плоскости скольжения. Кроме того, для наблюдения дислокационных следов использовался метод избирательного химического травления.

Анализ EBIC и LBIC изображений индивидуальных дислокационных полупетель позволил сделать вывод о том, что рекомбинационно - активные дефекты (дислокационные следы) всегда формируются только за одним из трех сегментов дислокационной полупетли. Эксперименты, проведенные с использованием образцов кремния различной кристаллографической ориентации и деформированных в различных условиях, показывают, что дислокационные следы формируются только 60° сегментом дислокационной полупетли у которого, лидирующей является 90° частичная дислокация. Смена лидирующей частичной дислокации за счет изменения направления движения дислокации подтверждает это утверждение.

В работе выдвигается несколько возможных механизмов образования дислокационных следов, связанных с влиянием тонкой структуры дислокационного ядра на процессы формирования исследуемых дефектов.

Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН и ИПТМ РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.292

СПЕКТР РЕЗОНАНСНОГО МАГНИТОСТИМУЛИРОВАННОГО ИЗМЕНЕНИЯ МИКРОТВЕРДОСТИ КРИСТАЛЛОВ NaCl

Петржик Е. А., Альшиц В. И.
Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия, Epetrzhik@mail.ru

Обнаружено резонансное уменьшение микротвердости кристаллов NaCl после их экспозиции в скрещенных магнитных полях - постоянном и перпендикулярном ему переменном. В качестве постоянного использовалось магнитное поле Земли, измеренное в месте проведения эксперимента. Частота переменного магнитного поля (с амплитудой порядка 3 мкТл) варьировалась в диапазоне 1 – 3 МГц. Измерение микротвердости проводилось методом Виккерса. Изучались кристаллы NaCl с примесью никеля.

Резонансное уменьшение микротвердости относится к эффектам «памяти». Сразу после выдержки образцов в скрещенных магнитных полях не обнаруживалось никаких изменений. Максимальное уменьшение микротвердости происходило через 2 – 3 часа, после чего наблюдалась постепенная релаксация до исходного значения. Был построен спектр резонансных частот максимальных изменений микротвердости, состоящий из отдельных резонансных пиков. Спектр делится на несколько групп пиков разупрочнения, по девять в каждой из них.

Изменение микротвердости, по-видимому, происходит из-за преобразования дефектных комплексов в кристалле под действием магнитных полей. Начальная трансформация дефектов связана со спин-зависимыми электронными переходами непосредственно во время магнитной экспозиции. Новое равновесие восстанавливается диффузионным путем, что и определяет относительно медленное изменение микротвердости кристалла.

Возникновение спектра резонансных пиков изменения микротвердости связано со спецификой наблюдаемых магнитопластических эффектов под действием сверхнизких магнитных полей в схеме ЭПР. На преобразуемые комплексы наряду с внешним постоянным магнитным полем действует локальное внутреннее магнитное поле, в нашем случае, на порядки большее постоянного поля Земли. Локальные поля могут создаваться окружающими примесный ион лигандами (ядрами ионов хлора в случае NaCl). Взаимодействие электрона примеси с ядрами окружающих его ионов порождает расщепление состояний «нулевого поля» и соответствующую серию резонансных переходов, приводящих к спектру изменений микротвердости.

Резонансные частоты соответствующих пиков изменения микротвердости связаны между собой множителем cos(45°) в пределах ошибки эксперимента. По-видимому это связано с преимущественной ориентацией внутреннего магнитного поля в кристалле вдоль осей симметрии. В нашем случае либо вдоль <100>, либо вдоль <110>.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.293

ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ ДИФФУЗИЯ В СИСТЕМАХ С СИЛЬНЫМ ХИМИЧЕСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ.

Родин А.О

Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСИС», г. Москва, Россия, rodin@misis.ru

Границы зерен в поликристаллических материалах являются путями опережающего массопереноса, что связывается с коэффициентом зернограничной диффузии (Dгз), который обычно много больше коэффициента объемной диффузии (D). Этот эффект ярко проявляется при относительно низких температурах (ниже 0,7Тпл), а при температурах ниже 0,4 Тпл объемной диффузией можно практически пренебречь. В указанном же интервале описание массопереноса требует одновременного учета и объемной, и зернограничной диффузии. Разработанное к настоящему моменту описание вводит как основные параметры двойное произведение ЗГД (δDгз) для самодиффузии или тройное произведение ЗГД (P = sδDгз, где s – коэффициент обогащения границы зерна диффундирующим элементом, а δ – ширина границы зерна).

При больших концентрациях, которые встречаются в практически важных случаях при диффузии возникают дополнительные эффекты, связанные с особенностями взаимодействия диффундирующего вещества с матрицей, в которой можно выделить два типа- особенности адсорбции (взаимодействия элемента с границей зерна как элемента системы в целом), и особенности химического взаимодействия с атомами матрицы.

Как примеры взаимодействия в докладе будут рассмотрены:

- изменение поверхностного натяжения границы зерна при адсорбции;
- снижение зернограничного массопереноса из-за формирования комплексов, включающих диффундирующие атомы;
- снижение зернограничного массопереноса из за изменения числа мест для диффузии в границе зерна.

Показано, что разработанные модели позволяют предсказать значительное понижение скорости диффузионного массопереноса в системах, где наблюдаются данные эффекты при достаточно высоких концентрациях диффузанта. В случае, если концентрации диффундирующих элементов малы, то этими эффектами можно принебречь.

Описание решений этих задач приведено в рамках уже разработанных диффузионных моделей, и не требует введения зависимости коэффициентов зернограничной диффузии от концентрации. Кроме того, показано, что анализ фазовых диаграмм, как графического отображения химического равновесия в системе, позволяет предсказать поведение диффузанта при зернограничной диффузии.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.294

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ИЗГИБНЫХ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОЛОС НА РЕНТГЕНОВСКИХ СЕКЦИОННЫХ ТОПОГРАММАХ В БРЭГГОВСКОЙ ГЕОМЕТРИИ.

Суворов Э.В., Смирнова И.А.

Институт физики твердого тела Российской академии наук (ИФТТ РАН), Черноголовка, Московская обл., Россия, suvorov@issp.ac.ru

Экспериментально методами рентгеновской секционной топографии и методами численного моделирования исследовано образование деформационных полос, возникающих при изгибе кристаллической решетки. Эксперименты выполнена на микрофокусных источниках рентгеновского излучения на бездефектных монокристаллах кремния. Численное моделирование проводилось путем решения уравнений Такаги-Топена. Анализ полученных результатов выполнялся путем сопоставления экспериментальных и расчетных секционных топограмм. Получены экспериментальные секционные топограммы для равномерно изогнутых кристаллов с радиусами изгиба в интервале порядка 10 – 300 м (прогиб кристалла для этого диапазона радиусов изгиба составляет ориентировочно 50 - 300 мкм). Анализ экспериментальных топограмм и их численного моделирования показывает, что изгиб кристалла приводит к образованию новых волновых полей межветвевого происхождения, формируемых за счет градиента деформации, направленного вдоль радиуса изгиба. Изгибные деформационные полосы возникают в результате взаимодействия полей межветвевого рассеяния, рожденного на изгибных деформациях, с интерференционным волновым полем в треугольнике рассеяния. Установлено, что при радиусах изгиба менее 10 м интенсивность деформационных полос уменьшается, они начинают приближаться к регулярным интерференционным полосам в треугольнике рассеяния и постепенно гаснут. При увеличении радиуса изгиба кристалла свыше 300 м интенсивность изгибных полос также уменьшается, но увеличиваются их полуширины, при этом полосы приближаются к дифракционному краю треугольника рассеяния. Эти интерференционные полосы оказались очень чувствительны к локальным деформациям кристаллической решетки и представляют большой практический интерес для измерения слабых деформаций. Из сопоставления численного моделирования и экспериментальных топограмм можно определить локальные деформации кристалла с высокой точностью. Установлено, что изменение знака радиуса изгиба заметно влияет на интенсивность деформационных полос и практически не влияет на их положения на секционных топограммах. Это связано с разными знаками фокусировки нормальных и аномальных волн в изогнутых кристаллах.

[1] Zaumseil P. // Krist. Tech. 1978. V. 13. P. 983
[2] Шульпина И.Л., Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., Габриэлян К.Т. // Тез. докл. IV Всесоюзного совещания ”Дефекты структуры в полупроводниках“.Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1984. Т. 2. С. 114.
[3] Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., Шульпина И.Л., Кютт Р.Н. // ФТТ. 1987. Т. 29. В. 5. С. 1608–1611.
[4] Chukhovskii F.N., Petrashen’ P.V. // Acta Cryst. A. 1988. V. 44. P. 8.
[5] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова Письма в ЖТФ, 2016, том 42, вып. 18 С.55-62
[6] Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. // Кристаллография. 1971. Т.16.В.6.С.1101-1114

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.295

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ И ИХ СВЯЗЬ С ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

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

[1]Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия
[2]Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия
v.a.khonik@vspu.ac.ru

В литературе известны примеры расчета термодинамических потенциалов переохлажденных металлических расплавов и металлических стекол (МС) по отношению к кристаллическому состоянию. Эти вычисления, однако, используют как правило различные аппроксимации свойств из состояния переохлажденного расплава в сторону твердой некристаллической структуры, что определяет значительные ошибки вычисления термодинамических потенциалов при низких температурах. Кроме, того, полученные результаты использовались главным образом для оценки стеклообразующей способности расплавов и их склонности к кристаллизации в зависимости химического состава. Природа формирования избыточных термодинамических потенциалов МС оставалась при этом неясной.
В настоящей работе проведены измерения теплового потока и высокочастотного модуля сдвига четырех металлических стекол до температуры полной кристаллизации, а также в кристаллическом состоянии. На основе калориметрических измерений рассчитаны избыточные термодинамические потенциалы МС по отношению к кристаллическому состоянию –энтальпия ΔH, энтропия ΔS и энергия Гиббса ΔФ –в зависимости от температуры. С использованием результатов измерений модуля сдвига в аморфном и кристаллическом состояниях показано, что калориметрическое определение ΔH, ΔS и ΔФ согласуется с расчетом этих величин в рамках межузельной теории с точностью не хуже 15%. Сделан вывод о том, что избыточные потенциалы МС могут практически полностью определяться системой дефектов межузельного типа, вмороженных в структуру при закалке расплава.
Выполненные на основе проведенных измерений оценки энтальпии H_f и энтропии S_f формирования дефектов межузельного типа показали, что H_f для всех исследованных МС пропорциональна модулю сдвига, а S_f весьма велика, порядка 10 –20 k_B (k_B - постоянная Больцмана). Оба результата находятся в соответствии с межузельной теорией и подтверждают ее основное предположение о том, что структурные дефекты в МС по своим свойствам аналогичны межузельным гантелям в простых кристаллических металлах. Проведенное исследование впервые показало, что природа избыточных термодинамических потенциалов МС может быть полностью связана с их дефектной структурой.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №20-62-46003.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.296

АНОМАЛЬНАЯ ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННОМ КРЕМНИИ

Терещенко А.Н.[1)], Хорошева М.А.[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

В настоящее время кремниевая элементная база оптических межсоединений практически создана. Главной проблемой кремниевой оптоэлектроники является создание эффективного источника излучения, роль которого выполняет светодиод или лазер на кремниевой основе. Однако в силу непрямозонности Si, излучательная рекомбинация в нем на несколько порядков ниже, чем в прямозонных полупроводниках. Одним из возможных решений этой проблемы является использование излучательной рекомбинации на дислокациях в кремнии. Среди различных методов генерации дислокаций особое место занимает создание центров дислокационной люминесценции (ДЛ) методом имплантации ионов кремния с последующей термообработкой. Однако, одним из главных препятствий к практическому использованию ДЛ является ее сильное температурное гашение.

В данной работе приводятся экспериментальные результаты, показывающие, что термические обработки дислокационных структур в ионно-имплантированном кремнии радикально влияют на температурную зависимость интенсивности линии D1 ДЛ [1, 2]. Например, в образцах, подвергнутых процедуре внешнего геттерирования, наблюдается многократное возрастание интенсивности линии D1 в температурном интервале 6 - 100 К. В свою очередь, применяя различные термообработки исследуемых образцов, можно наблюдать возникновение интенсивных максимумов в области высоких температур (~ 160K) на температурной зависимости ДЛ. Установлено, что такое поведение ДЛ возможно только в случае дополнительной имплантации примеси бора в дислокационную область кристалла. В работе рассматривается возможный механизм, ответственный за наблюдаемый эффект. Следует отметить, что благодаря обнаруженному аномальному поведению люминесценции станет возможным получать технологичным способом светоизлучающие структуры, в которых интенсивность линии D1 при возрастании температуры от гелиевой до комнатной понижается всего в несколько раз.

Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН, а также в рамках гранта Президента РФ (МК-4092.2021.1.2).

1. Nikolskaya A., Korolev D., Tereshchenko A., Pavlenkov V., Nagornykh S., Belov A., Vasiliev V., Mikhaylov A., Tetelbaum D. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2020. – V. 472. – P. 32–35.
2. Tereshchenko A., Korolev D., Khorosheva M., Mikhaylov A., Belov A., Nikolskaya A., Tetelbaum D. // Physica Status Solidi A. – 2019. – V. 216, Iss. 17. – P. 1900323.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.297

ДЕВИТРИФИКАЦИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

Абросимова Г.Е.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская обл., Россия
gea@issp.ac.ru

Традиционно для образования нанокристаллов в металлическом стекле в его состав вводят небольшое количество компонентов, способствующих увеличению потенциальных мест зарождения нанокристаллов и уменьшению скорости их роста. Ими могут быть элементы, образующие кластеры, нерастворимые в аморфной фазе, и элементы с низким коэффициентом диффузии (например, медь и ниобий в Finemet). Кластеры меди являются областями облегченного зародышеобразования, но никак не связаны структурно с зарождающимися кристаллами, зарождение кристаллов на этих кластерах отражает разницу в энергетическом выигрыше при гетерогенном зарождении по сравнению с гомогенным зарождением кристалла в объеме аморфной матрицы.

Нами предлагается другая модель нанокристаллизации, согласно которой местами зарождения нанокристаллов являются области упорядоченные области в аморфной фазе с определенным типом ближнего порядка, а именно, с упаковкой по типу первой кристаллизующейся фазы. Эта идея базируется на следующих экспериментальных фактах:
- ближний порядок в аморфной фазе меняется при изменении состава и/или температуры;
- на начальной стадии кристаллизации металлических стекол в большинстве случаев формируются кристаллические фазы со структурой и составом, близкими к ближнему порядку и составу аморфной фазы непосредственно перед началом кристаллизации («наследование» структуры), как правило, они являются метастабильными;
- в гетерогенной аморфной структуре каждая из аморфных областей кристаллизуется независимо друг от друга с образованием «своей» кристаллической фазы.

В гетерогенной аморфной фазе при неоднородном распределении компонентов возможно образование упорядоченных областей. В случае определенных ориентационных соотношений между решетками легирующего элемента и образующейся кристаллической фазы возрастает количество потенциальных мест зарождения нанокристаллов. При этом возможен эпитаксиальный рост нанокристаллов на упорядоченных областях, точнее, может осуществляться процесс гетероэпитаксии – ориентированного наращивания кристалла, отличающегося по составу от кластера, на котором идет рост. Важной особенностью предложенной модели является то, что процесс кристаллизации определяется величиной поверхностной энергии, а не общей зависимостью свободной энергии системы от химического состава («объемной» свободной энергии).

Проведенные исследования на широкой группе сплавов: $(Fe_{73}Si_{13}B_9)_{1-x-y}Nb_xCu_y$, $(Co_{70}Si_{12}B_9)_{1-x-y}Fe_xNb_y$, $(Co_xFe_y)Nb_8B_{20}$, $(Co_xFe_y)Ti_8B_{20}$ подтверждают реализуемость предложенной модели. Полученные результаты показали, что образование ОЦК фазы и параметры формирующейся структуры (фазовый состав, размер нанокристаллов, доля нанокристаллической составляющей структуры) существенно зависят от типа и концентрации легирующего компонента.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН при частичной поддержке РФФИ (грант 19-02-00406).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.298

КИНЕТИКА СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Cu-Cr С РАЗНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ХРОМА ПОСЛЕ РКУП

Аксенов Д.А., Асфандияров Р.Н., Рааб Г.И.

[1]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

[2]*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия*

AksyonovDA@mail.ru

Фазовые превращения в дисперсионно-упрочняемых сплавах в условиях пластической деформации играют важную роль в упрочнении материала. Установление характера влияния содержания элементов вторых фаз на кинетику фазовых превращений как в условиях деформационной обработки, так и пост-деформационной обработки позволяет достигать оптимального сочетания функциональных характеристик материала.

Так для сплава системы Cu-Cr увеличение степени пересыщенности твердого раствора на предварительном этапе (высокотемпературный отжиг-закалка) позволяет увеличить ресурс дисперсионного упрочнения материала в процессе старения. Увеличение плотности дислокаций при деформационной обработке методами ИПД ведет сложному диспресионно-дислокационному взаимодействию, которое также ведет к изменению кинетики старения материала и позволяет достичь повышенных прочностных характеристик при сохранении высоких значений электропроводности.

В работе проведено исследование структурных изменений после РКУП и кинетики пост-деформационного старения сплавов Cu-0.2Cr и Cu-1.1Cr. Установлено, что высокотемпературный отжиг при 1000°C в течении 2 часов не приводит к полному растворению хрома в сплаве Cu-0.2Cr несмотря на то, что данное количество хрома меньше значения его предельной растворимости при данной температуре. При этом повышение содержания хрома до 1.1 % вес. ведет к увеличению концентрации хрома в твердом растворе при такой же высокотемпературной обработке. Однако, количество растворенного хрома все еще меньше величины его предельной растворимости. Разница концентрации твердого раствора хрома в медной матрице ведет к существенным различиям кинетике распада пересыщенного твердого раствора как на этапе деформационной обработки методом РКУП, так и при пост-деформационном старении сплава системы Cu-Cr.

Также в работе установлено, что средний размер частиц, выделившихся в результате старения после высокотемпературной обработки существенно меньше среднего размера частиц, выделяющихся в процессе РКУП и постдеформационного старения.

Таким образом увеличение весового содержания хрома в сплаве Cu-1.1Cr ведет к увеличению концентрации твердого раствора при высокотемпературном отжиге. В результате кинетика распада твердого раствора в процессе РКУП и пост-деформационного старения в сплавах Cu-0.2Cr и Cu-1.1Cr существенно различается. На сплаве Cu-1.1Cr достижение оптимально сочетания прочностных характеристик и электропроводности достигается быстрее, величина упрочнения выше. наибольший прирост прочности за счет старения происходит на сплаве Cu-1.1Cr –110 МПа, и временное сопротивление разрыву достигает итоговой величины 480±15 МПа. Электропроводность при этом восстанавливается до 76±2% IACS.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-19-00432).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.299

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР В МЕТАЛЛИЧЕСКИЪ СТЕКЛАХ

Аронин А.С.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская обл., Россия
aronin@issp.ac.ru

Аморфно-нанокристаллические композиционные материалы, имеющие хороший комплекс физико-химических свойств, получают как методами термической обработки, так и интенсивной пластической деформации металлических стекол. Структура, полученная при деформации, отличается от структуры, полученной при нагреве. К особенностям наноструктуры, индуцированной деформацией, относится связь образующихся нанокристаллов с местами локализации пластической деформации – полосами сдвига, в которых повышена концентрация свободного объема и, следовательно, подвижность атомов. Образование нанокристаллов в полосах сдвига может происходить и при комнатной температуре уже после завершения деформации благодаря повышенной подвижности атомов. Приведены данные исследований образования нанокристаллов при термических, деформационных и комплексных воздействиях на аморфные сплавы на основе алюминия, железа в виде лент и массивных аморфных сплавов на основе циркония, а также их характеристик в зависимости от параметров внешних воздействий (вида и величины деформации, температуры обработки, состава и структуры аморфных сплавов). Исследования структуры и состава проведены методами рентгенографии, просвечивающей, сканирующей и высокоразрешающей электронной микроскопии, дифференциальной сканирующей калориметрии. Деформация осуществлена методами многократной прокатки и кручения под давлением при комнатной температуре. Локальные особенности структуры и состава аморфных сплавов после деформации и при образовании нанокристаллов исследованы методами зондовой микроскопии и рентгеновского микроанализа (в геометрии на просвет и отражение). Методами атомно-силовой зондовой микроскопии, сканирующей электронной микроскопии в геометрии «на просвет» и «отражение» и рентгеновского микроанализа исследована морфология полос сдвига и распределение механических свойств вокруг полос сдвига в аморфных сплавах на основе алюминия и циркония. Показано, что в деформированном образце сплава на основе Al появляется неоднородность распределения эффективного модуля Юнга в виде полос. Расположение областей пониженного модуля Юнга коррелирует с расположением зон полос сдвига. В этих зонах наблюдалась пониженная плотность аморфного сплава без концентрационного перераспределения компонентов сплава. Увеличение степени деформации приводит к увеличению высоты ступенек, образующихся при выходе полос сдвига на поверхность, и образованию нанокристаллов. Показано, что толщина единичной полосы сдвига не зависит от степени деформации и составляет приблизительно 15 нм; высота минимальных ступенек колеблется от нескольких десятых нм до 1.5 нм, ступеньки большого размера образуются при активации нескольких параллельных полос сдвига. Образование нанокристаллов происходит при достижении суммарной мощности полосы сдвига, соответствующей истинной деформации e = 4.42. Обсуждаются причины наблюдаемой эволюции структуры.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН при частичной поддержке РФФИ (грант 19-03-00355).

10.26201/ISSP.2020/FKS-2.300

ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАДИЕНТА ДЕФОРМАЦИИ И СТРУКТУРЫ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ФАСОННОГО ПРОФИЛЯ КОНТАКТНОГО ПРОВОДА

Асфандияров Р.Н.[1,2], Аксенов Д.А.[1,2], Рааб Г.И.[1,3], Барышников М.П.[3]
[1]*Уфимский государственный авиационный технический университет,г. Уфа, Россия*
[2]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия*
[3]*Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова*
a.r.n@list.ru

На сегодняшний день большое внимание исследователей в области материаловедения привлекают градиентные структуры. В работах показано, что такие структуры позволяют получать одновременно высокий уровень прочности с сохранением пластических свойств, что очень важно для конструкционных материалов [1]. В виду особенностей монтажа и эксплуатации, получение структурных градиентных состояний, актуально и при получении контактных проводов для высокоскоростных железных дорог [2].

В данной работе методом конечно-элементного компьютерного моделирования исследованы температурные параметры и деформированное состояние заготовки из низколегированного сплава системы Cu-Cr в процессах равноканального углового прессования (РКУП) с формообразованием и РКУП-Конформ с формообразованием.

В ходе исследований установлено, что при обработке по схеме РКУП-Конформ с формообразованием накопленная степень деформации имеет градиентный характер распределения и достигает 5-6 единиц, минимальные значения при этом ~3. Стоит отметить, что в процессе деформационной обработки по предложенной схеме происходит существенный деформационный разогрев вплоть до 470°С в области формообразования профиля провода.

Верификация компьютерного моделирования процесса РКУП формообразованием методом физического эксперимента и последующих структурных исследований показала, что после деформации и старения формируется структура полосового типа. Средний размер полос на мезоуровне составляет 20-25 мкм. Наблюдаются крупные хромовые частицы, расположенные преимущественно по границам полос. Средний размер частиц составляет 1,5±0,2 мкм.

Анализ карты разориентировок (EBSD) после окончательной обработки РКУП с формообразованием и последующим старением при 450 ° С в течение 1 часа указывает на формирование структуры полосового типа с большеугловыми границами и по границам этих полос наблюдаются скопления рекристализованных зерен. Размеры рекристаллизованных зерен составляют порядка 3 мкм.

Таким образом, за счет сильного локального разогрева в условиях сдвиговой деформации и общей повышенной температуры создаются условия для процесса рекристаллизации, который происходит вдоль большеугловых границ полос, что в свою очередь приводит к микроструктурной неоднородности, которую можно охарактеризовать как градиентную.

Благодарности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №19-19-00432

1. K. Lu. Making strong nanomaterials ductile with gradients. Science 19 Sep 2014: Vol. 345, Issue 6203, pp. 1455-1456. DOI: 10.1126/science.1255940
2. И. С. Гершман, Н. В. Миронос Требования к контактным проводам для высокоскоростного железнодорожного транспорта / Вестник ВНИИЖТ, 3/2011, стр. 13-17.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.301

ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ ТОПАЗА, ДОПИРОВАННЫХ ХРОМОМ И ДРУГИМИ ПРИМЕСНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

Балицкий В.С.[1], Балицкий Д.В.[2], Балицкая Л.В.[1], Сеткова Т.В.[1], Бубликова Т.М.[1]

[1]*Институт экспериментальной минералогии им. акад. Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия,* balvlad@iem.ac.ru
[2]*Cristal Laser SAS, г. Мессен, Франция*

Природный топаз – Al2SiO4(F, OH)2, является одним из наиболее популярных, относительно недорогих драгоценных камней. В отличие от кристаллов других драгоценных минералов, обладающих различными ценными физическими свойствами, в топазе обнаружены только слабые пиро- и пьезоэлектрические эффекты, нуждающиеся в подтверждении. В лаборатории синтеза и модифицирования минералов ИЭМ РАН длительный период проводились исследования по разработке и совершенствованию методов выращивания топаза, допированного хромом, фосфором, ванадием, галлием, германием и др. элементами для выяснения возможностей использования таких кристаллов в технических устройствах. В результате впервые были разработаны два метода выращивания в гидротермальных растворах монокристаллов топаза, как беспримесного, так и допированного указанными выше элементами, весом до 30 г и толщиной наросшего слоя 12 мм (Рис. 1). Нигде в России и других странах подобные кристаллы не выращиваются.

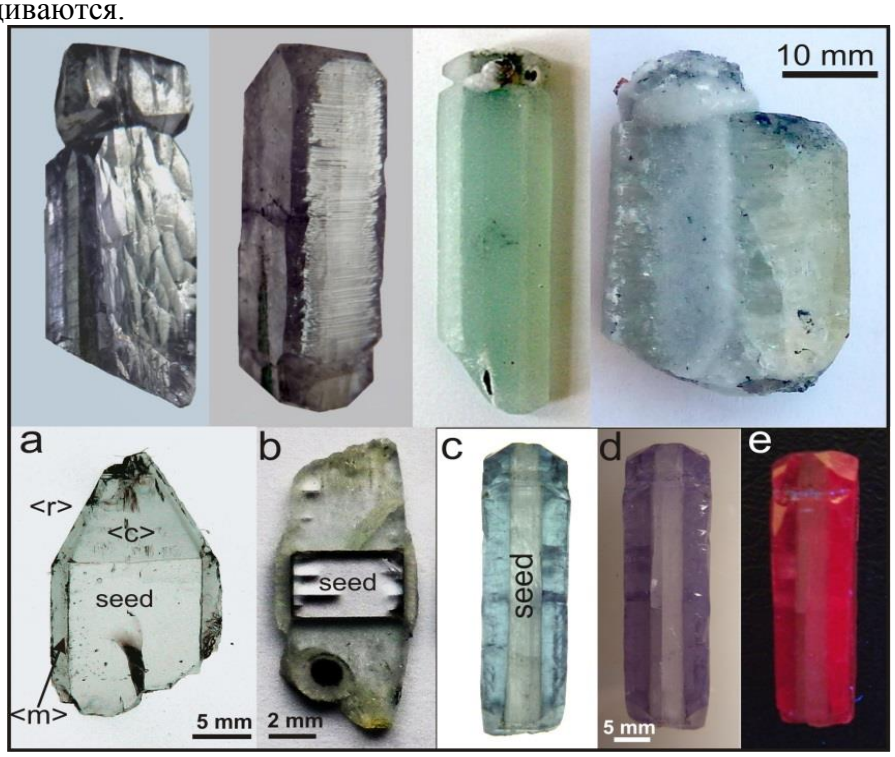


Рис. 1 Верхний ряд: внешняя морфология выращенных кристаллов топаза и рельеф растущих граней; нижний ряд: a и b – зонально-секториальное строение топаза и изменение его голубовато - зеленой окраски при дневном свете (c) до розовой при электрическом свете (d) и пурпурно-алой при ультрафиолетовом свете (e)

В целом, результаты экспериментов позволили определить области устойчивости топаза в растворах различного состава в широком интервале температур и давлений и установить оптимальные условия для выращивания его монокристаллов.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.302

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОБРАЗУЮЩИХСЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ТРЕЩИН В МАТЕРИАЛАХ ПРИ УДАРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ С ПОМОЩЬЮ МЕХАНОЛЮМИНЕСЦИРУЮЩИХ ПОКРЫТИЙ

Банишев А.Ф.
Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук– филиал Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, Московская обл., г.Шатура, E-mail: banishev@mail.ru

В последние время наблюдается повышенный интерес к исследованиям механо-пьезо-люминофоров и созданию на их основе новых типов приборов и устройств механо-пьезо-фотоники, в частности механооптических конверторов для контроля состояния материалов подвергающихся механическим воздействиям. Синтезировано большое количество механолюминофоров механолюминесцирующие в разных спектральных диапазонах [1]. Большой интерес представляют механолюминофоры на основе редкоземельных элементов обладающие высокой эффективностью механо-оптического преобразования, в частности механолюминофор $SrAl_2O_4$:(Eu^{2+},Dy^{3+}).

В данной работе исследовался процесс разрушения (образования трещин) хрупких материалов с использованием механолюминесцирующего композита для визуализации и диагностики процесса разрушения при механическом воздействии (ударе). Для этого был получен композиционный механолюминесцирующий материал (суспензия) на основе прозрачного в видимой области спектра клея и порошка люминофора $SrAl_2O_4$:(Eu^{2+},Dy^{3+}). Тонкий слой этого материала наносился на поверхность исследуемого образца (стеклянной пластины диаметром 30мм и толщиной 2мм). После затвердевания суспензии, на поверхности пластины формировался тонкий слой (h≈350мкм) композиционного механолюминесцирующего материала. Механический ударник воздействовал на обратную (свободную) поверхность стеклянной пластины. Картина распределения напряжений в пластине возникающая в результате удара визуализировалась распределением интенсивности свечения механолюминесцирующего слоя. При силе удара ниже порога разрушения материала, свечение имело форму пятна с максимумом интенсивности в центре пятна. При силе удара выше порога разрушения материала (порога образования трещин) в механолюминесцирующем слое появляется набор светящихся линий положение которых совпадает с положениями трещин образовавшихся в пластине в результате удара. В местах образования трещин происходит “разделение” материала, что вызывает растягивающие напряжения в механолюминесцирующем слое и свечение вдоль образующихся трещин. Известно [2], что интенсивность свечения (механолюминесценции) пропорциональна возникающим напряжениям, поэтому механолюминесцирующие покрытия можно использовать, как для визуализации напряжений, так и для визуализации процесса образования и роста трещин. Показано, что напряжения и трещины возникающие в материале в процессе разрушения при ударе достаточно полно и надежно визуализируются механолюминесцирующим слоем нанесенным на поверхность исследуемого материала.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации “Росатом“ в рамках научного проекта № 20-21-00066 и Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ ” Кристаллография и фотоника“ РАН

1. Chunfeng Wang, Lin Dong, Dengfeng Peng, and Caofeng Pan, Tactile Sensors for Advanced Intelligent Systems, Adv. Intell. Syst. 2019, 1, 1900090, DOI: 10.1002/aisy.201900090
2. Ang Feng, and Philippe F. Smet, A Review of Mechanoluminescence in Inorganic Solids: Compounds, Mechanisms, Models and Applications, Materials **2018**, 11, 484; doi:10.3390/ma11040484

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.303

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Беляев[1] Ф.С., Волков[2] А.Е., Евард[2] М.Е.

[1]*Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург, Россия,*
[2]*Санкт-Петербургский Государственный Университет,*
г. Санкт-Петербург, Россия,
belyaev_fs@mail.ru

Сплавы с памятью формы (СПФ) и главным образом никелид титана TiNi, являются перспективными функциональными материалами с точки зрения применения их в медицине и различных технических устройствах. В устройствах многократного действия особую важность приобретает стабильность механических свойств СПФ, так как изменение характеристик термомеханического цикла и/или накопление необратимой деформации может привести к нестабильной работе или отказу устройства. Стабильности термомеханического цикла обычно добиваются путем тренировки сплава, одной из разновидностей которой является деформирование в высокотемпературном (аустенитном) состоянии. Возможности формирования свойств СПФ посредством тренировки расширяют возможности практического применения данных сплавов, однако пластическая деформация не только упрочняет сплав и стабилизирует его свойства, но и создает поля внутренних напряжений, которые влияют на проявление функциональных свойств. Поэтому для эффективного применения тренировки необходимы надежные средства теоретического описания ее влияния на функциональные свойства СПФ.

Для описания влияния пластической деформации на фазовые превращения в сплаве TiNi была модифицирована ранее разработанная авторами микроструктурная модель СПФ [1], позволяющая описывать основные функциональные свойства СПФ: память формы, псевдоупругость, псевдопластичность, обратимую память формы. В данной работе было реализовано описание механизма пластической деформации сплава TiNi в аустенитном состоянии. Для учета внутренних напряжений применялась концепция деформационных дефектов, порождаемых пластической деформацией. Подобным образом учитывались внутренние напряжения, порождаемые механизмом микропластической деформации, ответственной за пластическую аккомодацию мартенсита. Для единообразного описания полей внутренних напряжений от обоих механизмов необратимой деформации и учета их влияния на фазовые превращения в СПФ, был введен пятимерный девиаторный базис, к координатам которого пересчитывались поля напряжений деформационных дефектов различных пластических механизмов.

Предложенный подход позволил описать влияние пластической деформации на функциональные свойства никелида титана, а именно снижение величины эффекта памяти формы при увеличении предварительной пластической деформации. Кроме того, он позволил описать эффект обратимой памяти формы аустенитного типа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-31-60035

1. A. Volkov, F. Belyaev, M. Evard, N. Volkova // MATEC Web of Conferences. 2015, 33, 1-5.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.304

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ СТОЛБЧАТЫХ ЗЕРЕН НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВА TiNi, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОЙ НАПЛАВКИ

Бикбаев Р.М.[1*], Palani I.A.[2], Реснина Н.Н.[1], Беляев С.П.[1], Mani Prabu S. S.[2], Manikandan M.[2], Jayachandran S.[2], Sahu Anshu[2]

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия,*
[2]*Discipline of Mechanical Engineering, Indian Institute of Technology Indore, Indore, INDIA*
e-mail:BikbaevRM@yandex.ru

Отличительной особенностью образцов, полученных аддитивными технологиями, является наличие столбчатых зерен, которые образуются при затвердевании расплава. Формирование такой структуры приводит к появлению текстуры вследствие того, что зерна растут вдоль направления [001]. Поскольку свойства сплавов на основе TiNi зависят от текстуры, то можно ожидать, что функциональные свойства образцов сплава TiNi, полученных методом послойной наплавки, будут отличаться от свойств сплавов, полученных стандартными методами. В связи с этим целью настоящей работы явилось исследование влияния ориентации столбчатых зерен образца сплава TiNi, полученного методом послойной наплавки, на его функциональные свойства.

Массивный трехслойный образец сплава TiNi синтезировали на титановую подложку методом электродуговой послойной наплавки, в котором в качестве расходуемого электрода выступала проволока сплава $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$ диаметром 1,2 мм. Каждый слой состоял из 5 рядов в одной плоскости. Массивный образец разрезали на пластины, толщиной 0,9 мм, из которых вырезали образцы, ширина и длина рабочей части которых составляла 1 и 6 мм, соответственно. Вырезали три типа образцов под углами 0, 45 и 90° относительно направления нарастания слоев. Перед проведением экспериментов образцы отжигали при температуре 450 ^{o}C в течении 10 часов. Исследовали эффект памяти формы после предварительного деформирования в мартенситном состоянии до различной деформации.

Результаты показали, что в образце, вырезанном вдоль нарастания слоев, максимальная обратимая деформация и деформация до разрушения выше, чем в образцах, вырезанных под углами 45 и 90 градусов. Сравнение максимальной обратимой деформации в образце, вырезанном из массивной заготовки под углом 0 градусов, и в образце, вырезанном из стенки, состоящей из одного ряда, показало, что в первом случае обратимая деформация в 1,5 раза выше. Это может быть обусловлено тем, что в массивных образцах столбчатые зерна не имеют преимущественной ориентации вдоль [001], поскольку при наличии рядов в той же плоскости теплоотвод может осуществляться в разных направлениях. В стенке отвод тепла осуществляется только перпендикулярно подложке, поэтому текстура сильнее влияет на функциональные свойства.

Работа выполнена в рамках совместного проекта РНФ (№ 19-49-02014)-DST (№ DST/INT/RUS/RSF/P-36).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.305

ОБЩНОСТЬ СТАТИСТИКИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОПРОЧНЫХ ТВЁРДЫХ ТЕЛ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

Бойко Ю.М., Марихин В.А., Мясникова Л.П.

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
г. Санкт-Петербург, Россия, yuri.boiko@mail.ioffe.ru

Высокопрочные материалы различной химической природы являются перспективными при использовании их в качестве армирующих элементов и наполнителей композиционных материалов широкого спектра применения. В этой связи возникает важная задача надёжного определения механических характеристик высокопрочных материалов. Для её успешного решения требуется проведение большого количества параллельных измерений (не менее 50-ти) с целью получения большого массива данных. Известно, что все высокопрочные материалы неорганической природы являются хрупкими или квазихрупкими, и ключевую роль в их разрушении играют поверхностные трещины, удаление которых, как было показано А.Ф. Иоффе, приводит к существенному росту прочности (σ). Оказалось, что статистическое распределение σ таких материалов подчиняется статистике Вейбулла [1], что не представляется неожиданным, так как она была изначально предложена именно для описания распределения σ этого класса материалов. В рамках данной модели аналитическая связь между вероятностью разрушения (Pj) при данном или более низком значении σ выражается в виде

$$\ln\ln[1/(1 - Pj)] = -m\cdot\ln\sigma 0 + m\cdot\ln\sigma \quad (1),$$

где m – параметр формы (так называемый модуль Вейбулла), σ0 – масштабный параметр, имеющий физический смысл среднего значения прочности для данной серии механических измерений. Уравнение (1) оказалось справедливым не только для высокопрочных неорганических материалов (стеклянные, кварцевые и углеродные волокна, углеродные нанотрубки и др.), но и для высокопрочных полимерных материалов органической природы (ультраориентированные гели сверхвысокомолекулярного полиэтилена с прочностью 4-6 ГПа [2]). Это обусловлено квазихрупкостью последних в результате исчерпания ресурса пластичности в процессе ориентационного вытягивания и наличием поверхностных трещин, инициируемых полосами сброса. Другими словами, справедливость теории Вейбулла для двух принципиально различных классов высокопрочных твёрдых тел – низкомолекулярных неорганических и сверхвысокомолекулярных длинноцепочечных органических – является следствием идентичности механизма разрушения: прорастания магистральной поперечной трещины от поверхности через объём образца. Нами впервые было предложено использовать модель Вейбулла не только для описания статистического распределения прочности, но и для описания распределений не менее важных механических характеристик – деформации при разрыве и модуля упругости. Показана корректность этой модели [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 18-29-17023мк и 19-03-00789А).

1. Weibull W. // J. Appl. Mech. – 1951. – V. 18. – September. – P. 293-297.
2. Бойко Ю.М., Марихин В.А., Москалюк О.А., Мясникова Л.П. // ФТТ. – 2020. – Т. 62. – № 4. – С. 590-595.
3. Boiko Yu.M., Marikhin V.A., Myasnikova L.P., Radovanova E.I. // Colloid Polym. Sci. – 2018. – V. 296. – № 10. – P. 1651-1656.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.306

QUANTUM MECHANICAL CALCULATIONS OF THERMODYNAMIC FUNCTIONS OF LAVES PHASE Fe_2Mo

Vasilyev D.A.

Baikov Institute of Metallurgy and Material Science of RAS,
Moscow, Russia, vasilyev-d@yandex.ru

In the ferritic steels, the Laves phase Fe2Mo is a hardening phase which released during the heating of a product that is exposed to high temperatures for a long time. A characteristic feature of Laves phases is their slow release from a solid solution and a slow increase in particle size, which favorably affects the stabilization of the mechanical properties of steels during long isothermal holding. Despite its importance, the thermodynamic properties of Fe2Mo remain unexplored.

The Gibbs energy of the Laves phase Fe2Mo is derived by Legendre transforming the volume- and temperature- dependent Helmholtz free energy F(V,T) computed within the adiabatic approximation:

$$F(V,T) = E_{tot}(V) + F_{el}(V,T) + F_{vib}(V,T) + F_{mag}(V,T) - TS_{conf}(T)$$

where $E_{tot}(V)$ is the total energy from first-principal calculations at T = 0K. $F_{el}(V,T)$, $F_{vib}(V,T)$, $F_{mag}(V,T)$ are the electronic, vibrational and magnetic free energies, respectively, and S_{conf} is the ideal configurational entropy. The entropy of magnetic moments on the sublattices were taken into account for the free energy calculation. The quasi-harmonic Debye - Grüneisen theory was used in this work. The Debye temperature was calculated from elastic constants by applying the distortion matrices to the lattice, it was done in the work [1]. The Curie temperature, T_c, was evaluated by mean- field treatment as a difference between the ground state total energies of PM and FM Fe_2Mo which has been calculated at the equilibrium atomic volumes of the FM and PM states. The curves of calculated heat capacity and volume expansion as temperature functions are shown in Figure 1.

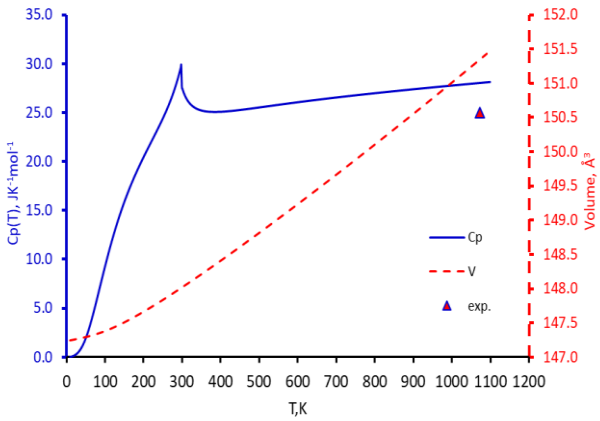


Figure 1. Calculated heat capacity $C_p(T)$ (in $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$) shown by a solid blue line (left axis) and volume $V(T)$ (in $Å^3$) shown by a dashed red line (right axis) for Laves phase Fe_2Mo vs. temperature. The red triangular point is an experimental volume obtained at T = 1073 K after 1500 hours of annealing in the work [2].

The research was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research as a part of scientific project № 19-03-00530.

1. Vasilyev D.A. Quantum-Mechanical Calculations of Elastic Properties of Laves Phase Fe_2Mo. //Collections of materials of Oding scientific readings "Mechanical properties of modern structural materials". IMET RAS, Moscow, 17-18 September 2020, pp. 26-27.
2. M. Eumann, G. Sauthoff, M. Palm, Phase equilibria in the Fe–Al–Mo system – Part I: Stability of the Laves phase Fe2Mo and isothermal section at 800 °C, Intermetallic 16 (2008) 706-716.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.307

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЬЕЗОКЕРАМИКИ $NA_{0,875}LI_{0,125}NBO_3$

Гаджиев Г.Г.[1], Магомедов М.-Р.М.[1,3], Амирова А.А.[1]

[1] *Институт физики им. Х.И. Амирханова – обособленное подразделение ФГБУН ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия, gadjiev@mail.ru*

[1 2] *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Дагестанский государственный медицинский Университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Россия, Махачкала*

В данной работе представлен результат комплексного исследования теплофизических свойств ниобатов натрия Na1-xNbO3-x/2, (где x:0; 0,04; 0,08; 0,12; 0,20) от 300 до 800К.

Данные по теплопроводности измерялись абсолютным компенсационным методом и Flech методом $\lambda = KC_p\rho$, где К – температуропроводность, Ср – теплоемкость, ρ - плотность. Теплопроводность всех составов с температурой растет, как в неупорядоченных твердых растворах и стеклообразных полупроводниках. Для оценки данных использовалась формула Дебая: $\lambda = \frac{1}{3}C_p \cdot \rho \cdot \upsilon \cdot L$, где ρ - плотность, υ - средняя скорость распространения звука (фононов), l - длина свободного пробега фононов, которая оценивается по скоростям распространения продольных и поперечных волн по эхо-импульсивному методу. Температурный ход λ и L идентичны и ее величина уменьшается от x=0 до 0,20, что связано с влиянием на тепловое сопротивление изменением масс (дефект масс) и упругих параметров решетки подобно в полупроводниковых твердых растворах. Так как исследованные керамики имели различную пористость, мы оценили λ(T) с пористостью 10% для разных температур. По оценкам зависимости теплопроводности керамических материалов (нитрит алюминия, оксид цинка) нами были предложены формулы расчета λ от пористости от P = 2,5 до 20%. Зависимость λ от пористости удовлетворительно согласована с расчетными по формулам: $\lambda(P) = \lambda_o(1-P)(1-P)^{8/3}$ и $\lambda(P) = \lambda_o \exp(-bP)$, где λ0 теплопроводность беспористой керамики, P – пористость в процентах, b=4,0.

Теплоемкость всех составов от 320К до 600К растет, и экспериментальные данные удовлетворительно согласуются с расчетными как: $C_p(T) = a + bT - cT^{-2}$, где a, b и c – постоянные. В области от 610 до 652К наблюдается интенсивный рост Ср с максимумами 645-652К. Рост в этой области, с максимумами при температурах Кюри, связан с постепенными переходами от тетрагональной к псевдокубической структуре. Выше Тк в областях 10-15 градусов уменьшение Ср, связанное с переходами от псевдокубической к кубической структуре, далее их незначительный рост до 800К. Наблюдается четкая корреляция состав-структура, диэлектрические и теплофизические свойства, особенно в области температур Кюри с отклонением на 3-5 градусов для всех составов.

1. Кравченко О.Ю., Гаджиев Г.Г., Омаров З.М., Резниченко Л. А., Абдуллаев Х. Х., Разумовская О.Н., Шилкина Л.А., Комаров В.Д., Вербенко И.А // Неорганические материалы. – 2011. – Т. 47. – В. 6. – С. 758-764.
2. Malič B., Koruza J., Hreščak J., Wang K., Fisher J., Benčan A. // Materials. – 2015. - V. 8. - № 12. - 8117-8146.
3. Zhang J. et al. // J. Am. Ceram. Soc. – 2015. - V. 98. - № 3. - P. 990–995.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.308

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕДИ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ TI-HF-NI-CU НА ИЗМЕНЕНИЕ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ ОРИЕНТИРОВАННОГО МАРТЕНСИТА

Демидова Е.С.[1], Беляев С.П.[1], Реснина Н.Н.[1], Шеляков А.В.[2]

[1]Санкт-Петербургский Государственный Университет, г. Санкт-Петербург, Россия
[2]Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ» (Московский инженерно-физический институт), Москва, Россия
lena-demi@yandex.ru

Ранее было обнаружено, что в сплавах на основе TiNi с высокой концентрацией дефектов замещения, мартенситная фаза может появляться в условиях изотермической выдержки. В качестве дефектов замещения могут выступать как избыточные атомы одного элемента, например, избыточные атомы никеля в нестехиометрическом сплаве TiNi, так и легирующие элементы. В сплавах системы Ti-Hf-Ni-Cu атомы меди частично замещают атомы никеля и играют роль дефектов замещения. Увеличение концентрации меди приводит к увеличению концентрации этих дефектов, что влияет на кинетику изотермического перехода. Вместе с тем ранее было показано, что реализация изотермического превращения под напряжением сопровождается изменение обратимой деформации в сплавах на основе TiNi, поэтому изменение концентрации дефектов замещения должно оказывать влияние на обратимую деформацию. Целью настоящей работы явилось исследование влияние концентрации меди в четырехкомпонентном сплаве Ti-Hf-Ni-Cu на изменение обратимой изотермической деформации.

В работе использованы сплавы Ti40,7Hf9,5Ni49,8-XCuX (X= 5, 8, 10 или 15 at.%). Тонкие ленты исследуемых сплавов охлаждали под нагрузкой до температуры выдержки, выдерживали в течение часа и нагревали до температуры выше температура конца обратного превращения под нагрузкой. Выдержку проводили при температурах внутри температурного интервала прямого перехода, определенного при охлаждении без напряжения. Величину напряжение варьировали от 160 МПа до 400 МПа.

Обнаружено, что в сплавах Ti40,7Hf9,5Ni49,8-XCuX изотермическая деформация, связанная с образованием ориентированного мартенсита, растет со временем до насыщения, величина которого немонотонно зависит от параметров выдержки (температуры и нагрузки) и химического состава сплава. Показано, что во всех случаях максимальное увеличение изотермической деформации наблюдали при выдержке при температуре на 6 оС ниже температуры начала прямого перехода. Увеличение концентрации меди приводило к уменьшению максимальной изотермической деформации. В сплаве с 15 ат. % меди изменение обратимой деформации не наблюдали ни при охлаждении, ни при выдержке. Таким образом, можно заключить, что увеличение содержания меди приводит к подавлению изотермических эффектов в сплавах системы Ti-Hf-Ni-Cu. Это связано с тем, что увеличение концентрации меди уменьшает максимальный объем сплава, который может перейти в мартенситную фазу при изотермической выдержке.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-19-00226)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.309

ПРОЯВЛЕНИЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ SiO_2

Дмитриевский А.А., Жигачева Д.Г., Васюков В.М., Овчинников П.Н.
ТГУ имени Г.Р. Державина, Тамбов, Россия, E-mail: aadmitr@yandex.ru

Благодаря высокой термической, радиационной и коррозионной стойкости, ионной проводимости, хорошей биоинертности в совокупности с превосходными механическими свойствами, циркониевая керамика (стабилизированная в тетрагональной фазе) и композиты на ее основе находят широкое применение от машиностроения до медицины. Наибольший интерес прикладного характера вызывает циркониевая керамика, упрочненная оксидом алюминия (ATZ) [1]. Однако, как другие керамики, ATZ-керамика является хрупким материалом. Разработка состава и структуры ATZ-керамики, обеспечивающих ей запас пластичности при комнатных температурах без ущерба для других свойств, существенно расширит область ее практических приложений.

Обнаружено, что введение 2 - 5 мол. % диоксида кремния в Ca-ATZ-керамику (тетрагональная фаза диоксида циркония стабилизирована оксидом кальция) обеспечивает проявление признаков пластичности при комнатных температурах. На σ-ε-диаграмме (регистрируемой в процессе одноосного сжатия при комнатной температуре) кремнийсодержащей Ca-ATZ-керамики наблюдается появление площадки текучести (Рис. 1).

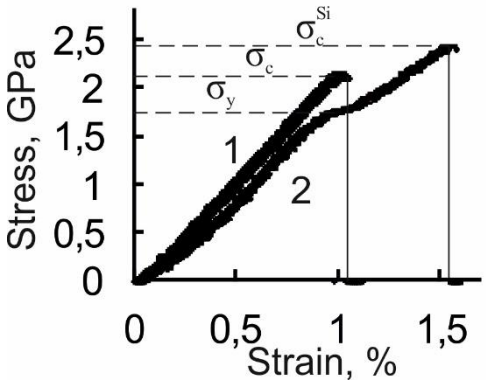


Рис. 1. Характерные σ-ε-диаграммы одноосного сжатия Ca-ATZ – 1 и Ca-ATZ+SiO_2 – 2 керамик

Показано, что использование CaO в качестве стабилизатора тетрагональной фазы *t*-ZrO_2 способствует повышению стойкости керамики к низкотемпературной деградации, а введение в ее состав добавки SiO_2 (5 мол.%) обеспечивает превосходное соотношение твердости и вязкости разрушения: H = 10,9 GPa, K_C = 12,43 MPa $m^{1/2}$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 21-79-00068). Результаты получены с использованием оснащения Центра коллективного пользования научным оборудованием ТГУ имени Г.Р. Державина.

Цитируемая литература

1. Ghaemi M.H., Reichert S., Krupa A., Zykova A., Lobach K., Sayenko S., Svitlychnyi Y., Zirconia ceramics with additions of alumina for advanced tribological and biomedical applications, Ceram. Int., V. 43, 9746–9752, 2017.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.310

ПРОЯВЛЕНИЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ SiO_2

Дмитриевский А.А., Жигачева Д.Г., Васюков В.М., Овчинников П.Н.
ТГУ имени Г.Р. Державина, Тамбов, Россия, E-mail: aadmitr@yandex.ru

Благодаря высокой термической, радиационной и коррозионной стойкости, ионной проводимости, хорошей биоинертности в совокупности с превосходными механическими свойствами, циркониевая керамика (стабилизированная в тетрагональной фазе) и композиты на ее основе находят широкое применение от машиностроения до медицины. Наибольший интерес прикладного характера вызывает циркониевая керамика, упрочненная оксидом алюминия (ATZ) [1]. Однако, как другие керамики, ATZ-керамика является хрупким материалом. Разработка состава и структуры ATZ-керамики, обеспечивающих ей запас пластичности при комнатных температурах без ущерба для других свойств, существенно расширит область ее практических приложений.

Обнаружено, что введение 2 - 5 мол. % диоксида кремния в Ca-ATZ-керамику (тетрагональная фаза диоксида циркония стабилизирована оксидом кальция) обеспечивает проявление признаков пластичности при комнатных температурах. На σ-ε-диаграмме (регистрируемой в процессе одноосного сжатия при комнатной температуре) кремнийсодержащей Ca-ATZ-керамики наблюдается появление площадки текучести (Рис. 1).

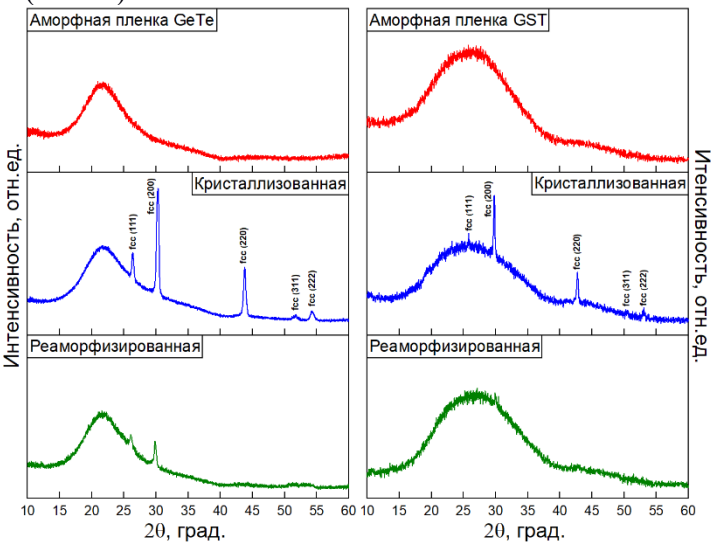


Рис. 1. Характерные σ-ε-диаграммы одноосного сжатия Ca-ATZ – 1 и Ca-ATZ+SiO_2 – 2 керамик

Показано, что использование CaO в качестве стабилизатора тетрагональной фазы *t*-ZrO_2 способствует повышению стойкости керамики к низкотемпературной деградации, а введение в ее состав добавки SiO_2 (5 мол.%) обеспечивает превосходное соотношение твердости и вязкости разрушения: H = 10,9 GPa, K_C = 12,43 MPa $m^{1/2}$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 21-79-00068). Результаты получены с использованием оснащения Центра коллективного пользования научным оборудованием ТГУ имени Г.Р. Державина.

Цитируемая литература

1. Ghaemi M.H., Reichert S., Krupa A., Zykova A., Lobach K., Sayenko S., Svitlychnyi Y., Zirconia ceramics with additions of alumina for advanced tribological and biomedical applications, Ceram. Int., V. 43, 9746–9752, 2017.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.311

OBSERVATION OF THE ANTIFERROMAGNETIC TOPOLOGICAL INSULATOR $MnBi_2Te_4$

D.A. Estyunin
Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, 198504 Russia
e-mail: estyunin@gmail.com

A combination of magnetic and topological orders in novel quantum materials has unlocked an intriguing research area in condensed matter physics. Breaking of time reversal symmetry (TRS) in 3D topological insulators (TI) has been recently proposed to be the way to realize the quantum anomalous Hall effect (QAHE) [1]. When TRS is broken via exchange interaction the topological surface states (TSS) are no longer protected and a gap opens at the Dirac point (DP) [2]. This leads to the creation of chiral 1D edge states with quantized Hall resistance. Magnetism can be induced into TIs in the following ways: doping with magnetic atoms, via a proximity effect, magnetic extension of TI crystal structure or the creation of intrinsic magnetic TI [3]. To this date, the most common way and the only one with experimentally observed QAHE [1] is doping of 3D TI (Bi,Sb)2(Te,Se)3 with magnetic 3d or 4f elements. However, the highest observed critical temperature required for QAHE has been limited to 1 K which could be caused by the arbitrary localization of magnetic atoms. The temperature of the TI transition to the QAHE regime is expected to be related to the size of the band gap at the DP and the TI's magnetic ordering temperature [3]. Therefore, the recently discovered intrinsic antiferromagnetic (AFM) TI MnBi2Te4 (MBT) [4] has a great potential to show a high-temperature QAHE. Moreover, the MBT can host magnetoelectric effects, axion electrodynamics or Majorana fermions. These unusual properties make MBT extremely attractive for applications in novel electronics.

This material is characterized by a high Neel temperature (TN) of 25 K and a large band gap at the DP in AFM state up to ~80 meV [4]. The observation of such gap was highly expected and was presented in several works [4,6]. However, recent experiments propose the small DP gap (< 20 meV) [5] which might be explained in terms of a deviation of the surface magnetic ordering from the bulk one. These inconsistencies are suggested to be caused by reconstruction processes and sensitivity to surrounding environments. For the present moment the most significant influence is proposed to be from the crystal structure defects such as vacancies in Mn layer and mutual substitution of Mn and Bi. Deviation from the ideal crystal structure leads to the possibility of a complex space-varying magnetism in MBT and thus the DP gap. Here we will discuss the properties of the MBT and the later advantages in its studying. With this intension we will present a detailed measurement of the electronic structure in paramagnetic and AFM phases in MBT by means Laser-based angle resolved photoemission spectroscopy.

This wok was supported by the Russian Foundation for Basic Research under Grant No. 18-12-00062 and the Russian Ministry of Education Grant No. 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al., Science 340, 167 (2013).
2. Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis et al., Science 329, 659 (2010).
3. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nature Reviews Physics 1, 126 (2019).
4. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann, D. Estyunin et al., Nature 576, 416 (2019)
5. Yu-Jie Hao, Pengfei Liu, Yue Feng et al., Phys. Rev. X 9, 041038 (2019)
6. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., APL Materials 8, 021105 (2020)

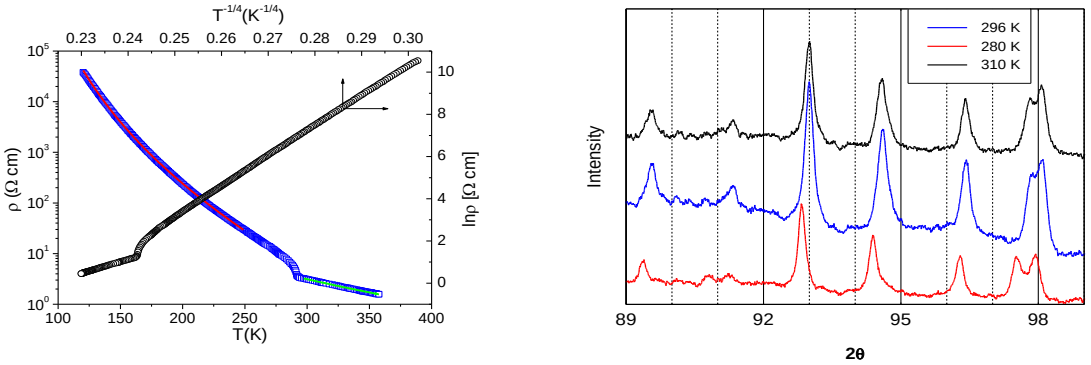
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.312

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В VO_2(S).

Зибров И.П., Сидоров В.А.

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия, zibrov@hppi.troitsk.ru

Ранее [1] новая модификация высокого давления VO_2(S) была получена путем термобарической обработки стехиометрической смеси порошков V_2O_3+V_2O_5 при P=2.0 ГПа и T=650 С в камерах «тороид». Кристаллическая структура изучалась с помощью рентгеновской дифракции: *a*=7.35367(3), *c*=4.51507(4) Å, V=211.448(1) Å^3, Z=7, П.Г. *P 3*. Атомы ванадия находятся в шестерной координации из атомов кислорода в виде искаженного октаэдра [VO6]. Строительным элементом двухслойной структуры являются три октаэдра, соединенные ребрами. Температурная зависимость удельного электрического сопротивления ρ(T) VO_2(S) носит полупроводниковый характер, и сопротивление возрастает более, чем на четыре порядка в интервале температур от 360 К до 120 К Рис.1а. Около $T_c \approx 290$ К зависимость ρ(T) имеет заметную аномалию. Изучение рентгеновской дифракции



а б

Рис.1. а- температурная зависимость удельного электрического сопротивления VO_2(S); б – часть рентгеновской дифрактограммы VO_2(S) при: 280 К-нижняя кривая, 296 К-средняя, 310 К-верхняя.

ниже и выше температуры аномалии (Рис.1б) показало, что при переходе происходит скачок объема ячейки: при 280 К V=212.002(1) Å^3, а при 296 К V=211.448(1) Å^3, то есть ΔV=0.26%. При этом симметрия кристалла не меняется. На зависимости теплоемкости материала от температуры в районе перехода фиксируется небольшой «лямбда»-пик, что, в сочетании со скачком объема, может свидетельствовать о фазовом переходе первого рода. Его природа до конца не ясна, скорее всего это магнитный переход, но точно не в ферромагнитную фазу, что показали предварительные магнитные измерения. Измерения температурной зависимости коэффициента Зеебека показали, что в районе температуры перехода происходит смена механизма электрической проводимости с электронной (при высокой температуре) на преимущественно дырочную (при низкой температуре).

1. Зибров И.П., Филоненко В.П. //Сборник материалов международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии», Витебск, Белоруссия. -2019. С. -276-278.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.313

ИЗМЕНЕНИЕ РСА ИНДЕКСА КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ВЫСОКОЧИСТОГО КВАРЦА НА РАЗЛИЧНЫХ ЭТАПАХ ОБОГАЩЕНИЯ И ДОЭ-АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ КВАРЦА.

Зимин М.Д., Сапожников А.Н., Жабоедов А.П., Колесников С.С.*, Непомнящих А.И.

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, Россия;
**Иркутский национальный исследовательский технический университет, г. Иркутск, Россия,* zima.dom@mail.ru

Индекс кристалличности, полученный методом рентгеноструктурного анализа (РСА), широко используется для оценки «совершенства» или бездефектности различных минералов (каолинит, апатит, слюда, кварц) и кристаллической фазы целлюлозы. Индекс кристалличности кварца применяется для исследования кварцсодержащих пород, как для чисто геологических исследований, так и для технологической оценки кварцевого сырья. Методически он является количественной оценкой степени уширения рефлексов рентгемограммы кварца квинтуплета 67-69° с индексами миллера 212, 203, 031, подобранных эмпирически [1]. Физический механизм этого уширения может быть разный для разных пород и при разной технологической обработке. Вклад в уширение дают размеры, ориентация и деформация зёрен, плотность дислокаций, количество структурных примесей Al, Ti, OH, щелочных металлов. Поэтому индекс кристалличности рекомендуется для исследования групп месторождений одного генезиса [2] и как вспомогательный метод [3]. Нами были исследованы изменения индекса кристалличности высокочистого кварца из суперкварцитов на различных технологических этапах обогащения и проведён анализ картирования кристаллических ориентаций, полученных методом дифракции обратного рассеяния электронов (ДОЭ). Показано, что химическое обогащение кварца кислотным травлением смесью соляной и плавиковой кислоты повышает индекс кристалличности во всех случаях, кроме предварительной высокотемпературной прокалки при 1300 и 1400 °C и наибольшее локальное разупорядочивание структуры кварца сосредоточено на границах зёрен и малоугловых границах (< 7°), при этом часть наиболее разупорядоченных областей имеет повышенное содержание флюидных включений.

Исследование проведено в рамках выполнения гос. задания по Проекту № 0284-2021-0004 «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол».

1. Murata K. J., Norman M. B. An index of crystallinity for quartz //American Journal of Science. – 1976. – Т. 276. – №. 9. – С. 1120-1130.
2. Жабоедов А.П., Зимин М.Д., Непомнящих А.И., Сапожников А.Н. // Обогащение руд. 2020.№1. С. 36-40.
3. Marinoni N., Broekmans M. A. T. M. Microstructure of selected aggregate quartz by XRD, and a critical review of the crystallinity index //Cement and concrete research. – 2013. – Т. 54. – С. 215-225.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.314

РЕЛАКСАЦИЯ РЕАКТИВНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ПРОЦЕССЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО МАРТЕНСИТНОГО ПЕРЕХОДА В СПЛАВЕ TiNi

Иванов А.М.[1], Беляев С.П.[1], Реснина Н.Н.[1], Андреев В.А.[2,3]
Санкт Петербургский государственный университет, Санкт Петербург, Россия
[2]ООО «Промышленный центр МАТЭК-СПФ», Москва, Россия
[3]Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия
E-mail: *ileavenovasky@gmail.com*

Ранее было обнаружено, что в закаленном сплаве $Ti_{49}Ni_{51}$ в процессе изотермической выдержки под постоянной нагрузкой может протекать прямое мартенситное превращение, которое сопровождается изменением обратимой деформации. Вместе с тем, кроме изменения деформации, мартенситные переходы могут сопровождаться релаксацией и генерацией реактивных напряжений. Целью настоящей работы явилось исследование эффекта релаксации реактивных напряжений в процессе изотермического прямого мартенситного превращения в заневоленных образцах сплава $Ti_{49}Ni_{51}$.

В качестве объектов исследования использовали проволочные образцы сплава $Ti_{49}Ni_{51}$ диаметром 2 мм, которые были закалены от 850 ^{o}C (10 мин) в воде и дополнительно термоциклированы 100 раз в интервале температур от -196 ^{o}C до 100 ^{o}C чтобы стабилизировать свойства сплава. После указанной обработки сплав испытывал термоупругое мартенситное превращение B2 ↔ B19’ при температурах $M_н$ = -43℃, $M_к$ = -63 ^{o}C, $A_н$ = -24 ^{o}C, $A_к$ = -9 ^{o}C. Для изучения релаксации напряжений в процессе изотермического превращения использовали две методики. В первой - образцы в полностью мартенситном состоянии растягивали до 2 %, разгружали, после чего фиксировали деформацию образца. В заневоленном состоянии образцы нагревали и охлаждали для реализации генерации и релаксации напряжений. В процессе релаксации реактивных напряжений на этапе охлаждения, образцы выдерживали в течение 20 минут при постоянной температуре. По второй методике, образцы охлаждали до температуры выдержки под различными постоянными нагрузками, фиксировали деформацию и выдерживали в течение 20 минут. Напряжение варьировали в интервале от 150 до 300 МПа. Температуры выдержки выбирали как внутри, так и вне температурного интервала прямого мартенситного превращения в образце под нагрузкой.

Обнаружено, что в процессе изотермической выдержки заневоленного образца сплава $Ti_{49}Ni_{51}$ релаксация реактивных напряжений не наблюдалась, если выдержку проводили на этапе охлаждения в заневоленном состоянии (первая методика). Если выдержку проводили после охлаждения под напряжением (вторая методика), то в процессе выдержки в заневоленном состоянии наблюдали релаксацию напряжения. Величина релаксации напряжения за 20 минут выдержки зависит от температуры выдержки немонотонным образом и максимальное значение наблюдается при температуре равной $M_н^{\sigma}$ – 6 ^{o}C. Зависимость максимальной величины релаксации напряжений от действующего напряжения является монотонной и максимальное значение 25 МПа было обнаружено при напряжении 300 МПа.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №18-19-00226).

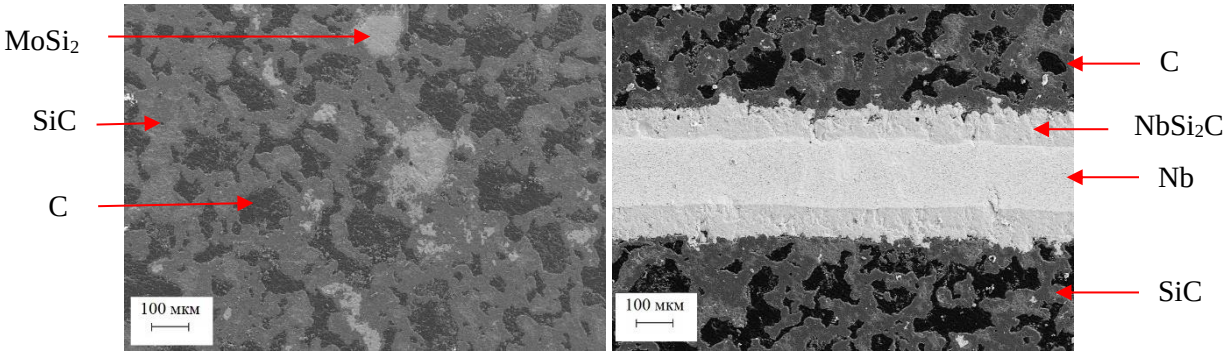
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.315

МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ SiC КЕРАМИКИ И ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ И СИЛИЦИДОВ

Каледин А.В., Шикунов С.Л., Курлов В.Н.

Институт физики твёрдого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, kaledin@issp.ac.ru

Разработанный в ИФТТ РАН способ получения керамических материалов на основе карбида кремния путём жидкофазного силицирования пористых углеродных матриц [1,2], а также способ получения газоплотных SiC покрытий [3] позволяют повысить температуры эксплуатации изделий вплоть 1500ºС при работе в окислительной атмосфере. Несмотря на высокую механическую и термоударную прочность, теплофизические характеристики и стойкость к окислению SiC керамики ее использование в высоконагруженных конструкциях сильно ограничено из-за низкой трещиностойкости и хрупкого характера разрушения. Для расширения областей применения керамических материалов на основе SiC нами разрабатывается методика получения металлокерамических композиционных материалов силицированием смеси углерода и тугоплавких металлов (Ti, Mo, Nb, W) и сплавов в виде мелкодисперсных порошков, фольг и стержней. Конечный композиционный материал имеет SiC матрицу, армированную металлами и/или их силицидами, которые формируются в процессе пропитки исходной заготовки кремнием. Получены как изотропные структуры с включениями силицидов металлов (Рис.1а), так и слоистые композиты на основе SiC, армированные слоями металлов и их силицидов (Рис.1б).



(а) (б)

Рис.1. Микроструктура SiC-C керамики, армированной: (а) микрочастицами силицида молибдена; (б) слоями ниобия и силицида ниобия.

Такой материал потенциально имеет нехрупкий характер разрушения в широком диапазоне температур. Трещиностойкость при низких температурах может быть повышена за счет армирования металлическими компонентами, а при высоких температурах за счет силицидов металлов, которые также обеспечивают хорошую адгезию с керамикой.

Список литературы.

1. Шикунов С.Л., Курлов В.Н. // Журнал технической физики, 2017, 87(12), 1871-1878.
2. Шикунов С.Л., Курлов В.Н., Шикунова И.А. Композиция углеродной заготовки для получения SiC/C/Si керамики и способ получения SiC/C/Si изделий// Патент России № 2573146. 2014.
3. Курлов В.Н., Шикунова И.А., Шикунов С.Л., Ершов А.Е. Способ нанесения газоплотного покрытия из карбида кремния// Патент России №2601049. 2015.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.316

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ КОНТАКТНОГО ПЛАВЛЕНИЯ СПЛАВОВ АМГ3 С ПРИПОЯМИ AL-MG И AL-ZN

Смагина Е.А., Шутов И.В., Камаева Л.В., Королев М.Н., Кривилев М.Д.

Удмуртский государственный университет,
г. Ижевск, Россия, shutiny@gmail.com
Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
г. Ижевск, Россия, lara_kam@mail.ru
Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,
г. Троицк, г. Москва, Россия

Сплавы на основе системы Al–Mg широко используются в качестве конструкционных материалов в авиа-, судо- и машиностроении, а также в космической отрасли. АМг3 – это деформируемый сплав Al-Mg, который может содержать до 3,8 масс.% Mg. Этот сплав обладает высокой стойкостью к коррозии и легкой свариваемостью при электродуговой сварке, поэтому выбран в качестве модельного для исследования процессов, происходящих при пайке твердым припоем (ПТП) [1]. Данная технология, также известная в литературе как высокотемпературная пайка, широко применяется при изготовлении теплообменников на основе Al со сложной геометрией, а также рассматривается как основа для создания новых способов устранения механических повреждений в условиях космоса.

В работе исследованы процессы плавления и кристаллизации эвтектических сплавов Al-Mg с содержанием 68, 69,5 и 71,6 ат.% Mg на подложке из листового АМг3. Согласно проведенной дифференциально-сканирующей калориметрии, сплав АМг3 начинает плавиться при T = 585°C, температура плавления эвтектики Mg/Mg17Al12, которая реализуется при 69,5 ат.% Mg, составляет 437°C. Температура ликвидус сплавов Al32Mg68 и Al28,5Mg71,5 – 460-470°C, поэтому исследуемые образцы нагревали до 480-500°C, выдерживали при этой температуре в течение 5 мин и контролируемо охлаждали. Исследования микроструктур в области контактов сплавов Al-Mg, которые использовались в качестве припоев и АМг3 проводились с помощью оптической микроскопии. Полученные эвтектические микроструктуры имеют типичную ячеистую структуру, характерную для стержневых эвтектик «металл – химическое соединение». Для анализа возможности использования данных сплавов как основы для припоя был проведен сравнительный анализ полученных микроструктур с микроструктурами, образованными при плавлении припоя HTS-2000, который состоит из сплава Zn-Al с добавками Mg и Ag, на подложке из листа АМг3.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 18-12-00438) на оборудовании Центра коллективного пользования физико-химических методов анализа и изучения свойств и характеристик поверхности наноструктур, материалов и изделий УдмФИЦ УрО РАН. Работа выполнялась в рамках программы ДПИ на МКС, целевые работы «Реал». Авторы выражают благодарность ЦНИИмаш (г. Королев) за сопровождение космического эксперимента «Реал».

1. Sekulic D.P., Galenko P.K., Krivilyov M.D. et al.// Int. J. Heat Mass Transfer. – 2005. – № 12. P. – 2372-2384.

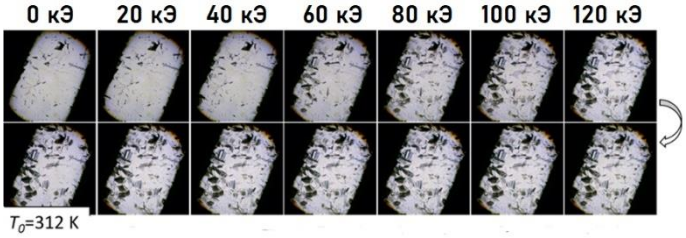
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.317

МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА NI-MN-CU-GA НА ОСНОВЕ ОПТИЧЕСКИХ *IN SITU* И ИМПУЛЬСНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ ДО 500 КЭ

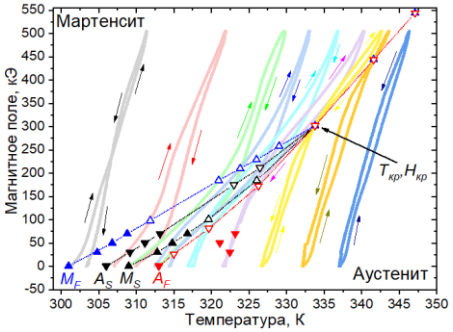
Каманцев А.П., Кошкидько Ю.С., Дильмиева Э.Т., Коледов В.В., Шавров В.Г.
Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
г. Москва, Россия, kaman4@gmail.com

Сплавы Гейслера из семейства Ni2MnGa с добавками 4-го элемента, в частности Cu, давно привлекают внимание исследователей [1], благодаря улучшенным функциональным свойствам: более высокому магнитокалорическому эффекту (МКЭ), уменьшенной шириной теплового гистерезиса и более низкими температурами мартенситного фазового перехода (ФП). В сплаве Гейслера Ni50Mn18.5Ga25Cu6.5 магнитоструктурный ФП 1-го рода наблюдается в области температур 316–350 К. Поверхность образца данного сплава исследовалась оптическим методом in situ в полях биттеровского магнита до 120 кЭ, подробно метод описан в [2]. Из рис. 1а видно, что образец изначально находился в аустенитной фазе (H = 0 кЭ), намагничивание же образца приводит к зарождению мартенситной фазы и при H = 120 кЭ практически вся поверхность образца занята мартенситными двойниками. Последующее размагничивание образца уменьшает объёмную долю мартенсита в сплаве, однако на металлографической поверхности преимущественно наблюдается мартенсит, т.е. магнитоиндуцированный ФП 1-го рода при T0 = 312 К в магнитных полях до 120 кЭ необратим.

Максимальное значение МКЭ в сплаве Гейслера Ni2Mn0,74Cu0,26Ga, полученное по методу, описанному в [3], составило ΔT =20,5 К при T0 = 309,2 К в импульсном поле H = 500 кЭ. На основе измерений намагниченности в полях до 70 кЭ и прямого измерения МКЭ в 500 кЭ построена фазовая H-T диаграмма сплава, на которой обнаружена критическая точка при Tкр = 333,8 К и Hкр = 302 кЭ (рис. 1б). Выше критической точки реализуется безгистерезисное поведение как при ФП 2-го рода.



(а)



(б)

Рис.1. (а) Формирование мартенситной фазы в сплаве Гейслера Ni2Mn0.74Cu0.26Ga под действием магнитного поля до 120 кЭ в адиабатических условиях при начальной температуре T0 = 312 K. (б) Магнитная фазовая H-T диаграмма сплава Гейслера Ni2Mn0,74Cu0,26Ga: полные треугольники– значения температур ФП в магнитном поле MF, AS, MS, AF из измерений намагниченности, пустые треугольники – точки перегиба кривых H(T), соответствующие ФП в магнитном поле.

Благодарности
Работа выполнена в рамках гранта Президента РФ № МК-355.2020.2.

1. Sokolovskiy V. et al //Journal of Applied Physics. – 2013. – Т. 114. – №. 18. – С. 183913.
2. Dilmieva E.T. et al. //Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. – 2017. – Т. 81. – №. 11. – С. 1283-1288.
3. Kamantsev A. P. et al. //Physics of the Solid State. – 2020. – Т. 62. – №. 1. – С. 160-163.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.318

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ НА ОПТИЧЕСКИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ГРУППЫ $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$

Касимова В.М.[1], Козлова Н.С.[1], Бузанов О.А.[2], Забелина Е.В.[1], Лагов П.Б.[1,3], Павлов Ю.С.[3]

[1]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» (НИТУ «МИСиС»), г. Москва, Россия,* kasimova.vm@misis.ru, kozlova_nina@mail.ru, zabelina.ev@misis.ru, lagov2000@mail.ru

[2]*АО «Фомос-Материалы», г. Москва, Россия,* buzanov@newpiezo.com

[3]*Институт физический химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН), г. Москва, Россия,* rad05@bk.ru

Сцинтилляционные гранаты, легированные церием, Gd3Al2Ga3O12:Ce (GAGG:Ce) в настоящее время находят применение в следующих областях: ядерная медицина, физика высоких энергий, космические исследования, системы безопасности, радиологическая разведка, освещение. Однако его фундаментальные свойства изучены недостаточно, в частности остается невыясненным процесс дефектообразования в этих кристаллах. Исследования, направленные на изучение природы дефектной структуры, прежде всего необходимо проводить на исходных нелегированных матрицах. В связи с этим, в данной работе исследуются кристаллы составов GAGG:Ce, Gd3Al2Ga3O12 и Gd3Al3Ga2O12 в исходном состоянии и после облучения.

Кристаллы выращены в АО «Фомос-Материалы». Исследования оптических свойств и микротвердости проводились в 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 и отражения, на основании которых рассчитаны коэффициенты преломления, показатели ослабления, оптическая ширина запрещенной зоны. Методом Виккерса на микротвердомере Aaffri DM 8 B Auto измерена микротвердость, которая по формуле Мотта [1] переведена в твердость по Моосу.

Установлено заметное влияние замещения в катионной подрешетке и облучения электронами на оптические и механические свойства.

Благодарности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90211.

1. Sirdeshmukh D.B., Sirdeshmukh L., Subhadra K.G., Kishan Rao K. and Bal Laxman S. // Bulletin of Materials Science. – 2001. – V. 24. – №. 5. – P. 469-473.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.319

ОБЪЕДИНЕНИЕ НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ СПИРАЛЕЙ В КРИСТАЛЛЫ α-- И ß-- МАРГАНЦА

В.С.Крапошин[1], А.Л. Талис[2], А.А. Эверстов[1]
[1] МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
[2] Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва

Концепция сведения структуры кристалла к упаковке стержней [1] в последнее время была дополнена аппаратом, позволяющим определять и некристаллографическую симметрию таких стержней. В частности, вершины кубического кристалла ß-Mn принадлежат стержням из плотнейших линейных упаковок почти правильных тетраэдров (ребра деформированы на 2%) [2]. Каждый такой стержень (тетрагеликс) обвивается спиралью из тетраэдров, которая содержит все его вершины и однозначно соответствует спирали из 60 тетраэдров, охватывающей половину вершин в 120-вершинном 4-мерном аналоге икосаэдра - политопе {3,3,5}, содержащем 600 объединяемых по граням правильных тетраэдров [3]. В ß-Mn каждый тетрагеликс обвивает и вторая спираль, почти конгруэнтная данной, а вместе две эти спирали с тетраэдрами между ними образуют спираль с винтовой осью 4_1 из деформированных взаимопроникающих икосаэдров. Фрагменту этой спирали, содержащему 15 икосаэдров, в политопе {3,3,5} соответствует замкнутая спираль с винтовой осью 15/4 (вращение на 96^0) из 15 икосаэдров, внутри которой находится тор, разбитый на 30 тетраэдров. Некристаллографическая симметрия кристалла ß-Mn определяется локальными винтовыми осями 8/3 (вращение на 135^0) тетрагеликсов, квадратами которых являются винтовые оси 4_1. Кубическая система осей 8/3 определяется проекцией в 3-мерное евклидово пространство E^3 из 6-мерной кубической решетки B_6 [2], но B_6 не содержит политопа {3,3,5}. Нами показано, что только отображение в E^3 из 8-мерной решетки E_8 (в которой есть оси 8-го порядка) сохраняет в ß-Mn и симметрии из B_6, и топологию объединения тетраэдров в икосаэдрические спиральные подструктуры политопа {3,3,5}. Квадратная решетка таких икосаэдрических спиралей охватывает не только все атомы ß-Mn, но и все тетраэдры разбиения структуры ß-Mn [3].

Объемно-центрированная кубическая структура α-Mn интерпретирована сборкой стержней вдоль каждого кубического направления. Каждый стержень состоит из четырех тетрагеликсов, объединенных по ребрам вокруг общей оси 2-го порядка. Соответственно структура α-Mn представляет собой примитивную кубическую решетку, собранную из таких четверных стержней [4]. Упаковка α-Mn подобна упаковке β-Mn: в обеих модификациях стержни располагаются по квадратной решетке. Но в α-Mn каждый стержень включает в себя четыре тетрагеликса, объединенных друг с другом по общим ребрам, а стержень в ß-Mn представляет собой икосаэдрическую спираль. Эти стержни обладают некристаллографической симметрией, определяемой решеткой E_8, которая содержит кубические кристаллические решетки в качестве подрешеток.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №19-02-00085). Доступ к электронным научным ресурсам был предоставлен ИНЭОС РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

1.M. O'Keefee, S. Andersson. *Acta Cryst.* 1977, A33, P. 914-923
2. S.Lidin, D.Fredrickson. *Symmetry*. 2012, 4, P.537-544
3. A.Talis, A.Everstov, V.Kraposhin. *Acta Cryst*. 2021, A**77**, P.7–18A.
4. Talis, A.Everstov, V.Kraposhin. *Acta Cryst.* 2020, B76, P.948-954

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.320

XAFS-ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ СЛОЖНОГО СОСТАВА В ЦКП СЦСТИ

Кривенцов В.В.

Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия, kriven@mail.ru

В представленном докладе, на примере работ, выполненных на станции EXAFS спектроскопии ЦКП Сибирский Центр Синхротронного и Терагерцового Излучения (Новосибирск) показаны возможности XAFS метода, рассмотрены аппаратурные и методические особенности, методики обработки экспериментальных данных и анализа полученной структурной информации. Хорошо известно, что развитие источников синхротронного излучения (СИ) в последней трети 20 века привело к значительному прогрессу в применении методов, реализованных на СИ, таких как рентгеновская спектроскопия поглощения XAFS (XANES/EXAFS) для исследования в различных областях науки: материаловедении, физики и химии твердого тела, химической технологии, геохимии, катализе, неорганической и элементоорганической химии и др. Метод XAFS (XANES/EXAFS) спектроскопии является мощным инструментом исследования состояния элементов и локальной структуры разнообразных систем в любых агрегатных состояниях: сплавов, дисперсных систем, растворов, ультраразбавленных систем, стекол и др. В наши дни разнообразные методические варианты метода XAFS реализованы и успешно развиваются в Центрах синхротронного излучения, как за рубежом, так и в России - КИСИ (Москва) и СЦТСИ (Новосибирск). Следует отметить, что метод XAFS спектроскопии наиболее эффективен при изучении наноразмерных систем “сложного” состава, с характерным размером менее 10 нм и низким содержанием по исследуемому элементу, когда применение других структурных методов не информативно и заведомо проблематично. В докладе для широкого круга разнотипных наноразмерных и наноструктурированных систем продемонстрированы возможности XAFS спектроскопии, как самостоятельного метода, так и в комплексе с другими физическими методами исследования – РФА СИ, ПЭМВР, РФЭС, СЭМ и др. Продемонстрированы перспективы использованного комплексного подхода для исследования различных функциональных наноматериалов: наноструктурированных систем для хранения актиноидов; наносплавов с улучшенными характеристиками (включая модифицированные наноразмерными оксидными добавками); модельных капсулированных упорядоченных наноструктур; биологических наноматериалов; низкопроцентных нанокомпозитных катализаторов; тестовых геологических образцов сложного состава; тонких металлических и полупроводниковых пленок и др. В результате выполненных исследований получена новая достоверная информация об усредненной кристаллической структуре, элементном и фазовом составах, зарядовых состояниях, локальной структуре для исследованных систем. Данные, полученные различными методами, хорошо согласуются между собой.

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ 19-03-00530, 19-05-50046. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

10.26201/ISSP.2020/FKS-2.321

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ ОЦК-ФАЗЫ И ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ SIGMA ФАЗЫ СИСТЕМЫ FE-V ДЛЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Удовский А.Л., Купавцев М.В.

Институт металлургии и материаловедения им.А.А.Байкова РАН, г. Москва, Россия, audovskiy@imet.ac.ru, mikhail_77@mail.ru

Для тестирования результатов квантово-механических расчетов (КМР) энтальпии образования (ΔH) химического соединения со структурой sigma – фазы в системе Fe-V [1-3] и оценки его химической стабильности относительно ОЦК фаз чистых компонентов и ОЦК растворов в этой системе для основного состояния возникает необходимость расчета ΔH(x) ОЦК – растворов в зависимости от состава. Для расчета полной энергии в зависимости от состава в настоящей работе использовали супер-ячейки, 16- и 54- атомов, каждая из которых содержала по 1 атому примеси, что эквивалентно составам сплавов 6,25, 1,85 ат.%. КМР проводили с помощью пакета WIEN2k для ФМ состояния, использовали радиусы maffin-tin Rmt(Fe)=2,03 и Rmt(V)=2,12, точность для самосогласованных расчетов $\delta Etot=10^{-7}$–10^{-8} Ry/cell, Rkmax=8, число плоских волн k=2000 и 5000, учитывали релаксацию решетки по силам с точностью δF=0,5 mRy/bohr. Результаты представлены на рис.1, включая результаты КМР по ΔH(x) ОЦК и энтальпии образования химических соединений со структурой sigma фазы в ФМ состоянии относительно ОЦК –Fe и V.

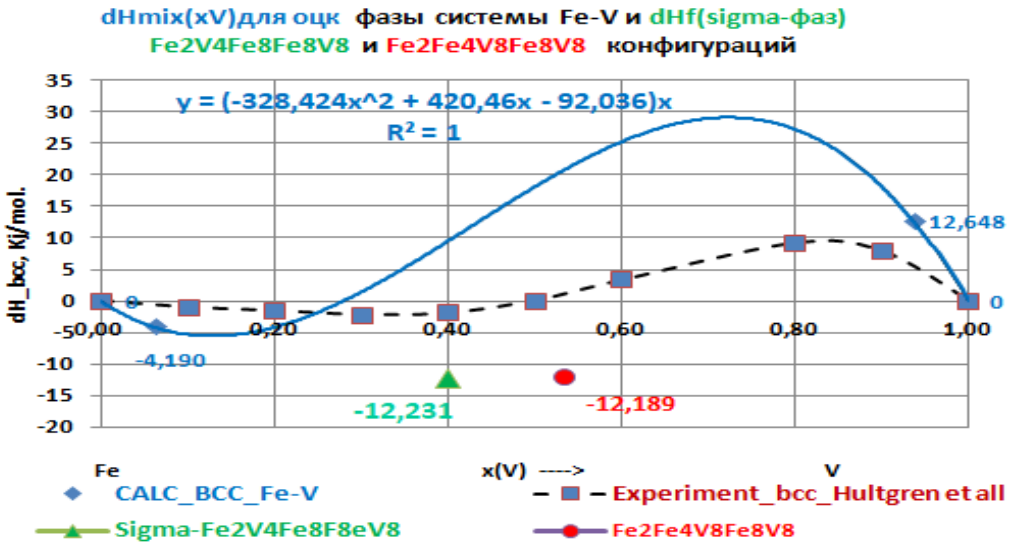


Рисунок 1. Результаты расчетов ΔH для ФМ ОЦК фазы системы Fe-Vдля основного состояния в сравнении с результатами экспериментов [4] при 1600 K.

Благодарности.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00530.

1.Удовский А.Л., Купавцев М.В. Девятая Междун. научная конференция “Химическая термодинамика и кинетика” Сборник научных трудов, г. Тверь, 20–24 мая 2019 г., С.335-336
2. Kupavtsev M,V., Udovsky A.L.// J. Phys.: Conf. Series, (2020) 1431 012056
3. Udovsky A.L. and Kupavtsev M.V.//. J. Phys.: Conf. Ser. (2020) 1658 012067
4. Hultgren R.et all., Sel. Values of Therm. Properties of Binary Alloys, ASM, Ohio, 1973.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.322

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В БЫСТРОЗАКАЛЕННЫХ ЛЕНТАХ AL-NI-Y В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОГО И ДЕФОРМАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЙ

Ладьянов В.И.[1], Стерхова И.В.[1,2], Мокшин А.В.[1,2], Носенко В.К.[3]

[1]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск, Россия
[2]Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия
[3]Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, г Киев Украина
ivanov@maul.ru

В настоящее время получение аморфно-нанокристаллических композитов на основе Al с добавками переходных и редкоземельных металлов является весьма перспективным. Это обусловлено их высокими прочностными характеристиками в сочетании с хорошей пластичностью и коррозионной стойкостью. Формирование подобной структуры возможно в результате частичной кристаллизации аморфных сплавов при различных внешних воздействиях (термическом, деформационном, облучением нейтронами или электронами). При этом, установление условий формирования аморфно-нанокристаллической структуры и ее эволюция в процессе дальнейшей обработки являются актульными задачами. В связи с этим в работе проведены сравнительные исследования процессов кристаллизации быстрозакаленных лент $Al_{90}Y_{10}$ и $Al_{87}Ni_8Y_5$ при термическом и деформационном воздействиях.

Быстрозакаленные ленты $Al_{90}Y_{10}$ и $Al_{87}Ni_8Y_5$ получали методом спиннингования ограниченной струи расплава на быстровращающийся медный диск в защитной атмосфере гелия. Интенсивная пластическая деформация кручением (ИПДК) проводили в наковальнях Бриджмена при комнатной температуре и давлении 3ГПа с вращением от 0 до 12 оборотов. Скорость вращения нижней наковальни Бриджмена составляла 1об/мин. Рентгеновский дифракционный анализ структуры проведен на θ-θ дифрактометре D8 Advance (Bruker AXS) в геометрии параллельного пучка с Cu-Kα излучением, параболическим зеркалом Гёбеля (60мм) на первичном пучке и полупроводниковым Si(Li) детектором Sol-XE. Уточнение структуры на основе дифракционных данных выполнено с использованием TOPAS 4.2. Исследование термической стабильности и процессов кристаллизации быстрозакаленных лент до и после ИПДК изучали с помощью дифференциального сканирующего калориметра Perkin Elmer Diamond DSC. Измерения проводили в интервале температур от 50 до 600ºC со скоростью нагрева 10ºC/мин.

Проведенные исследования показали, что в условиях непрерывного нагрева кристаллизация быстрозакаленных лент $Al_{90}Y_{10}$ и $Al_{87}Ni_8Y_5$ начинается по первичному механизму с выделения пересыщенного твердого раствора на основе α-Al. При этом для ленты $Al_{90}Y_{10}$ при последующем нагреве переход в кристаллическое состояние протекает через промежуточную стадию с образованием метастабильной фазы Al_4Y. Установлено, что под действием ИПДК при давлении 3ГПа с вращением от 0 до 12 оборотов полной кристаллизации быстрозакаленных лент не происходит. Кристаллизация лент $Al_{90}Y_{10}$, инициируемая деформацией протекает с образованием метастабильных фаз Al_4Y (после 1 оборота) и Al_2Y (после 4 оборотов), причем формирование последней не наблюдается в процессе непрерывного нагрева исходной ленты. Кристаллизация лент $Al_{87}Ni_8Y_5$, под действием ИПДК протекает с образование кристаллов α-Al после 1 оборота.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 19-12-00022.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.323

k -RESOLVED ELECTRONIC STRUCTURE IN THE BAND-BENDING REGION OF HEAVILY SILICON-DOPED GaN

Lev L.L.[1,2], Maiboroda I.O.[3], Grichuk E.S.[3], Chumakov N.K.[3], Schröter N.B.M.[1], Husanu M.-A.[1,4], Schmitt T.[1], Aeppli G.[1], Zanaveskin M.L.[3], Valeyev V.G.[3], Strocov V.N.[1]

[1]*Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, 5232, Villigen-PSI, Switzerland*
[2]*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia*
[3]*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*
[4]*National Institute of Materials Physics, Magurele, Romania*
lll_ru@mail.ru

GaN heavily doped with Si (GaN:Si) finds a growing number of applications in modern micro- and optoelectronics. One of them is GaN-based high electron mobility transistors (GaN-HEMTs) which are the barebone of the 5G telecom. GaN:Si is employed in such devices for non-alloyed Ohmic contacts, which reduces parasitic losses and improves reliability of the devices compared to the conventional alloyed contacts. A novel approach to form such contacts is a selective deposition of GaN:Si [1,2]. This approach has a number of advantages, making it possible to achieve a contact resistance of less than 0.2 Ω·mm.

Electronic structure of heavily doped GaN:Si is explored here in a wide range of electron concentrations (ne) with soft-X-ray angle-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES) supported by supercell DFT band structure calculations and high-sensitivity Hall measurements. Comparison of the ARPES results with calculations identifies the preferential location of Si atoms as substitutional for Ga. The ARPES spectra directly visualize the valence- and conduction-band electron dispersions in GaN:Si resolved in electron momentum (k) where the population of the conduction-band pockets follows ne. Our quantitative analysis of the ARPES data takes into account the surface band-bending, with the potential variation described by self-consistent Poisson-Schrödinger equations. This model adequately describes the peculiarities of the ARPES spectra caused by the surface band bending, including photon-energy dependence of the apparent Fermi momentum. The latter approaches its bulk value, consistent with magnetotransport ne, at sufficiently high energy when the photoelectron mean free path exceeds the spatial extension of the band-bending region. The achieved theoretical and experimental results resolve a number of fundamental questions on physics of heavily doped GaN:Si in the perspective of its device applications.

The soft-X-ray ARPES experiments have been performed at the ADRESS beamline of the Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Switzerland. The sample growth and characterization partially used the equipment of the Resource Center for Electrophysical Methods, and the computations the resources of the Federal Collective Usage Center "Complex for Simulation and Data Processing for Mega-science Facilities", both affiliated with the National Research Center "Kurchatov Institute" (http://ckp.nrcki.ru). I.O. Maiboroda, N.K. Chumakov and V.G. Valeyev were partially supported by the Russian Foundation for Basic Research under grants no. 19-07-01090 and 20-07-00813. N.B.M. Schröter was partially supported by the Microsoft Station Q Program.

1. Maiboroda I.O., Andreev A.A., Perminov P.A., Fedorov Y.V., Zanaveskin M.L. // Tech. Phys. Lett. – 2014 – V. 40 – P. 488–490.
2. Song B., Hu M.Zh, Qi M., Nomoto K., Yan X., Cao Y., Jena D., Xing H.G. // IEEE El. Dev. Lett. – 2016 – V. 37 – P. 16–19.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.324

MARTENSITE TRANSFORMATION IN TINI/TI2NICU NANO-PLATES: EXPERIMENTAL STUDY, DENSITY FUNCTIONAL THEORY AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

P.V. Lega[1], A.I. Kartsev[2]

1 Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, Mokhovaya Str. 11, Build. 7, 125009, Moscow, Russia

2 Stanford Institute for Materials and Energy Sciences, SLAC National Accelerator Laboratory, Menlo Park, CA-94025, USA

E-mail: lega_peter@list.ru

The TiNi nano-plates deploying martensitic transition at critical temperature T_c was studied. We demonstrated that $T_c(h)$ has a strongly descending character as a function of plate thickness h. Whereat the critical thickness h_c exist at which the transition is completely suppressed. Combining ab initio and molecular dynamics simulations it was shown that austenite is more stable than martensite at nanometer-scaled plates. While the complete suppression of the phase transition occurs for a 10 nm thick plate which is in good agreement with an experimentally observed h_c value.

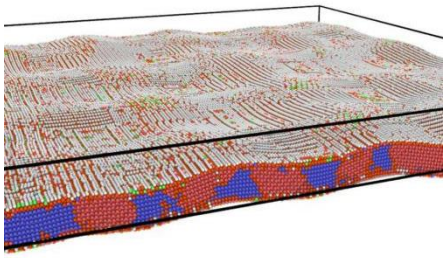


Figure 1. Formation of the TiNi austenite phase simulated using the molecular dynamics method within the LAMMPS package using periodic boundary conditions along the x and y axes, and finite boundary conditions along the z axis. The size of the system is 0.3 * 10^6 atoms. The blue color denotes austenite (B2), the red color corresponds to the martensite phase (B19`), and the white-green color corresponds to the atoms located on the surface and does not correspond to any of the bulk phases.

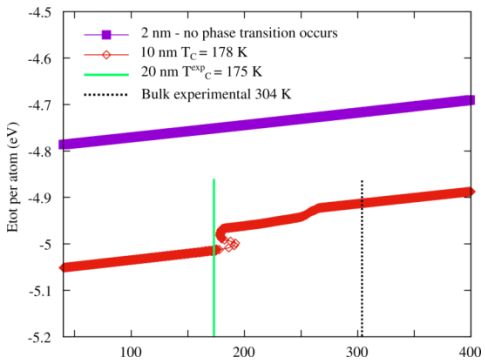


Figure 2. Temperature dependence versus total Energy per atoms for 10 nm and 2 nm thickness of the TiNi plate using molecular dynamics simulation.

We performed an investigation on the crystal structures in the local areas of the wedge-shaped plates of the TiNi and Ti_2NiCu alloys in the thickness range of 10–100 nm in the temperature range of 100–400 K. We also observed that the area of the austenite phase expands with a decrease in temperature. While the transition temperature decreases with decreasing plate thickness and having a hysteretic character. The aforementioned behaviour is found to be in good agreement with density functional theory and molecular dynamics simulations (Fig. 1 and Fig. 2). This approach based on a nano-size control paves a new way of the shape memory effect modulation and fine-tuning work parameters of nanodevices.

Acknowledgement

The study was supported under the grant № 19-57-45024

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.325

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МОРФОЛОГИЮ ПОЛЫХ СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ SiO_2

Масалов В.М., Сухинина Н.С., Ходос И.И.[1], Зверькова И.И., Жохов А.А., Емельченко Г.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твёрдого тела Российской академии наук,
[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук,
г. Черноголовка, Московская обл., Россия, masalov@issp.ac.ru

Нано- и микрокапсулированные материалы находят широкое применение в различных отраслях науки и техники. Некоторые свойства оболочек капсул (плотность, пористость, проницаемость) могут меняться в зависимости от особенностей синтеза и термообработки. Целью данной работы было исследование трансформации частиц типа «ядро-оболочка» ПММА/SiO_2 и полых частиц из диоксида кремния после термического воздействия.

Гибридные частицы ПММА/SiO_2 были синтезированы темплатным методом двумя способами: гидролизом винилтриметоксисилана (ВТМС) в присутствии аммиака (тип I) и L-аргинина (тип II). В качестве шаблона были использованы сферические ПММА-частицы со средним диаметром ~ 440 нм. Выращенные частицы «ядро-оболочка» имели размер ~ 505 нм.

Полые частицы обоих типов имеют практически идеальную сферическую форму (рис. 1). Однако кремнезёмные оболочки частиц типа II при температурном воздействии могут деформироваться, образуя вмятины (рис. 1б).

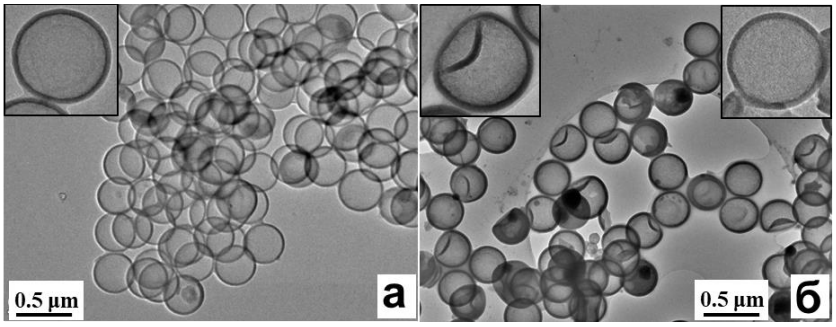


Рис. 1. ПЭМ-изображения полых частиц SiO_2 типа I (а) и типа II (б) после отжига 600 °C 24 ч

В ходе электронно-микроскопических исследований была обнаружена трансформация гибридных частиц с необычной усадкой полимерного ядра под действием электронного пучка сканирующего и просвечивающего микроскопов. В ходе термообработки полые частицы претерпевают усадку до 30% диаметра. Была проведена оценка исходной пористости оболочек, составившая величины: ~ 59% (частицы типа I) и ~ 67.5% (частицы типа II). Выявленные особенности уплотнения кремнеземной оболочки в процессе термообработки позволяют контролировать пористость оболочек полых частиц кремнезёма и открывают дополнительные возможности для нано- и микрокапсулирования различных материалов, которые могут найти применение в здравоохранении, фармакологии, композитах, металлургии и других отраслях.

Данная работа выполнена в рамках госзаданий ИФТТ РАН (№ 0032-2017-0001) и ИПТМ РАН (№ 075-00355-21-00) с использованием оборудования ЦКП ИФТТ РАН и ЦКП в г. Черноголовке.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.326

SURFACE ALLOYING OF 3Kh2V8F AND 5KhNM DIE STEELS BY MEANS OF ELECTRON BEAM IN VACUUM WITH B_4C AND Al TREATMENT PASTES

Мишигдоржийн У.Л., Семенов А.П., Улаханов Н.С., Милонов А.С., Дашеев Д.Э.

Институт физического материаловедения СО РАН,
г. Улан-Удэ, Россия, druh@mail.ru

Processes of modifying surface properties of 3Kh2V8F and 5KhNM tool steels by electron beam alloying (EBA) in a vacuum by boron and aluminum treatment mixtures were considered. Boron carbide B_4C or $0.8B_4C+0.2Al$ powders were preliminarily mixed with organic glue and applied as a paste with a thickness of 0.5-1.0 mm on test specimens made of 3Kh2V8F and 5KhNM steels. The treatment mixtures were heated (ultrafast melting) with a stationary electron beam for 20–300 s at a specific power of ~ $5.7 \cdot 10^2$ W/mm^2 (scanning electron beam diameter ~ 1–2 mm) [1]. The residual pressure in the vacuum chamber was 10^{-4}-10^{-3} Pa, the accelerating voltage was 20-24 kV, and the electron beam current was up to 0.1 A.

The metallographic analysis on the cross-sections showed that as a result of EBA, uniform layers with high roughness and without visible signs of zoning (layering) with a thickness of up to ~ 500 μm were formed. The modified layers have a distinct border with the base metal. The crystallization process starts after the electron beam heating elimination; thus, a dendrite-like structure of the modified layer was formed. An increase in microhardness from 350 to 1550 HV occurred in the surface zone of the layer due to phase and structural transformations from the liquid state (X-ray phase analysis revealed the presence of Fe_2B, Fe_3Al, $FeAl_3$, AlB_2, and $AlFe_2B_2$ phases). Thermal stresses were developed, contributing to the hardening and plastic deformation processes [2].

Wave oscillations of the microhardness profiles were observed along with the modified layer thickness, probably associated with shock-wave processes under the intense accelerated electron beam's impact. Oscillations of microhardness indirectly indicate the effect of long-range impact under the electron-beam processing conditions due to the formation of thermal wedges during the charged particles introduction, radiation-stimulated diffusion, layers restructuring in a more complex microstructure and phase composition.

Благодарности. Работа выполнена в рамках НИОТР с Восточно-Сибирским государственным университетом технологий и управления (договор № 68/2020) за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-79-10163).

1. Новакова А.А., Сизов И.Г., Гвоздовер Р.С., Голубок Д.С., Киселева Т.Ю., Семенов А.П., Смирнягина Н.Н., Прусаков Б.А. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2003. – №3. – С. 99-103.
2. Итин В.И., Коваль Н.Н., Месяц Г.А., Ротштейн В.П., Чухланцева И.С., Щанин П.М. // Источники электронов с плазменным эмиттером. – Новосибирск: Наука, 1983. – С. 104-110.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.327

ДИСЛОКАЦИИ В СТРУКТУРЕ КОГЕРЕНТНОЙ ГРАНИЦЫ ДВОЙНИКОВАНИЯ ∑3 В МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ И ИХ ВКЛАД В РЕКОМБИНАЦИОННУЮ АКТИВНОСТЬ

Пещерова С.М.[1], **Непомнящих А.И.**[1], **Павлова Л.А.**[1], **Чуешова А.Г.**[1], **Вдовин В.И.**[2], **Гутаковский А.К.**[2], **Якимов Е.Б.**[3], **Феклисова О.В.**[3], **Федина Л.И.**[2]

1 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук г. Иркутск, Россия, spescherova@mail.ru
2 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
3 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук

Известно, что когерентные границы двойникования ∑3 характеризуются наиболее совершенной структурой, и, в наименьшей степени, по сравнению с другими типами границ в мультикристаллическом кремнии, способны проявлять рекомбинационную активность [1,2]. Однако, механизмы двойникования и причины появления их рекомбинационной активности являются на данный момент предметом дискуссий. Предполагается, что образование множественных двойников может быть связано с локальными термическими напряжениями, возникающими на границе раздела кристалл-расплав, а появление активных ∑3 границ может быть обусловлено их морфологической нестабильностью на фронте кристаллизации [3], которая сопровождается потерей когерентности и образованием дислокаций [1,2]. В данной работе обсуждаются результаты исследований границ ∑3 методами просвечивающей высокоразрешающей электронной микроскопии (HREM), дифракции обратно-рассеянных электронов (EBSD) и наведённого тока (EBIC). На основе HREM показано, что структура рекомбинационно активных (по данным EBIC метода) ∑3 границ в зерне с ориентацией {112} и идентифицированных методом EBSD как ∑3(180^0)-[211], соответствует границам ∑3(60^0)-[111]. Это позволяет решить существующие противоречия в интерпретации численного представления ∑3 границ - {112} по данным EBSD [4]. С использованием большеугловой темнопольной сканирующей моды HREM (HAADF) установлено, что рекомбинационная активность границ ∑3(60^0)-[111] связана с образованием моноатомных ступенек в их плоскости на расстоянии 3-5 мкм, где локализуются дислокации. Вклад дислокаций в рекомбинационную активность данных границ достигает 23%. Полученные данные о количестве дислокаций в границе ∑3 в исследованном зерне с ориентацией {112} соответствуют результатам по выявлению дислокаций при селективном химическом травлении в травителе Sopori.

Исследование проведено в рамках выполнения гос. Заданий по Проектам № 0284-2021-0004 «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол» и № 0306-2019-0011 «Технологии и атомистическая диагностика твердотельных наногетеросистем».

Литература:

1. K. Adamczyk, R. Søndena, G. Stokkan, E. Looney, M. Jensen, B. Lai, M. Rinio, and M. Di Sabatino, Journal of applied Physics 123, 055705 (2018);
2. Y Ohno, T Tamaoka, H Yoshida, Y Shimizu , K Kutsukake, Y Nagai, and N Usami, Applied Physics Express 14, 011002 (2021);
3. Kuan-Kan Hu. Kensaku Maeda, Keiji Shiga, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Materialia 7, 100386 (2019);
4. S. Würzner, R. Helbig, C. Funke, H.J. Moller, J. Appl. Phys. 108 (8) (2010).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.328

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОЭРОЗИОННОЙ ОБРАБОТКИ НА УДЕЛЬНОЕ ПОВЕРХНОСТНОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ТОКОВЫХ КОЛЛЕКТОРОВ ИЗ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ CROFER 22 H

Пикалов О.В., Деменева Н.В., Бредихин С.И.

ИФТТ РАН,
г. Черноголовка, Россия, pikalov@issp.ac.ru

Электрохимические генераторы на твердооксидных топливных элементах (ТОТЭ) работают в достаточно жестких условиях – высокие рабочие температуры 600-900°C, постоянная подача кислородного и углеводородного газов, высокие механические нагрузки. Поэтому к выбору материалов и методов их обработки предъявляются достаточно высокие требования.

Ферритные нержавеющие хромистые стали (17-24% Cr) используются для изготовления токосъемных деталей (токовых коллекторов) ТОТЭ. Электроискровая (электроэрозионная) обработка рассматривается в качестве метода изготовления деталей токовых коллекторов ТОТЭ ввиду своих неоспоримых преимуществ: высокая точность, получение деталей сложных форм, недорогая эксплуатация. К возможным недостаткам данного метода могут быть отнесены характерные неровности микрорельефа поверхности, появляющиеся в процессе изготовления, а также изменения химического состава и физических свойств приповерхностного слоя детали. Данная работа была посвящена исследованию влияния режимов изготовления деталей токовых коллекторов из стали Crofer 22 H методом электроэрозии на микроструктуру, состав приповерхностного слоя, а также основную эксплуатационную характеристику токовых коллекторов - удельное поверхностное сопротивление ρ_{ASR}.

Методами электронной микроскопии, EDX, XRD было показано, что поверхность стали после эродирования имеет характерные неровности в виде лунок с трещинами, а состав поверхности при изменении силы тока 1A, 5A, 10 A меняется, соответственно: $(Cr,Fe)_7C_3 \rightarrow Fe_3C \rightarrow Fe_3C$, $Fe_{2.5}C$. Наличие углерода в поверхностном слое связано с переносом материала графитового электрода-инструмента и разложением смазочно-охлаждающей жидкости, подаваемой на стальные образцы, в момент пробоя.

После эрозионной обработки образцы покрывались покрытиями на основе металлического никеля толщиной 8 мкм [1], так как токовые коллекторы из нержавеющих хромистых сталей используются только с защитными покрытиями, которые препятствуют нежелательной диффузии хрома к поверхности. Для измерения удельного поверхностного сопротивления собирали симметричные ячейки переходов:

|Crofer 22 H после эрозионной обработки с покрытием - (La0.8Sr0.2MnO3 - катод) - |Crofer 22 H после эрозионной обработки с покрытием |

Результаты исследования временных зависимостей ρASR(t) в модельных условиях катодной камеры ТОТЭ на воздухе при температуре 850ºC и постоянной подаче тока плотностью 0.5 А/см2 представлены на рисунке 1. Повышение рабочего тока при эродировании приводит к увеличению сопротивлений контакта ферритная сталь с покрытием – катод, а вид зависимостей имеет схожий характер: сопротивление со временем уменьшается. Уменьшение сопротивления с течением времени объясняется изменением состава защитного покрытия вследствие взаимной диффузии на переходе сталь – покрытие с образованием слоя проводящих оксидов на основе магнетита [2].

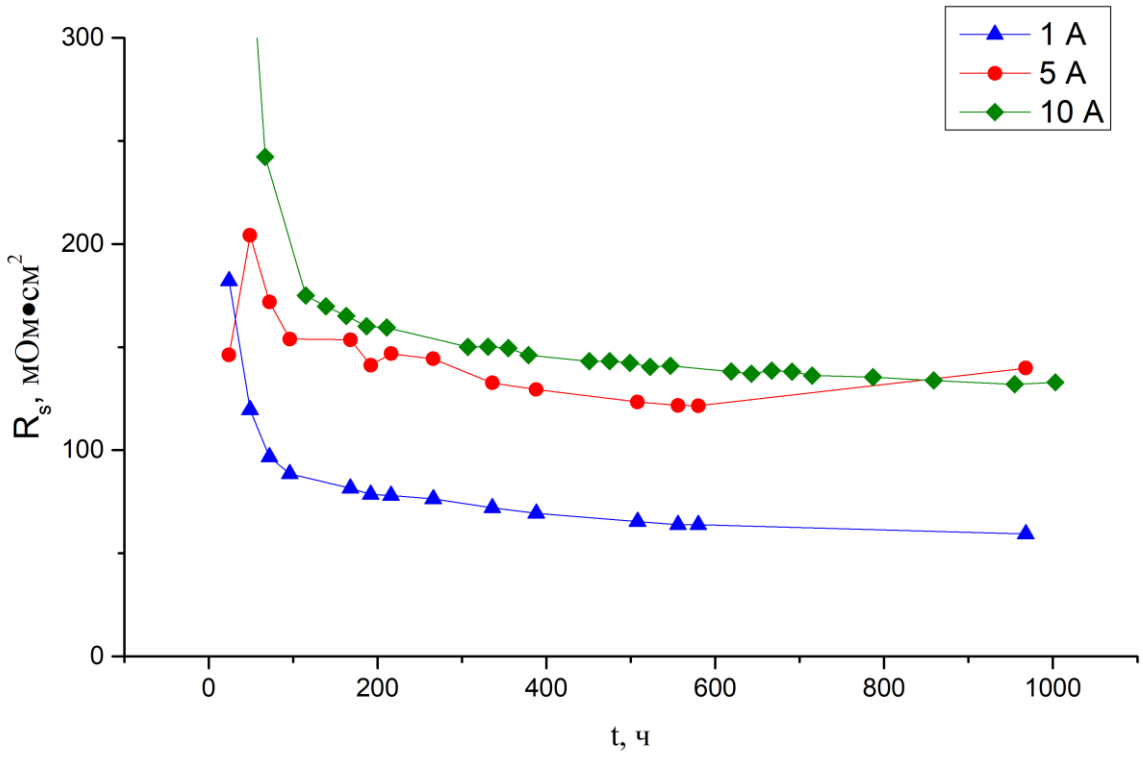


Рисунок 1. Зависимости величин удельного поверхностного сопротивления перехода Crofer 22 H после эрозионной обработки с покрытием - ($La_{0.8}Sr_{0.2}MnO_3$ - катод) от времени нахождения под токовой нагрузкой 0,5 А/см^2 при температуре 850°С на воздухе. Эрозионная обработка образцов проводилась при силе тока 1А, 5А, 10А.

1. Деменева Н.В., Матвеев Д.В., Хартон В.В., Бредихин С.И. // Электрохимия. – 2016. – 52 (7). – С. 759 - 766.

2. Demeneva, N.V. Kononenko O.V., Matveev D.V., Kharton V.V., Bredikhin S.I. // Materials Letters. – 2019. – Vol. 240. – P. 201–204.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.329

ELECTRONIC AND DEFECT STRUCTURE OF PEROVSKITE-LIKE MOLYBDATES FROM THE FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS

Politov B.V., Zhukov V.P., Kozhevnikov V.L.

Institute of Solid State Chemistry UB RAS,
Yekaterinburg, Russia, politoffboris@yandex.com

Commercialization of intermediate-temperature solid oxide fuel cells (IT SOFC) is a hot topic for modern science and technology. Still, the design of efficient and stable IT SOFC electrode materials remains one of the unsolved issues in the field. Perovskite-like compounds Sr2MeMoO6, where Me is a 3d metal, are considered as promising anode materials. It should be noted however, numerous experimental studies of Sr2MeMoO6 molybdates do not focus on fundamental characteristics of these materials. For instance, a comparison of the literature data on conductivity [1] shows that the nature of the 3d metal has a very strong, non-monotonic influence on the electrical transport and optical properties of Sr2MeMoO6 oxides. Accordingly, the theoretical understanding of the reasons underlying such phenomena is still lacking. Finally, the data on the concentration of various lattice defects and their effect on the electron density distribution for molybdates considered are very contradictory.

Therefore, within the framework of this research, the goal was to study the electronic, crystal and defect structure of strontium molybdates containing different transition metals – V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni and Ti using ab initio approach. All calculations were performed with the help of density functional theory (DFT) implemented in the VASP software package.

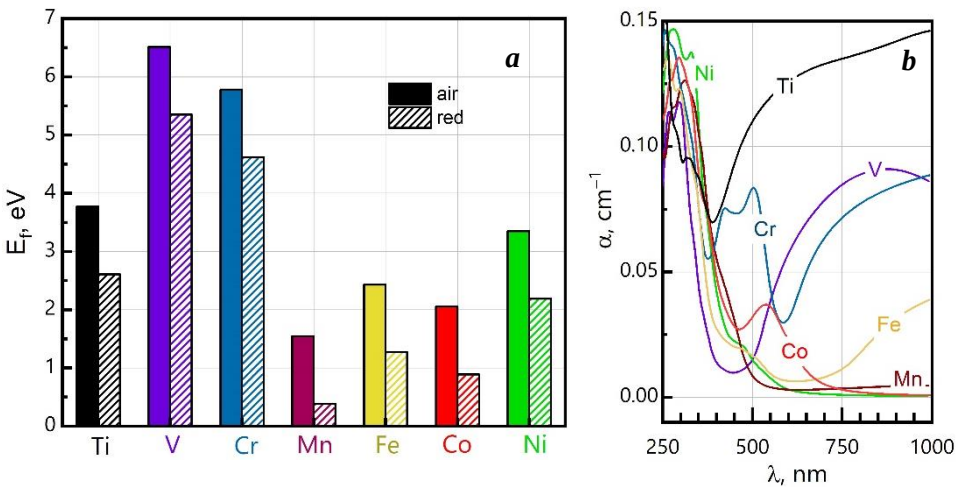


Fig. 1. Formation energies of oxygen vacancies at a temperature of T = 1000 K (*a*) and optical absorption coefficient α (*b*) for Sr_2MeMoO_6 molybdates.

The obtained results indicate a sufficient role of 3d-element nature on the crystal, electron and defect structure of compounds considered, fig. 1. As can be seen, the energy of defect formation in oxidizing (air) /reducing (red) conditions can vary in the range of up to 6 eV. Moreover, the optical properties in the Ti → Ni row change dramatically suggesting metallic-like conductivity for Sr2MeMoO6, where Me = Ti, V, Cr, Fe.

Acknowledgements: this work was supported by RFBR (grant № 19-33-90173)

1. Nicholas B. Childs et al, Journal of applied physics, 113, 243506 (2013).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.330

PHASE TRANSORMATIONS, HYPERFINE AND MAGNETIC INTERACTIONS IN $La_{1-x}Sr_xMnO_{3+\delta}$ (x = 0.05, 0.10, 0.20; δ=0, 0.10-0.15)

Pchelina D.I.[a]*, Sedykh V.D.[b], Chistyakova N.I.[a], Rusakov V.S.[a], Alekhina Yu.A.[a], Tselebrovskiy A.N.[a], Fraisse B.[c], Stievano L.[c] Sougrati M.T.[c]

[a*]*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia,* di.pchelina@physics.msu.ru
[b]*Institute of Solid State Physics, RAS, Chernogolovka, Russia*
[c]*ICGM, CNRS, ENSCM, Montpellier, France*

Alkaline-earth metal-doped perovskites $La_{1-x}A_xMnO_3$ ($A = Ca^{2+}$, Sr^{2+} and Ba^{2+}) belong to the class of mixed valence manganites ceramics with a strong correlation between the structural, magnetic and electronic properties, which make them attractive for both applied and fundamental science. $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ for example retains scientific relevance because of its current widespread use, from colossal magnetoresistance to heterogeneous catalysis, as perspective devices for magnetic and spin electronics, to electrodes for fuel cells and creation of temperature stabilizing coatings [1-3].

We characterized the structural and magnetic behavior of $La_{1-x}Sr_xMnO_{3+\delta}$ (x = 0.05, 0.10, 0.20) of stoichiometric (LS-S) and nonstoichiometric (LS-NS) composition by combination of magnetic and Mössbauer measurements performed on the enriched ^{57}Fe probe atoms (2%) in the structure from 300 K to 80 K. The results were used to understand the influence of the doping level on the phase transformations, hyperfine and magnetic interactions and cluster formation.

The synthesized single-phase samples LS-NS and LS20-S (x = 0.20) showed the same rhombohedral symmetry – *R-3c* space group for each sample and PM-FM transition at T_C. LS5-S (x = 0.05) and LS10-S (x = 0.10) adopted into a mixture of orthorhombic phases, distorted perovskite *Pnma* space group structure, with FM and AFM arrangement of Mn spin moments at T_C and T_N. The distorted structures transformed from orthorhombic to rhombohedral with increasing Sr concentration. Aliovalent substituting Sr^{2+} for La^{3+} induced partial Mn oxidation to Mn^{4+} and formation of holes oxygen type, associated antiferromagnetically with the high-spin configuration of the Mn^{3+} (the transition of a delocalized electron from the *p*-level of O to the *d*-level of Mn) [4]. The Jan-Teller effect or the destruction of the orbital order, as well as the competition between double- and super exchange interaction attached with the manganese ratio Mn^{3+}/Mn^{4+} was demonstrated upon the cation doping level and δ value. It can be proposed that the greatest effect exerted by double exchange interaction.

At temperatures below magnetic ordering, the relaxation character of the Mössbauer spectra, the type of magnetization dependences demonstrated the spontaneous formation of localized magnetic clusters. The calculations showed that the *Pnma* phases were characterized by a much larger size of the magnetic cluster than for the *R-3c* phase. With an x increase, an increase in the saturation magnetization and the blocking temperature observed. Neel and Curie temperatures were determined.

Acknowledgments.
The work was funded by RFBR, project number 19-32-90222.

1. G.C. Milward, M.J. Calderón, P.B. Littlewood // Nature. 433 (2005) 607–610.
2. B. Sahoo, D. Behera // J. Mater. Sci. Mater. Electron. 30 (2019) 12992–13004.
3. C. Aen, S. Liang, E. Dagotto // Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. 85 (2012) 174418.
4. E.L. Nagaev // Phys. Usp. 39 (1996) 781–805.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.331

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРУ И МАРТЕНСИТНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ TINI, ПОЛУЧЕННОМ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОЙ НАПЛАВКИ

[1]Реснина Н.Н., [1]Поникарова И.В., [2]Palani I.A., [2]Shalini Singh, [2]Jayachandran S., [1]Беляев С.П., [2]Anshu Sahu, [1]Калганов В.Д., [2]Ashish K Shukla

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия
[2]Discipline of Mechanical Engineering Indian Institute of Technology Indore, Indore, India

Аддитивные технологии являются перспективным способом получения изделий из сплавов с памятью формы на основе TiNi сложной формы, однако структура полученных образцов является неоднородной, что ухудшает их функциональные свойства. Структура образцов формируется при послойном синтезе и зависит от скорости охлаждения расплава, толщины слоя, теплопроводности наплавленного материала и подложки, которые можно менять за счет контролируемого управления параметрами синтеза. В связи с этим особенно важно установить взаимосвязь между параметрами синтеза и структурой и свойствами сплава TiNi с памятью формы. Этот вопрос хорошо исследован для синтеза образцов из сплава TiNi, полученных методом послойного лазерного плавления. Этот метод применим для получения миниатюрных изделий, в основном для медицинских применений. Вместе с тем метод послойной электродуговой наплавки применяют для получения массивных объектов, однако влияние параметров синтеза на структуру и функциональные свойства сплава TiNi остаются неизученными. Исследование данного вопроса явилось целью работы.

Многослойные образцы сплава TiNi были получены методом послойной электродуговой наплавки, при которой варьировали напряжение дуги, химический состав проволоки TiNi, состав и температуру подложки. Исследование структуры показало, что напряжение дуги влияет только на структуру первого слоя. Это связано с тем, что при увеличении напряжения дуги увеличивается температура расплава, что приводит к подплавлению большей части подложки, элементы которой смешиваются с расплавом и влияют на структуру и фазовый состав первого слоя. Материал подложки влияет на структуру первого слоя и химический состав фазы TiNi в слоях. Если проволоку из эквиатомного никелида титана наплавляли на титановую плодложку, то химический состав фазы TiNi не менялся, поскольку избыток титана в расплаве проводил к формированию фазы Ti_2Ni. Если на титановую подложку наплавляли заникелнный никелид титана, то концентрация титана в фазе TiNi в нижних слоях была выше, чем в наплавляемой проволоке, и уменьшалась до номинального состояния при увеличении номера слоя. В этом случае, каждый слой испытывал мартенситные переходы при различных температурах, что приводило к многостадийному изменению деформации при реализации эффектов памяти формы. Показано, что использование стальной подложки для наплавления никелида титана нецелесообразно, поскольку внедрение атомов железа в фазу TiNi подавляет мартенситные переходы. Увеличение температуры подложки влияет на фазовый состав слоев и приводит к формированию частиц вторичных фаз, что выравнивает концентрацию никеля в фазе TiNi и оказывает влияние на температуры и последовательность мартенситных переходов.

Работа выполнена в рамках совместного проекта РНФ-DST (№19-49-02014)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.332

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ВАЛЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ Fe В ЗАМЕЩЕННОМ ФЕРРИТЕ СТРОНЦИЯ $Sr_2LaFe_3O_{9-\delta}$

Седых В.Д., Рыбченко О.Г., Барковский Н.В., Иванов А.И., Кулаков В.И.
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия,
sedykh@issp.ac.ru

В перовскитоподобных оксидах условия синтеза и термообработки могут существенно влиять на их структуру и свойства, регулируя валентное состояние железа путем введения кислородных вакансий.

Методами рентгеновской дифракции и мессбауэровской спектроскопии проведено исследование структурных особенностей и валентных состояний железа в замещенном феррите стронция $Sr_2LaFe_3O_{9-\delta}$ для разных условий синтеза и термообработки (отжиг в вакууме (10^{-3} Torr) при температурах 400 - 650°C). Исследован ряд составов, различающихся содержанием кислорода. Наличие одной вакансии на три перовскитные ячейки переводит ромбоэдрическую структуру $Sr_2LaFe_3O_9$ в ромбическую $Sr_2LaFe_3O_8$, промежуточные составы по кислороду согласно рентгеновским данным не однофазные, рис. В $Sr_2LaFe_3O_8$ железо находится только в трехвалентном состоянии. Исходя из мессбауэровских данных, в образце с ромбоэдрической структурой $Sr_2LaFe_3O_9$ ионы железа имеют два валентных состояния: Fe^{4+} с октаэдрическим симметричным кислородным окружением и усредненное валентное состояние $Fe^{3.5+}$. Образец с ромбической структурой $Sr_2LaFe_3O_8$, согласно мессбауэровским данным, магнитный, железо имеет валентное состояние Fe^{3+} с двумя кислородными окружениями, октаэдрическим и тетраэдрическим, как и в браунмиллеритной фазе $Sr_2Fe_2O_5$ [1]. В $Sr_2LaFe_3O_8$ на три перовскитных ячейки приходится одна вакансия, тогда как в $Sr_2Fe_2O_5$ одна вакансия приходится на две ячейки, поэтому структура $Sr_2LaFe_3O_8$ менее искажена. В браунмиллеритной фазе $Sr_2Fe_2O_5$ происходит чередование октаэдрических и тетраэдрических слоев. В ромбической элементарной ячейке $Sr_2LaFe_3O_8$, согласно [2], каждый слой катионов железа в тетраэдрической координации отделен двумя слоями железа в октаэдрической координации. Серия отжигов в вакууме при разных температурах позволила проследить характер перехода из одной однофазной структуры $Sr_2LaFe_3O_9$ в другую $Sr_2LaFe_3O_8$ с изменением содержания кислорода, изучить перераспределение валентных состояний железа, магнитные переходы из парамагнитного состояния в магнитно-упорядоченное.

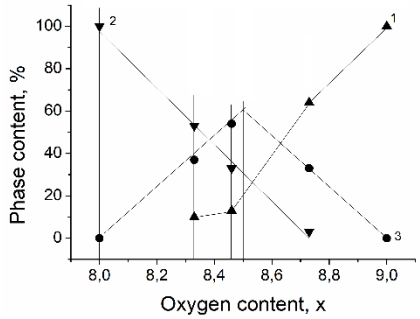


Рис. Зависимость фазового состава $Sr_2LaFe_3O_x$ от содержания кислорода согласно рентгеновским данным. Вертикальные линии показывают кислородное содержание в исследуемых образцах, оцененное из мессбауэровких данных.
1 – ромбоэдрическая фаза, 2 – ромбическая фаза $Sr_2LaFe_3O_8$, 3 – промежуточная ромбическая фаза, похожая на фазу феррита стронция $Sr_4Fe_4O_{11}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ

1. В.Д. Седых, О.Г. Рыбченко, Э.В. Суворов, А.И. Иванов, В.И. Кулаков. // ФТТ. – 2020. – Т. 62. – Вып. 10. – С. 1698-1705.
2. P.D. Battle, N.C. Gibb, S. Nixon. // J. Solid State Chem. – 1989. – V. 79. – P. 75-85.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.333

ЛОКАЛЬНЫЙ МЕХАНИЗМ ДИФФУЗИОННОГО ПЕРЕСКОКА ПРИ ПЕРЕНОСЕ АТОМОВ ПРИМЕСИ ВНЕДРЕНИЯ В γ-Fe

Семенов М.Ю., Крапошин В.С., Арестов В., Королев И.П., Панчо-Рамирес В.А.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия, Semenov.m.yu@bmstu.ru

Элементарный акт диффузионного перескока атомов примеси внедрения совпадает по механизму с локальной атомной перестройкой: переброской диагонали в атомном ромбе (рис. 1). Локальная плотная упаковка (ГП или ГЦК) из октаэдров и тетраэдров преобразуется в локальную призматическую упаковку типа цементитной. Свободный объем в призме больше свободного объема октаэдра, что и позволяет размещать в призме междоузельный атом. Междоузельный атом реконструирует свое октаэдрическо-тетраэдрическое окружение в призматическое окружение. Перескок междоузельного атома соответствует локальному преобразованию в призму в соседнем периоде решетки, а «бывшая» призма в месте предыдущего пребывания междоузельного атома реконструируется в обычную междоузельную пустоту (октаэдр + тетраэдр). Область локальной перестройки (октаэдр → призма) перемещается в кристалле, это и есть диффузионная траектория примеси.

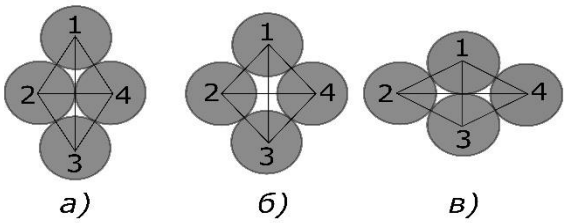


Рис. 1. Локальная атомная перестройка переброской диагонали в четырехатомном кластере (ромбе): (*а*) → (*б*) → (*в*)

Атом углерода в аустенитный октаэдр (и тем более в тетраэдр) не вмещается, но центрированный алмазный тетраэдр углерода имеет ребро той же длины, что и тетраэдр аустенита. Поэтому, диффузия углерода в γ-Fe идет по тому же механизму преобразования пустоты тетраэдра и октаэдра в призму, центрированную атомом углерода.

Выполнили расчеты энергетического порога преобразования кластера (*а*)→(*б*) по методике [1] для температурного интервала 1200-1600 К. Энергетический порог преобразования приравняли полной энергии активации диффузии углерода и азота, из которой вычли произведение температуры и энтропии активации диффузии, которую получили в соответствии с подходом Зинера [2]. Получили значения энтальпии активации диффузии C и N в γ-Fe на интервале 1200-1600 К, равные 162±35 и 167±35 кДж/моль, соответственно, которые находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными: 148-157 и 169 кДж/моль [3]. Разброс расчетных значений частично объясняется недостаточными экспериментальными данными о зависимости упругих констант железа от температуры в аустенитной области.

1. Семенов М.Ю., Крапошин В.С., Талис А.Л., Симич-Лафицкий Н.Д. // МиТОМ. – 2020. – № 2. – С. 8-17.
2. Zener C. // Imperfections in nearly perfect crystals. – 1952. – P. 289-314.
3. Le Claire A.D. //Diffusion in solid metals and alloys. Ed. Mehrer H. //Landolt-Bornstein new series. – Vol. III (26). – Springer-Verlag, 1990. P. 471-503.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.334

ЭЛАСТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В [001]-МОНОКРИСТАЛЛАХ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Суриков Н.Ю., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.

Томский государственный университет,
г. Томск, Россия, jet_n@mail.ru

Исследование посвящено выяснению влияния дисперсных частиц на величину и температурную зависимость эластокалорического эффекта (ЭКЭ) в монокристаллах сплава $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$, ориентированных вдоль [001]-направления. В рамках работы исследованы монокристаллы после следующих термических обработок: 1) отжиг 1253 К, 1 ч, закалка в воду; 2) отжиг 1253 К, 1 ч, закалка в воду + старение при 573 К 1,5 ч. Старение приводит к выделению наноразмерных частиц Ti_3Ni_4 (d < 10 нм), которые, согласно [1], упрочняют матрицу и расширяют температурный интервал сверхэластичности (СЭ).

В соответствии с данными дифференциальной сканирующей калориметрии в закаленных монокристаллах наблюдается одностадийное B2–B19’ мартенситное превращение (МП) при охлаждении и нагреве. Величина изменения энтальпии ΔH при обратном эндотермическом МП составляет 13,5 Дж/г. Выделение наноразмерных частиц приводит к развитию МП через ромбоэдрическую R-фазу с изменением энтальпии при обратном B19’–R–B2 МП ΔH = 9,9 Дж/г. Экспериментально полученное значение теплоемкости C_p составляет 525 Дж/(Кг·К)

Температурный интервал ЭКЭ определяется температурным интервалом СЭ и составляет 243–298 К и 253–373 К для закаленных и состаренных монокристаллов, соответственно. Максимальная величина ЭКЭ ΔT_{ad} в закаленных монокристаллах составляет 13,3 К, в состаренных – 16,4 К. В состаренных монокристаллах наблюдается особенность развития ЭКЭ: начиная с температуры T_R = 278 К происходит плавное изменение величины ΔT_{ad} с 10,3 К (T = 278 К) до 15,0 – 16,4 К (T = 313 – 373 К), обусловленное, согласно [1], сменой последовательности МП под нагрузкой с R–B19’ на B2–R–B19’.

Проведена теоретическая оценка максимального теоретического ресурса ЭКЭ с использованием следующего соотношения [2]:

$$\Delta T_{ad} \approx -\frac{\Delta H}{C_p},$$

Малая разница между теоретическими (18,9 К) и экспериментальными (16,4 К) значениями величины ЭКЭ в состаренных кристаллах, обусловлена высокими критическими напряжениями образования мартенсита под нагрузкой, развитием полностью обратимой СЭ в широком интервале температур (120 К) с узким механическим гистерезисом, отвечающим за диссипацию энергии при развитии МП. Низкие прочностные свойства аустенита закаленных кристаллов в совокупности с широким гистерезисом сужают температурный интервал СЭ (55 К), в свою очередь определяющий температурный интервал ЭКЭ, и увеличивают диссипацию энергии. Это приводит к низким значениям величины ΔT_{ad} 13,3 К по сравнению с теоретическими значениями (25,8 К). Старение 573 К 1,5 ч оптимизирует калорические свойства материала и повышает его эффективность в системах твердотельного охлаждения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90107

1. E. E. Timofeeva et al. // Technical Physics Letters – 2019. – V. 45. – No. 2. – P. 115–118
2. Y. Wu, E. Ertekin, H. Sehitoglu. // Acta Materialia. – 2017. – V. 135. –P. 158–176

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.335

СТРУКТУРНО-СИММЕТРИЙНОЕ МНОГООБРАЗИЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ ПИРОХЛОРОВ

Таланов М.В.[1], Таланов В.М.[2]

[1]*Южный Федеральный университет, г.Ростов-на-Дону, Россия,* mvtalanov@gmail.com
[2]*Южно-Российский государственный политехнический университет, Новочеркасск, Россия*

Пирохлоры образуют многочисленное семейство материалов с богатым разнообразием технологически важных функциональных свойств, востребованных для различных практических применений. Для пирохлоров характерны структурные превращения, включая изосимметрийные, реконструктивные, а также фазовые переходы второго рода и первого рода, близкие ко второму роду. В работе, на основании комбинации результатов теоретико-группового и кристаллографического анализов, нами построена единая классификации 343 типов возможных упорядоченных фаз, которые являются производными только одной исходной структуры-архетипа пирохлора $A_2B_2X_6Y$ и реализуются с помощью различных конкретных физических механизмов (параметров порядка). Нами установлены иерархические отношения между упорядоченными пирохлорами [1]. Симметрийный анализ внутренних соотношений между структурными степенями свободы и атомным порядком в кристаллах пирохлора позволил выделить шесть номинальных классов атомного порядка в зависимости от подрешетки, в которой происходит упорядочение. Показано, что учет роли несобственных параметров порядка в формировании кристаллической структуры низкосимметричных фаз приводит к существованию только четырех классов атомного порядка: X, XY, ABX и ABXY. Для каждого из этих абстрактных классов атомного порядка было построено модифицированное дерево Бернигхаузена, иллюстрирующее пути симметрийных отношений группа-подгруппа и участие соответствующих параметров порядка. Дан краткий обзор экспериментально известных упорядоченных пирохлоров, согласующихся с нашими структурными предсказаниями [1]. Наконец, указаны основные направления применения теоретических результатов: интерпретация происхождения фазовых переходов, предсказание физических свойств, выбор модели для расшифровки структуры, проектирование новых материалов, классификация иерархических отношений между фазами. Это исследование представляет собой руководство по симметрии для обширного семейства упорядоченных пирохлоров и показывает происхождение его структурного разнообразия.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-72-00086).

1. Talanov M.V., Talanov V.M. // Chem. Materials. – 2021. – V. 33. – in press. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c04864

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.336

ГИБРИДНЫЙ ПОДХОД ПРИМЕНЕНИЯ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ И СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТОВ СТРУКТУРНЫХ, МАГНИТНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ SIGMA- И MU - ФАЗ С УЧЕТОМ ОБЛАСТЕЙ ГОМОГЕННОСТИ В СИСТЕМАХ FE- (CR, V, MO)

Удовский А.Л.
Институт металлургии и материаловедения им.А.А.Байкова РАН,
г. Москва, Россия, audovskiy@imet.ac.ru

Концентрационную область стабильности ОЦК фазы лимитирует наличие охрупчивающих соединений, например, в системах Fe–(Cr,V,Mo,W) σ – и/или Лавес (λ) – и μ-фаз. Моделирование структурных и термодинамических свойств (ТС) σ–фазы для бинарных систем с учетом ее области гомогенности для квантово-механических расчетов (КМР) представляет значительные сложности. Это обусловлено наличием в этих фазах: 1) области гомогенности, 2) увеличением размерности задачи в пространстве Etot – a – c (a, c – параметры решетки), 3) большого числа атомов в кристаллической ячейке (30/39атомов в кристаллических структурах sigma/mu фаз -, содержащих 5 подрешеток), с атомами, имеющими разное координационное окружение (КО), и, 4) смешанным заполнением всех 5 -ти подрешеток атомами обоих компонентов, 5) наличием магнетизма, 6) наличием большого размерного фактора(РФ). Например, в системе Fe-Mo линейный РФ равен 9,8%, что эквивалентно ≈ 32% относительной разности объемов атомов компонентов. Применение статистических моделей приводит к большому числу энергетических параметров парных межатомных взаимодействий атомов компонентов, равным 52=25. В целях проведения расчетов структурных и ТС σ–фазы с учетом ее области гомогенности в системах Fe-(Cr,V,Mo) в работе [1] была разработана упрощенная статистическая трех-подрешеточная модель (3ПМ) для σ – фазы. Основная идея упрощения описания заключалась в замене 5 подрешеток реальной структуры σ – фазы 3-мя модельными подрешетками с разными парциальными магнитными моментами атомов на модельных подрешетках, на которых могут размещаться атомы с разным КО (координационные числа 12, 14, 15) и минимизации функционала свободной энергии по конфигурациям. 3ПМ позволила рассчитать распределение атомов обоих компонентов по всем подрешеткам σ – фазы, ТС в зависимости от состава и температуры (с привязкой к результатам КМР для парамагнитных состояний для расчетов 8 независимых энергетических параметров 3ПМ) и фрагмент фазовой диаграммы оцк/sigma равновесие системы Fe-Cr [1].

В последнее время удалось разработать новую методологию применения КМР [2] полных энергий связи (Etot), энергий смешения оцк –фаз с использованием суперячеек и энергий образования σ– и μ– фаз: она была применена для КМР оцк – фаз с применением 16- и 54 атомных суперячеек, а также химических соединений стехиометрических составов в системах Fe – (V, Mo). Эта методология позволяет расширить применение КМР не только для стехиометрических составов для σ– и λ– фаз, но также рассчитать энергетические параметры 3ПМ для основного состояния в целях последующего решения системы уравнений состояния (полученной путем минимизации функционала свободной энергии по независимым конфигурационным степеням свободы) для широкой области составов и температур.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00530.

1. Udovsky A.L., Kupavtsev M.V. // J. Min. Metall. Sect. B. –2012. – v.48. – 3. – P.483 – 489.
2. Udovsky A.L.// AIP Conference Proceedings.–2019. – 2186. – 030008. – P. 1-4.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.337

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ И ТОЧЕЧНО-ПОДОБНЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

Макаров А.С. [1], Кончаков Р.А. [1], Кретова М.А. [1], Кобелев Н.П. [2], Хоник В.А[1].

[1]Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия
[2]Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия
a.s.makarov.vrn@gmail.com

Известно, что собственные межузельные дефекты в кристаллах имеют гантельную (расщепленную) конфигурацию, которая энергетически наиболее устойчива. По сравнению с вакансиями, межузельные гантели имеют в несколько раз большую энтальпию формирования и примерно на порядок большую энтропию формирования. В результате равновесная концентрация вакансий гораздо больше равновесной концентрации межузельных гантелей, за исключением температур, близких к температуре плавления. Точечные дефекты ответственны за различные релаксационные процессы. Однако, экспериментальная идентификация типа дефектов, доминирующих в конкретном релаксационном процессе, является трудной задачей, которая обычно решается путем сочетания разных косвенных методов. Мы предлагаем новый метод, позволяющий различать вакансионный и межузельный механизмы структурной релаксации, обусловленной точечными и точечно-подобными дефектами [1].

Метод основан на значительном различии поведения межузельных гантелей и вакансий при наличии внешнего сдвигового напряжения. Межузельные гантели дают примерно на порядок больший диаэластический эффект (снижение модуля сдвига), чем вакансии. При этом объемный эффект при образовании межузельных гантелей и вакансий приблизительно одинаковый. Поэтому диаэластический эффект удобно охарактеризовать безразмерной величиной $K = d\ln G / d\ln V$ (G и V – модуль сдвига и объем, соответственно), которая позволит получить информацию о микроскопической природе релаксационных процессов, связанных с точечными/точечно-подобными дефектами [1]. В таблице приведены значения параметра K для межузельных гантелей (i) и вакансий (v) в кристаллах Al и Fe20Ni20Cr20Co20Cu20, а также для точечно-подобных дефектов в металлических стеклах (МС). Величина r в таблице есть релаксационный объем.

	Al		$Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$		$Zr_{47}Cu_{45}Al_7Fe_1$	$Zr_{65}Cu_{15}Al_{10}Ni_{10}$
	Монокр.	Поликр.	Монокр.	Поликр.	МС	МС
r_i	1.76	1.76	1.57	1.57	1.4	1.4
r_v	–0.49	–0.49	–0.36	–0.36	–	–
K_i	–33	–25	–27	–16	–42.9	–44.2
K_v	–3.9	–5.5	–1.9	–2.6	–	–

Видно, что величина K для релаксации на межзульных гантелях в кристаллах действительно много больше таковой для вакансий. Величина K для металлических стекол при этом свидетельствует о том, что за структурную релаксацию ответственны дефекты типа межузельных гантелей.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №20-62-46003.

1. Makarov A.S., Konchakov R.A., Mitrofanov Yu.P., Kretova M.A., Kobelev N.P., Khonik V.A. // J. Phys. Condens. Matter. – 2020. – V. 32. – P. 495701.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.338

УЛУЧШЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ВОЛЬТ-АМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГЕТЕРОСТРУКТУРНОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА НА ОСНОВЕ НИТРИДА ГАЛЛИЯ

Чижиков С.В., Тихомиров В.Г., Гудков А.Г., Шашурин В.Д.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия,
СПбГЭТУ «ЛЭТИ», г. Санкт-Петербург, Россия,
chigikov95@mail.ru

К современной СВЧ аппаратуре предъявляются высокие технические требования. В частности, для обеспечения высокой надежности аппаратуры необходимо разработать электронную компонентную база, обладающую высокой тепловой стойкостью. Одним из ключевых элементов в проектировании радиоэлектронной аппаратуры является транзистор, а наиболее перспективным на сегодняшний день является транзистор с высокой подвижностью электронов на GaN/AlxGa1-xN гетеропереходах., который имеет более низкий шумовой ток, а его температура эксплуатации значительно увеличивается по сравнению с арсенид - галлиевым транзистором. Однако недостатком транзистора является недостаточная температурная стабильность вольт-амперной характеристики.

Цель работы – разработать гетероструктурный полевой транзистор на основе нитрида галлия с улучшенной температурной стабильностью вольт-амперной характеристики

На основе анализа результатов расчета распределения температуры по глубине транзистора была предложена конструкция гетероструктурного полевого транзистора на основе нитрида галлия, которая позволила улучшить теплоотвод от подзатворной области и уменьшить температуру канала, что привело к улучшению температурной стабильности его вольт-амперной характеристики.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) в рамках выполнения научного проекта № 20-37-90124 от 24.08.2020 «Выявление и исследование ключевых элементов медицинских радиотермометров в монолитном интегральном исполнении, обеспечивающих выполнение предъявляемых к ним высоких требований по чувствительности, точности, широкополосности, помехозащищенности».

Благодарности.

1. Гудков А.Г., Агасиева С.В., Тихомиров В.Г., Вьюгинов В.Н., Жердева В.В., Зыбин А.А., Рыбаков Ю.Л., Гукасов В.М. Изучение выходных характеристик гетероструктурных транзисторов для биосенсеров методом математического моделирования // Медицинская физика. –2017. –№5. –С. 82-86.
2. Повышение надёжности и качества ГИС и МИС СВЧ. Книга 3 / Агасиева С.В., Гудков А.Г. , Тихомиров В.Г. и др.// / Под ред. Вьюгинова В.Н., Гудкова А.Г. и Попова В.В. – М. ООО НТП «Вираж-Центр», 2016. - 252 с.
3. Gudkov A.G., Chizhikov S.V., Agasieva S.V., Tikhomirov V.G., Dynaiev D.D., Popov M.K. Increasing efficiency of GaN HEMT transistors in equipment for radiometry using numerical simulation. Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1410. No. 012191
4. TCAD “Synopsys” Synopsys Inc., Sentaurus Device User Guide, Version E-2010.12, Fremont, California, 2010

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.339

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ НА ИХ РЕКОМБИНАЦИОННУЮ АКТИВНОСТЬ

Чуешова А.Г[1]., **Пещерова С.М[1].**, **Павлова Л.А.[1]**, **Непомнящих А.И.[1]**, **Федина Л.И.[2]**, **Якимов Е.Б[3]**, **Феклисова О.В[3]**

1 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, Россия, a.chueshova@igc.irk.ru

2 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, Россия

3 Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов, РАН, г. Черноголовка, Россия

Тройные стыки специальных границ зерен играют важную роль в инженерии дефектов и представляют собой область пересечения трех зёрен с различной ориентацией кристаллических решеток. Известно, что тройной стык является сложным дефектом, который имеет свои термодинамические и кинетические свойства, обусловлен локальными стрессовыми деформациями, возникающими в процессе направленной кристаллизации [1]. Кроме того, с тройными стыками принято связывать процессы эволюции и формирования зёрен в мультикристаллическом кремнии [2]. Геометрически тройной стык можно охарактеризовать следующими параметрами: собственными ориентациями кристаллических решеток (матрицы поворота), нормальными векторами к этим решёткам и углами разориентации между плоскостями зёрен (рис.1).

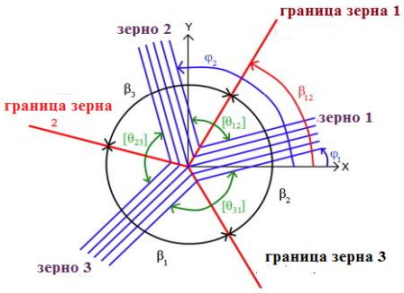


Рис. 1 Условная схема геометрии тройного стыка границ зерен [3], β-двугранный угол, Θ - угол разориентации меду зернами.

В данной работе исследованы геометрические параметры тройных стыков специальных границ зерен, а также факторы, указывающие на их рекомбинационную активность. В соответствии с теорией структурного равновесия в тройных стыках специальных границ должно выполняться условие равенства произведения матриц поворота границ с меньшим значением ∑ с матрицей поворота границы с наибольшим значением ∑ следующим образом [4,5]:

$$M(\sum 3) \times M(\sum 9) = M(\sum 27) \quad (1)$$

Однако, в соответствии с экспериментальными данными, полученными нами при исследовании структуры мультикристаллического кремния, не все тройные стыки специальных границ соответствуют данному условию (1). Нами установлено, что конфигурация тройного стыка границ обусловлена степенью термических напряжений на границе кристалл-расплав. При этом наличие или отсутствие электрической активности таких тройных стыков можно косвенно связать с их геометрическими параметрами.

Исследование проведено в рамках выполнения гос. задания по Проекту № 0284-2021-0004 «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол».

1. B. Zhao , J.Ch. Verhasselt , L.S. Shvindlerman , G. Gottstein.// Acta Materialia.- 2010 V. 58, P. 5646–5653.
2. Y. Ohno, K. Tajima, K. Kutsukake, and N. Usami // Appl. Phys. Express.-2020, V. 13.
3. M.Upadhyay, L. Capolungo , V.Taupin, C.Fressengeas // International Journal of Solids and Structures. -2011, V.48, № 22–23, P. 3176-3193.
4. V. Y. Gertsman// Acta Crystallographica.-2001, V.51, P. 369-377. **5.** V. Y. Gertsman// Scripta Metalhugica et Materialia.-1995, V. 32, №. 10, P. 1649-1652.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.340

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ОКИСЛЕННОСТИ МЕМБРАН ОКСИДА ГРАФЕНА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Валеев Р.Г.[1], Чукавин А.И.[1], Елисеев А.А.[2], Петухов Д.И.[2], Чернова Е.А.[2]

[1]ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН», г. Ижевск, Россия, rishatvaleev@mail.ru
[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

В последние 5 лет активно разрабатываются двумерные мембраны для осушения газов, нанофильтрации, осматических процессов [1]. Среди других 2D материалов оксид графена (Graphene Oxide – GO) выделяется теоретическим и практическим интересом из-за простоты получения, низкой стоимости, возможности варьирования межслоевого расстояния, селективности и возможности модификации поверхности различными функциональными группами [2]. Например, GO-мембраны позволяют очистить воду от 97,5% солей натрия, что превосходит свойства большинства мембран на основе существующих полимерных материалов [3].

Главную роль в проницаемости и селективности мембран оксида графена играет расстояние между отдельными слоями [4], однако вклад поверхностных функциональных групп (-OH, -C=O, -O=C-OH) также значительно влияет на транспортные свойства мембран [5] и их количество задается степенью окисленности оксида графена.

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) в настоящее время переживает настоящий бум и как метод анализа химического состава веществ, так и оценки валентного состояния химических элементов, входящих в соединения. Кроме того, он позволяет с высокой точностью оценить вклады различных функциональных групп в формирование химических связей углеродного компонента GO [6].

Таким образом, в работе представлены результаты РФЭС исследований мембран оксида графена со степенью окисленности (соотношение C:O) от 1:1 до 1:20, нанесенных на поверхность пористого оксида алюминия, использованного в качестве носителя, и установлена взаимосвязь с такими параметрами, как проницаемость мембран и величина осушения газов от паров воды. Показано, что для наиболее эффективного проникновения воды в процессе осушения газовых сред требуется использование мембран с максимальной окисленностью.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-19105.

1. Song N., Gao X., Ma Z., Wang X., Wei Y., Gao C. // Desalination. – 2018. – V. 437. – P. 59–72.
2. Eliseev A.A., Poyarkov E.A., Chernova A.A., Eliseev A.A., Chumakov O., Konovalov A.P., Petukhov D.I. // 2D Mater. – 2019. – V. 6. – P. 035039.
3. Li W., Wu W., Li Z. // ACS Nano. – 2018. – V. 12. – P. 9309-9317.
4. Liang S., Mu L., Chen L., Jiang J., Yang Y., Fang H. // Chem. – An Asian J. – 2020. – V. 15. – P. 2346–2349.
5. Dreyer D.R., Park S., Bielawski C.W., Ruoff R.S. // Chem. Soc. Rev. – 2010. – V. 39. – P. 228–240.
6. Chernova E.A., Petukhov D.I., Chumakov A.P., Kirianova A.V., Sadilov I.S., Kapitanov O.O., Boytsova O.V., Valeev R.G., Roth S.V., Eliseev Ar. A., Eliseev An. A. // Carbon. – In press.

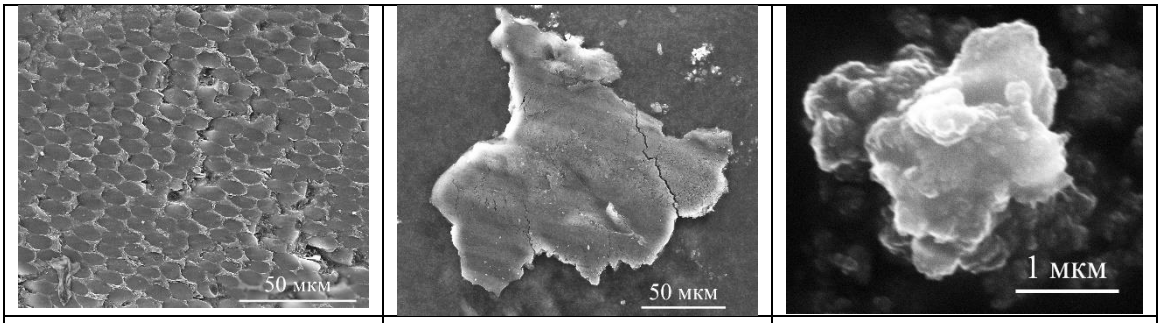
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.341

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ПЛЁНКИ (ТРЕТЬЕГО ТЕЛА) НА ПРОЦЕСС ТРЕНИЯ И ИЗНАШИВАНИЯ ВОЛОКНИСТОГО КОМПОЗИТА

Шпенев А.Г., Муравьева Т.И., Шкалей И.В.

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия,
kel-a-kris@list.ru

Композитные материалы находят широкое применение в технике не только в качестве конструкционного материала, но и как основа для создания разнообразных узлов трения. В частности, большой интерес вызывает применение композитов на основе углеродного волокна и углеродной матрицы в качестве фрикционных материалов. Повышенная износостойкость и прочность позволяет использовать данные материалы в тормозных системах и других фрикционных узлах, где на поверхности трения существуют экстремальные нагрузки и температуры. Важным аспектом при создании таких композитов является сочетание высоких прочностных свойств с возможностью регулирования эксплуатационных характеристик (например, коэффициента трения). Это может быть достигнуто за счет подбора оптимального состава и конфигурации компонентов композита. В процессе трения таких материалов при высоких давлениях и температурах в контактной зоне происходят сложные физико-механические процессы, в том числе деформация и частичное разрушение поверхностных слоев с последующим выносом частиц износа из зоны контакта. Настоящая работа посвящена построению модели взаимодействия жесткого полупространства и волокнистого композита, разделенных пленкой, состоящей из продуктов износа композита (третье тело). Рассмотрен процесс наращивания пленки за счет изнашивания материала и процесс выноса частей пленки из контакта. Исследовано влияние свойств третьего тела на скорость изнашивания и коэффициент трения композита. В качестве иллюстрации рассмотрен композит, применяемый в авиационных тормозных дисках, на основе углеродной матрицы, армированной карбонизированными углеродными волокнами (рис. 1).



а	б	в

Рисунок 1. СЭМ-изображение углерод-углеродного композита: а – поверхность после испытаний, б – фрагмент пленки, образующейся при трении материала, в – частица износа.

Использование результатов электронной микроскопии позволило определить параметры фрагментов пленки и частиц износа, что необходимые в построенной модели.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №21-58-52006 МНТ_а. Авторы выражают благодарность ПАО «АК Рубин» за предоставленные образцы материлов.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.342

NOVEL HYBRID STRUCTURES BASED ON OXYGEN-FREE GRAPHENE AND ALUMINUM PHTHALOCYANINE CHLORIDE

Klimenko I.V.[1], Lobanov A.V. [1, 2] Trusova E.A.[3]

.

[1]*Emanuel Institute of Biochemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, inna@deom.chph.ras.ru*

[2]*Semenov Federal Research Center for Chemical Physics Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

[3]*Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

In recent decades, the producing and investigation of new hybrid structures and supramolecular systems based on graphene and tetrapyrrole compounds have attracted significant attention due to the possibility of using them in various sciences and technologies, by way of optical chemosensors, semiconductors, electrocatalysts, photocatalysts in various chemical reactions, electroluminescent materials, and photosensitizers in the photodynamic therapy (PDT) of cancer and various neoplasms.

Chlorins, porphypins and related to them phthalocyanines [1] nowadays are often used as photosensitizers (Ps) substances developed as drugs for PDT and fluorescence diagnostics. The aromatic macroheterocyclic compound of aluminum phthalocyanine chloride (AlClPc) is a Ps of a second generation which is characterized by high photoactivity and photostability and high absorbance coefficient in the region of 650–680 nm (so-called “therapeutic window” [1, 2]). But, AlClPc is insoluble in aqua and biologically compatible solvents and has a tendency to aggregate in aqueous media that considerably reduces its photodynamic activity. One of the most promising strategies to improve some limitations is using the theranostic two-dimensional (2D) materials, for example, graphene as a part of hybrid systems in conjunction with phthalocyanine. The immobilization of AlClPc macroheterocycles with π-conjugated electronic systems on the graphene surface is possible due to hydrogen bonding, π – π- stacking, van der Waals and electrostatic forces.

In this work, we demonstrate simple, but novel technique of oxygen-free graphene-AlClPc hybrid systems synthesis in liquid media (graphene was prepared by sonochemical method in N,N-dimethylformamide or in its mixture with aqua [3]). The photophysical properties of these hybrid systems have been studied using optical spectroscopy. The obtained results suggest that graphene in the system prevents the aggregation of AlClPc and leads to its stabilization in monomeric form. Also, spectral properties of novel hybrid systems indicate that there is a direct interaction between AlClPc, possibly, a charge-transfer complex formation.

The work was carried out according to the state assignment of IBCP RAS (theme No. 01201253304) and government assignment no. 075-00328-21-00. Elena A. Trusova thanks RFBR (grant no. 19-03-00554_a) for financial support of the research

1. Klimenko I.V., Lobanov A.V. // Macroheterocycles. – 2020. – V. 13. – № 2. – P. 142-146.
2. Klimenko I.V., Lobanov A.V. // J of Biomedical Photonics & Eng. – 2016. –V. 2. – № 4, – P. 040310-1-5.
3. Klimenko I.V., Lobanov A.V., Trusova E.A., Shchegolikhin A.N. // Russ. J.of Phys. Chem. B. – 2018. – V. 13. – № 6. – P. 964-968.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.343

СВС-СИНТЕЗ MAX-ФАЗЫ TI_3SIC_2 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА

Ларионова Н.С., Никонова Р.М., Ладьянов В.И.
Научный центр металлургической физики и материаловедения УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия, larionova_n@udman.ru

MAX-фазы представляют собой семейство тройных карбидов и нитридов (металлическая керамика). Обладая нанослоистой структурой и уникальным сочетанием свойств, характерных для металла и керамики, MAX-фазы являются перспективным материалом для исследований и практического применения. На сегодняшний день одной из наиболее изученных MAX-фаз является Ti_3SiC_2. Как керамика, Ti_3SiC_2 обладает низкой плотностью, превосходными механическими свойствами при высоких температурах, высокой температурой плавления и термической стабильностью. Как металл она устойчива к тепловому удару и имеет хорошую тепловую и электрическую проводимость. По сравнению с карбидом TiC MAX-фаза Ti_3SiC_2 характеризуется аномальной мягкостью, что позволяет ее подвергать механической обработке.

Для синтеза Ti_3SiC_2 используются многочисленные методы: химическое осаждение из паровой фазы, горячее прессование, искровое плазменное спекание, механическое легирование, дуговая плавка, микроволновое спекание и др. Используемый в настоящей работе метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) позволяет избежать большого числа технологических процессов. Его достоинствами также являются малые энергетические затраты и высокая чистота продуктов горения. Традиционный СВС позволяет получать порошки со средним размером частиц в несколько микрон. Актуальным остается вопрос получения наноразмерных частиц (порошков) с помощью СВС-методик.

Известно, что использование фуллеренов, графена, углеродных нанотрубок и наноалмазов вместо традиционно используемых графита и сажи позволяет существенно улучшить свойства различных металломатричных материалов.

В настоящей работе проведено исследование влияния различных форм углерода (сажа, углеродные нанотрубки, фуллерит, чешуйчатый графит) на формирование MAX-фазы Ti_3SiC_2 при самораспространяющемся высокотемпературном синтезе. Методами рентгеноструктурного анализа и растровой электронной микроскопии изучен фазовый состав сравниваемых образцов и их морфология. Показано, что в зависимости от используемой формы углерода при СВ-синтезе формируется от 6 до 90 вес.%. Ti_3SiC_2. При этом количественное содержание MAX-фазы определяется структурой используемых углеродных материалов и ее стабильностью.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.344

ГРАФЕН НА SiC: ПОЛУЧЕНИЕ, ИССЛЕДОВАНИЕ, ПЕРСПЕКТИВЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ.

А.А. Лебедев[1,*], В.Ю.Давыдов[1], С.П. Лебедев[1], А.Н. Смирнов[1], В.С. Левицкий[1], И.А. Елисеев[1,3], С.Н. Новиков[2], А.С.Усиков[4,5], Ю.Н. Макаров[4,5]

[1]ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, Политехническая 26, 194021, С.-Петербург
[2]Aalto University, Tietotie 3, 02150, Espoo, Finland
[3] Университет ИТМО, С.-Петербург 197101, Кронвергский проспект 49,
[4]ГК «Нитридные кристаллы», 194156, пр. Энгельса, д. 27, С.-Петербург
[5]Nitride Crystals Inc., 181 E Industry Court, Suite B, Deer Park, NY 11729, USA

Одной из самых перспективных технологий синтеза графена, которая позволяет получать высококачественный материал и в тоже время может быть интегрирована в промышленное производство, является термодеструкция поверхности подложек карбида кремния (SiC) [1]. В настоящей работе представлены результаты исследований структурных свойств графеновых пленок, выращенных на полярных Si-грани (ориентация поверхности - (0001) подложки SiC с использованием метода термического разложения поверхности кристалла. Формирование графена осуществлялось на высокоомных подложках карбида кремния для того, чтобы исключить влияние проводимости подложки при проведении исследований транспортных свойств. Синтез осуществлялся при температуре 1800°C в вакууме и атмосфере инертного газа (Ar). Перед ростом графена проводилось сублимационное травление SiC для удаления дефектного слоя с поверхности. С использованием спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), атомно-силовой микроскопии, получена и проанализирована информация о кристаллической и электронной структуре выращенных графеновых слоев. Показано, что оптимизация ростовых параметров, выполненная по результатам комплексных исследований, позволила создать надежную технологию роста высококачественных графеновых слоев с толщинами в диапазоне 1–2 монослоя. Было проведено исследование транспортных свойств пленок методом эффекта Холла. Величина концентрации носителей заряда в исследуемом графене составила 7 x 10^{11} – 1 10^{12} см$^{-2}$, а максимальное значение подвижности электронов приблизилось к 6000 см^{2}/(В с) На основе данных плёнок были изготовлены и протестированы газовые и биосенсоры с рекордной для твердотельных сенсоров чувствительностью [2,3].

1. В.Ю.Давыдов, Д.Ю.Усачёв, С.П.Лебедев и др., // ФТП – 2017 – Т.**51 С.-** 1118-1124
2. S.Novikov, N.Lebedeva, A.Satrapinski, J.Walden, V.Davydov, A.Lebedev, // Sensors and Actuators B: Chemical – 2016- Т.**236** – С. 1054-1060.
3 A.A.Lebedev, S.Yu.Davydov, I.A.Eliseyev, A.D.Roenkov, O. Avdeev, S.P.Lebedev, Yu. Makarov, M.Puzyk, S.Klotchenko, A.S.Usikov // Materials – 2021 – T.14 - C.590

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.345

Структурные изменения фуллерита при нагреве до 1600°С (графитация)

Никонова Р.М., Ларионова Н.С., Ладьянов В.И.
Научный центр металлургической физики УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия, e-mail: rozamuz@udman.ru

Открытие фуллеренов и последующее получение их конденсированной фазы (фуллеритов) в макроколичествах привело к огромному количеству работ посвященных исследованию их структуры и свойств, включая их термического поведения. Данные о предельной температуре, при которой они сохраняют свою молекулярную/ кристаллическую структуры, являются весьма важными в разработке технологий их получения, физико-химических основ создания новых перспективных материалов в различных областях медицины, электроники, использования фуллеренсодержащих порошковых композитов, а также в металлургии фуллеренсодержащих модификаторов и других областях возможного их применения. Термическая устойчивость фуллеритов в зависимости от предыстории их полученных, их чистоты, условий нагрева ограничивается 500-900 °С.

В настоящей работе представлены результаты исследований структурных изменений фуллерита при температурах нагрева до 1600°С. Отжиг проводили в муфельной печи при температурах нагрева в интервале 400-1000°С (время отжига 30 мин, среда СО) и в печи Таммана (графитовый нагреватель) при температурах нагрева 1100-1600°С, время отжига в последнем случае варьировали от 0,5 до 16 часов. Исследования проводили на фуллерите $C_{60/70}$ (~14%C_{70}), порошок компактировали в таблетки (Ø=6мм, h=3мм). Исследования структурного состояния углерода в образцах после высокотемпературного нагрева выполнены с применением методов рентгеноструктурно анализа (дифрактометр ДРОН-6, Cu-Kα излучение, в интервале углов 2Ѳ=10-90°) и методом КР-спектроскопии.

Проведенные исследования показали, что полная термодеструкция фуллерита наблюдается при температуре нагрева выше 900°С с формированием фуллеритоподобной фазы (рис.). Последующее упорядочение углерода с формированием графитоподобной аморфной фазы наблюдается при температуре ~1500-1700°С. На фоне рентгеноаморфного гало (2θ=14-29°), соответствующему турбостратному графиту, наблюдается формирование основного дифракционного пика графита с хорошо разрешимым дуплетом (рис.). Последнее указывает на наличие двух подрешеток графита (α- и β-фазы). Приведены сравнительные исследования изменения структуры в процессе нагрева исходной сажи, при отжиге которой при аналогичных условиях, турбостратный и β-графит отсутствуют.

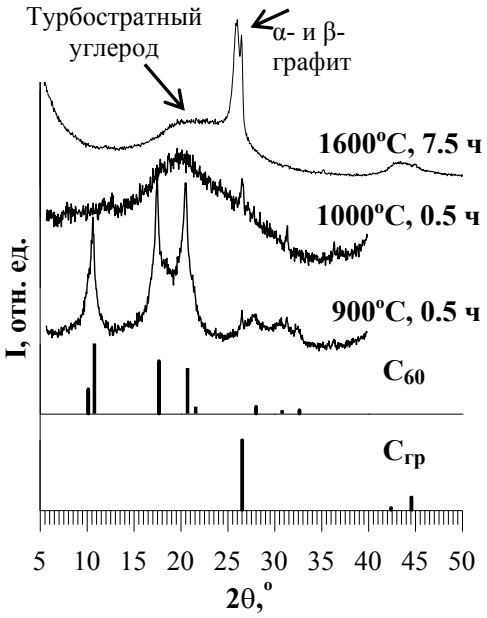


Рис. Изменение структуры фуллерита в процессе нагрева.

Рассмотрено каталитическое воздействие Fe на процессы графитации исходного фуллерита при термических (720-800°С) и деформационных воздействиях (механоактивации).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.346

EFFECTS OF Ge ION IMPLANTATION INTO DIAMOND: PHOTOLUMINESCENCE, PHOSPHORESCENCE AND EPR

R.I. Khaibullin [1]*, D.K. Zharkov [1], R.B. Zaripov [1], A.V. Leontyev [1], N.M. Lyadov [1], V.G. Nikiforov [1], V.I. Nuzhdin [1], A.G. Shmelev [1], M.H. Alkahtani [2,3], P.R. Hemmer [1,3]

*[1)] Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, Russia, * rikkfti@mail.ru or rik@kfti.knc.ru*
[2)] National Center for Laser and Optoelectronics, KACST, Riyadh, 11442, Saudi Arabia
[3)] Texas A&M University, College Station, Texas 77843, USA

Recently, Iwasaki et al. [1] reported the synthesis of a new defect color center in diamond, which consists of a germanium (Ge) atom at a lattice site and two carbon vacancies (V) associated with it. These GeV centers exhibited a characteristic photoluminescence at room temperature with a narrow zero phonon line at 602 nm. Note that diamond samples with GeV centers were obtained in [1] by using either chemical vapor deposition (CVD) methods or the implantation with 150-260 keV Ge ions into diamond at a fluence in the range of 10^9 -10^{15} ion/cm^2.

In our work, Ge^+ ions were implanted into (001)-oriented synthetic diamond plates (type IIa, NDT *Ltd*) at a significantly lower energy of 40 keV and in the same fluence range: 10^{12}-10^{15} ion/cm^2. Then the Ge-ion implanted diamond plates were annealed at a temperature of 1300 K in an ultrahigh vacuum (10^{-9} Torr) for 30 min. In order to search for new GeV centers in the implanted diamonds, photoluminescence (PL) spectra were recorded in the visible wavelength range at room temperature on a confocal microscope with excitation by a laser diode at a wavelength of 520 nm. In addition to the main Raman line in diamond (558.6 nm) we observed a narrow line of PL related to GeV centers at a wavelength of 601.5 nm. It is important to note that in the sample implanted with the maximum fluence the intensity of PL signal from GeV centers was almost an order of magnitude higher than that from the main Raman line and, accordingly, two orders of magnitude higher than the similar signal observed in reference [1]. However, EPR spectra of diamonds with GeV centers reveal only one additional unstructured line with a g-factor of 2.002 in both the X- and Q-frequency ranges at room temperature or below (77 K) temperatures. The absence of an angular dependence of the observed EPR signal indicates that the GeV center, apparently, occupies a more symmetric position in diamond crystal lattice than, for example, a similar SiV center (point symmetry D_{3d}).

Moreover, for the first time we observe very strong (visible by eyes) long-time phosphorescence (spectral band of 480-530 nm) in Ge-ion implanted diamond after the excitation with a single pulse of a femtosecond laser (λ = 257 nm, E = 20 mJ, t = 350 fs). It was found that the characteristic time of phosphorescence decay in diamonds implanted with germanium ions exceeds a few minutes at room temperature and it is significantly shortened (up to seconds) when the sample is cooled to the temperature of liquid nitrogen (77 K).

This work was supported by the Mega-grant of the Government of the Russian Federation (Agreement No.14.W03.31.0028).

[1] T. Iwasaki, F. Ishibashi, Y. Miyamoto et al. // Scientific Reports. – 2015. – Vol. 5. – Art.12882.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.347

ТРАНСФОРМАЦИЯ АЛМАЗА В ОНИОНОПОДОБНЫЕ СТРУКТУРЫ ФУЛЛЕРЕНОВОГО ТИПА ПРИ ДАВЛЕНИИ 70 ГПа И ТЕМПЕРАТУРЕ 2400 К

Чуркин В.Д.[1,2], Попов М.Ю.[1,2], Зинин П.В.[3], Кульницкий Б.А.[1,2], Булатов К.М.[3], Быков А.А.[3] Бланк В.Д.[1,2]

[1] Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, Россия
[2] Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, г. Москва, г. Троицк, Россия
[3] Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, г. Москва, Россия
churkin_valentin@rambler.ru

В работе сообщается о наблюдаемом фазовом превращении алмаза при нагреве до 2400 К под давлением 70 ГПа в фуллереноподобные онионы.

Смесь алмазного и никелевого порошков была нагрета лазерным лучом под давлением 70 ГПа в камере с алмазными наковальнями. Около 2400 К никель расплавился (что наблюдалось визуально), вызывая растворение углерода (алмаза) в расплаве. При последующем медленном охлаждении при давлении 70 ГПа раствор углерода в никеле становится пересыщенным и из выделяющегося из никеля избыточного углерода формируются стабильные для данных условий фазы. По результатам исследования полученных образцов с помощью просвечивающей электронной микроскопии наблюдались как прямой, так и каталитический переходы алмаза в онионы. В первом случае онионы покрывали сохранившуюся частицу алмаза, во втором случае онионы наблюдались на поверхности никеля.

Исследование Рамановских спектров показало, что наблюдаемые онионы являются фуллереноподобными с характерной полосой на 1435 см$^{-1}$.

Каталитический процесс является обратным по отношению к каталитическому синтезу алмаза в зоне его стабильности (около 6 ГПа). В образце также обнаружен карбид никеля (Ni_3C).

Согласно новой фазовой диаграмме углерода [1], в диапазоне давлений 55-115 ГПа наблюдается потеря устойчивости алмаза и его трансформация в онионоподобные структуры. Основным результатом данной работы является наблюдение таких структур в высокотемпературной области. В отличие от онионов, полученных при комнатной температуре, сокращается число их слоев (с ~10 до 2-3) [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-19019.

1. Vladimir D. Blank, Valentin D. Churkin, Boris A. Kulnitskiy, Igor A. Perezhogin, Alexey N. Kirichenko, Viktor N. Denisov, Sergey V. Erohin, Pavel B. Sorokin, Mikhail Yu. Popov. Phase diagram of carbon and the factors limiting the quantity and size of natural diamonds. // Nanotechnology. - 2018. - V. 29. - 115603(1-8);
2. M. Popov, V. Churkin, B. Kulnitskiy, A. Kirichenko, K. Bulatov, A. Bykov, P. Zinin and V. Blank. Transformation of diamond to fullerene-type onions at pressure 70 GPa and temperature 2400 K. // Nanotechnology. - 2020. - V. 31. - 315602.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.360

ЦИРКУЛЯРНО-ПОЛЯРИЗОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ СВЕТА ИСКУСТВЕННО СОЗДАННЫМИ ХИРАЛЬНЫМИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ ГЕТЕРОСТРУКТУРАМИ

Максимов А.А., Филатов Е.В., Тартаковский И.И., Кулаковский В.Д.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,
maksimov@issp.ac.ru

Полупроводниковые технологии в настоящее время позволяют создавать искусственные хиральные метаматериалы с весьма необычными оптическими свойствами: фотонные кристаллы, микрорезонаторы, волноводные структуры обладают гигантской оптической активностью, которая значительно превышает оптическую активность естественных хиральных материалов. Излучение таких структур: его интенсивность, направленность и степень поляризации зависит от локальной плотности электромагнитных мод в самой наноструктуре, которой можно управлять на стадии изготовления. Неэквивалентность право- и лево-поляризованных электромагнитных мод в подобных гетероструктурах на основе обычных ахиральных A^3B^5 полупроводников возникает из-за общей хиральной симметрии системы, поэтому они могут быть использованы для создания компактных как однофотонных, так и лазерных источников циркулярно-поляризованного излучения без приложения внешнего магнитного поля.

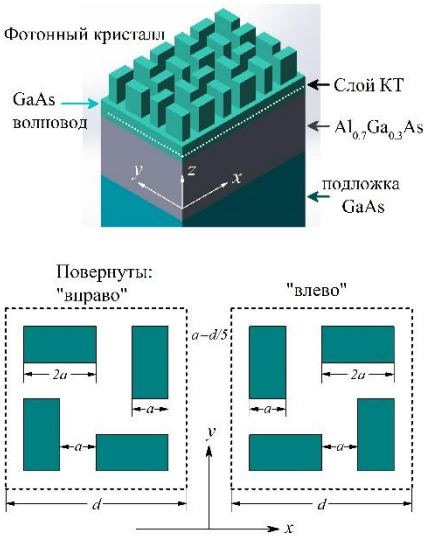


Рис.1. Схема полупроводниковой наноструктуры с волноводным хиральным слоем GaAs, содержащим слой квантовых точек; внизу – вид сверху на элементарные ячейки фотонных кристаллов с различной хиральностью.

Обсуждаются результаты экспериментальных исследований спектральных, поляризационных и пространственных свойств излучения слоя ансамбля квантовых точек, одиночных квантовых точек и инжекционных полупроводниковых лазерных структур, демонстрирующих генерацию циркулярно-поляризованного света. Образцы полупроводниковых гетероструктур были выполнены либо на основе высокодобротных GaAs микрорезонаторов, либо на основе планарных GaAs волноводах. На верхнем слое таких структур за счет частичного травления по высоте изготовлялись квадратные решетки хиральных фотонных кристаллов из периодически расположенных правых или левых гаммадионов, Z- или S- подобных фигур, либо 4-х вытянутых прямоугольников, повернутых на 90° относительно друг друга (см. рис.1.). Подробно изучена дисперсия фотонных мод при исследованиях углового распределения излучения. Было продемонстрировано, что степень циркулярной поляризации полос излучения фотолюминесценции в таких структурах может достигать значений очень близких к 1 *в нулевом внешнем магнитном поле*. Впервые был реализован вертикально излучающий полупроводниковый лазер циркулярно-поляризованного излучения с электрической накачкой.

Работа частично поддержана проектами РФФИ № 19-02-00697 и № 20-02-00534.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.364

ТВЁРДОФАЗНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Прохоров Д.В., Коржов В.П.

Институт физики твердого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, korzhov@issp.ac.ru

Доклад посвящен твердофазным технологиям получения функциональных материалов, достоинством которых является неиспользование каких бы то ни было плавильных методов. Кратко представлены примеры таких технологий, ранее используемых и развиваемых в настоящее время,

1. Многослойная лента из сверхпроводящего соединения Nb_3Al толщиной 50 *мкм*. Значимые результаты: (1) оригинальная технология получения длинномерной композитной ленты Nb/Д16 и её высокотемпературный, при 1750ºС, кратковременный, от 1 до 2 *с.*, нагревом способом «на проход» в вакууме; (2) высокий критический ток ленты – 40 *А* на 1 *мм* ширины ленты в магнитном поле 14 *Тл* (!); (3) малый критический радиус изгиба ленты – 6 *мм* (!);

2. Сверхпроводящая многослоцная леите Cu/Nb/Nb50Ti для магнитных систем медицинских MR-томографов: (1) твердофазная технология исключает из технологического процесса гарнисажную выплавку слитков сплава Nb–50 мас. %Ti и их последующий передел; (2) так как закрепление сверхпроводящих вихрей происходит на несверхпроводящих (Nb)-слоях, то высокая плотность тока в сплаве Nb–50Ti достигается без низкотемпературного отжига.

3. Слоистые композиты из Nb-сплава: (1) трещиностойкость – 12,8 ± 1,9 $МПа{\cdot}м^{1/2}$ при приложении нагрузки ⊥-но слоям структуры; (2) 100-часовой предел ползучести в интервале от 1150 до 1300ºС падал с ростом температуры соответственно от 90 до 25 *МПа*, но превышал предел ползучести для выплавленных Nb-сплавов с направленной структурой.

4. Слоистые Mo-композиты: (1) предел прочности на изгиб при комнатной температуре и в интервале 1000–1450°С и (2) трещиностойкость – соответственно ~285 *МПа* при ориентации P⊥(ab) и 325–300 *МПа* при P||(ab) и 16,0–19,2 и 17,6–21,2 $МПа{\cdot}м^{1/2}$ при P⊥(ab) и P||(ab). Достигнутые значения предела прочности ~300 *МПа* при 1450ºС и трещиностойкости ~21 $МПа{\cdot}м^{1/2}$ для Mo-композитов оцениваются как результат высокого уровня.

5. Карбидных покрытий на металлических фольгах с использованием ТРГ-лент и композиты, например, Ti/CTiC/CTiC… и Nb/CNbC/CNbC…, из них имели σ_B = 1000–1400 *МПа* при 20 градусах и в температурном интервале 650–900ºС – от 600 до 1100 *МПа*. Аналогичное нанесение карбидного покрытия на ленты из Nb-сплава с 2%Zr привело к получению ленточного материала со структурой из матрицы на основе карбида $(Nb,Zr)C_{1-x}$ с игольчатыми включениями карбида (Zr,Nb)C на основе циркония. Но такая фольга изгибалась по радиусу 3 *мм* без разрушения.

6. Слоисто-волокнистые композиты из (Mo–Nb)-матрицы, армированные сапфировыми волокнами модернизированного метода Степанова.

ON-LINE
доклады

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.001

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6 ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОГО ЛЕГИРОВАНИЯ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ

Ващук Е.С.[1], Аксенова К.В.[2], Невский С.А.[2], Громов В.Е.[2], Будовских Е.А.[2]
[1]*Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф.Горбачева в г. Прокопьевске, Прокопьевск, Россия, vaschuk@bk.ru*
[2]*Сибирский государственный технический университет, Новокузнецк, Россия*

В настоящее время интенсивно развиваются поверхностные методы упрочнения, основанные на использовании концентрированных потоков энергии, как электровзрывное легирование (ЭВЛ) и обработка поверхности низкоэнергетическими сильноточными электронными пучками (ЭПО). Они позволяют проводить локальное упрочнение поверхности в местах наибольшего разрушения при эксплуатации и увеличивать функциональные свойства в несколько раз. В этой связи установление закономерностей формирования структурно-фазовых состояний и природы повышения эксплуатационных свойств поверхностей при упрочняющих обработках

Для повышения микротвердости и износостойкости поверхности титанового сплава ВТ6 науглероживание поверхности проводили совместно с порошковыми навесками соединений с высокими физико-механические свойствами, а именно, диборида титана TiB_2, карбида бора B_4C и карбида кремния SiC. В качестве взрываемого проводника использовали углеродную ленту марки ЛУ-П/0,1-50 массой 140 мг. Навески порошков разной массы располагали на ленте в области внутреннего электрода ускорителя. При формировании струи они захватывались ею и переносились на упрочняемую поверхность.

Электронно-пучковую обработку образцов поверхности после ЭВЛ осуществляли на установке «Соло» Института сильноточной электроники Сибирского отделения РАН, изменяя плотность энергии пучка (50 и 60 Дж/см^2), длительность импульсов (100 мкс) и их число (10 имп.). Частота импульсов во всех случаях составляла 0,3 Гц.

Комплексное электровзрывное легирование с порошковыми навесками диборида титана, карбида бора и карбида кремния поверхности титанового сплава ВТ6 приводит к формированию зоны упрочнения с высокоразвитым рельефом толщиной до 50 мкм, неоднородного по толщине, элементному составу и структурно-фазовому состоянию.

ЭПО с плотностью энергии пучка электронов 50, 60 Дж/см^2 зоны ЭВЛ приводит к уменьшению шероховатости поверхности и более однородному распределению легирующих элементов. Толщина зоны упрочнения возрастает до 60 мкм.

Физической природой упрочнения зоны комбинированной обработки является формирование многофазной структуры субмикро- и наноразмерного диапазона. Включения TiC практически бездефектны; в зернах α-титана присутствует дислокационная субструктура. Рентгеноструктурными исследованиями установлено, что упрочняющими фазами являются: при использовании порошка диборида титана TiB_2 – TiB, TiB_2, Ti_2B_5; карбида бора B_4C – B_4C, BC, TiC; карбида кремния SiC – SiC, TiC, TiSi и $TiSi_2$.

ЭВЛ с использованием навесок TiB_2, B_4C, SiC приводит к увеличению микротвердости поверхности до 4 – 8 раз в зависимости от массы порошковых навесок. При этом увеличение массы упрочняющих навесок обеспечивает рост микротвердости в среднем в 1,5-2,5 раза. При последующей ЭПО в случае использования порошковой навески TiB2 микротвердость увеличивается в 5,5 раза (до

1800 HV), B_4C – в 12 раз (до 4000 HV) по сравнению с микротвердостью в исходном состоянии.

Электровзрывное легирование диборидом титана TiB_2 приводит к увеличению износостойкости в условиях сухого трения скольжения в 14 раз. Последующая ЭПО способствует росту износостойкости более чем в 90 раз по сравнению с исходным состоянием. Комбинированная обработка приводит к снижению коэффициента трения в два раза.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.368

ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННЫХ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА

Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я.
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия, akai2005@mail.ru

Изучение фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в магнитных материалах, содержащих примеси, и другие дефекты структуры представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это обусловлено тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при ФП. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты структуры влияют на поведение различных систем при ФП.

На основе эвристических аргументов было показано, что вмороженные немагнитные примеси изменяют критические показатели системы, если соответствующий показатель теплоемкости чистой системы положителен (критерий Харриса [2]. В тоже время имеются основания предполагать, что немагнитные примеси оказывают совершенно другое влияние, вплоть до изменения рода ФП на системы описываемых моделями Поттса. При изучении этих вопросов лабораторные и теоретические исследования сталкиваются с большими и труднопреодолимыми проблемами.

В настоящей работе на основе кластерного алгоритма метода Монте-Карло (МК) [3] исследуется влияние слабого беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей на ФП в двумерных системах, описываемых моделями Поттса. В частности, приведены результаты для пятивершинной модели Поттса на квадратной решетке.

Гамильтониан спиновой системы описываемой моделью Поттса с числом состояний спина q имеет следующий вид

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{i,j}\rho_i\rho_j\cos\theta_{i,j}\,, \qquad (1)$$

$\theta_{i,j}$ - угол между взаимодействующими спинами S_i - S_j, J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия, ρ_i=1, если узел i занят магнитным атомом, и ρ_i=0 если в i узле немагнитная примесь. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов p=1.00, 0.90. Исследовались системы с линейными размерами $L\times L=N$, L=20÷120. Для определения температуры ФП и анализа характера ФП использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [4]. Температуры ФП $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_l(1.0)$=0.8515(1), $T_l(0.90)$=0.731(2).

Полученные данные свидетельствуют о том, что внесение слабого вмороженного беспорядка (c=0.10, c=1-p) в виде немагнитных примесей в рассматриваемую модель приводит к ФП второго рода.

1. Ма Ш. // Современная теория критических явлений.-1980.-Мир.-Москва.
2. Harris A.B., J. Phys. C **7,** P. 1671 (1974).
3. Wolff U., Phys. Lett. 62, 361 (1989).
4. K. Eichhorn, K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter 8, 5209 (1996).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.198

ФОРМИРОВАНИЕ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ТРОЙНОГО ТВЁРДОГО РАСТВОРА В ПЛАСТИНАХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ III-V ЗА СЧЁТ ТВЕРДОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ ЗАМЕЩЕНИЯ

Гагис Г.С., Васильев В.И., Кучинский В.И.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (Ioffe Institute), г. Санкт-Петербург, Россия giman@mail.ioffe.ru

Соединения III-V широко используются для изготовления электронных и оптоэлектронных приборов. В частности, на основе GaAs и GaSb могут быть изготовлены фотоэлектрические преобразователи (ФЭП), для определённых частей спектра оптического излучения. В данной работе продемонстрирована возможность изготовления структур на основе бинарного соединения III-V с приповерхностным слоем тройного твёрдого раствора методом диффузии элементов пятой группы. Так же была изготовлена структура с одновременным формированием *p-n* перехода в пластине *n*-типа за счёт диффузии цинка, который проникает вглубь пластины дальше, чем элементы пятой группы и создаёт *p*-область. При этом должны протекать реакции твердофазного замещения, когда исходные химические элементы кристаллической решётки замещаются поставляемыми извне химическими элементами [1].

Элементы пятой группы доставлялись к поверхности полупроводниковой пластины III-V в виде паров As, P полученных из растворов-расплавов этих элементов в металлических растворителях. Раствор-расплав и полупроводниковая пластина III-V находились в реакторе при температурах 520 – 670 °C в атмосфере проточного водорода. Концентрацию и глубину проникновения замещающих атомов можно варьировать в некоторых пределах за счёт выбора определённой температуры или концентрации исходного вещества в растворе-расплаве. В данной работе при создании *p-n*-перехода, пары цинка поставлялись из того же раствора-расплава, что и пары элементов пятой группы.

При замещении элементов пятой группы с большим порядковым номером (As, Sb) элементами пятой группы с меньшим порядковым номером (P, As), как правило, на поверхности структуры, изготовленной на основе полупроводниковой пластины бинарного соединения, формируется материал с шириной запрещённой зоны, превышающей таковую в объёме пластины. Таким образом, возможно получение широкозонного окна (ШО) на поверхности структуры. В случае ФЭП, ШО предотвращает негативные процессы поверхностной рекомбинации, и, как следствие, способствует более эффективному преобразованию излучения в электричество. Данный способ изготовления ФЭП может стать простой и дешёвой альтернативой современным эпитаксиальным технологиям.

1. Васильев В.И., Гагис Г.С., Кучинский В.И., Данильченко В.Г. // ФТП. – 2015. – Т. 48 № 7. С. – 984-988.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.003

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АНИЗОТРОПНОГО ОТРАЖЕНИЯ СВЕТА ДЛЯ ХАРАТЕРИЗАЦИИ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ A_3B_5

Гордеева А.Б., Маричев А.Е., Шмидт Н.М., Прасолов Н.Д., Власов А.С.

Физико-Технический институт им. А.Ф Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург, Россия, anastasiya.gordeeva@mail.ioffe.ru

В работе исследовались слои твердых растворов и многослойные структуры с чередующимися слоями, выращенные методом газофазной эпитаксии на подложках полупроводников A_3B_5. Для определения степени кристаллического совершенства полученных структур использовались методы рентгеновской дифракции, атомно-силовой микроскопии, фотолюминесценции, а также методика анизотропного отражения света (АО). В ходе исследования определялись следующие параметры: стехиометрический состав полученных слоев, присутствие в твердых растворах продуктов спинодального распада, наличие встроенных напряжений, характер рельефа поверхности, фотолюминесцентные свойства структур.

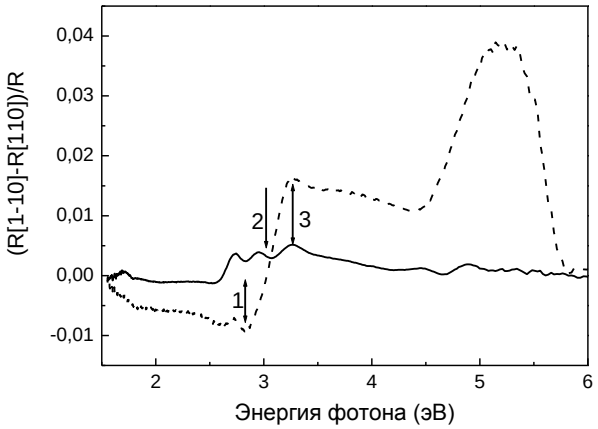


Рис. 1 Спектры АО $In_{0.8}Ga_{0.2}As_{0.46}$ $P_{0.54}$/InP образцов I– штриховая, II – сплошная линия. Стрелки показывают положение оптических переходов E_1 в объемных материалах: 1– $In_{0.8}Ga_{0.2}As_{0.46}$ $P_{0.54}$, 2 – GaAs, 3 – InP.

На рисунке 1 представлены спектры АО слоев толщиной 1000 нм твердых растворов $In_{0.8}Ga_{0.2}As_{0.46}P_{0.54}$, выращенных на подложках InP. Как показано в расчете, данный состав находится на границе области спинодального распада, а, следовательно, в таких растворах может наблюдаться появление продуктов распада – зерен отличных по составу, например GaAs. О появлении этих зерен можно судить по наличию в спектрах АО спектральных особенностей в области критических точек соответствующих соединений, как в случае образца II. В образцах, в которых произошел распад, пропадает внутреннее напряжение, а также существенно уменьшается анизотропный рельеф поверхности, что отражается и на изменении спектров анизотропного отражения.

В работе иллюстрируются различные возможности методики АО для бесконтактной характеризации гетероструктур на основе A_3B_5.

Маричев А.Е., Левин Р.И., Гордеева А.Б., Гагис Г.С., Кучинский В.И., Пушный Б.В., Прасолов Н.Д., Шмидт Н.М.// Письма в ЖТФ. – 20217. – Т. 43. № 2. С. – 3-9.
Fedorov I.V., N D Prasolov N.D., Levin R.V., Nevedomsky V.N., Gordeeva A.B., Pushnyi B.V.//J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – 1400. – p. 055024.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.004

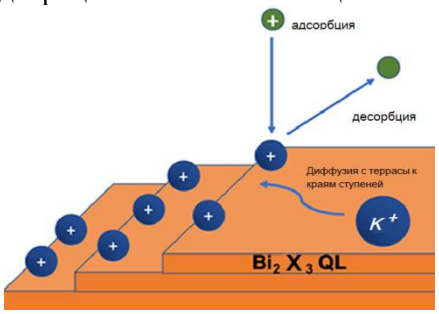
ВЛИЯНИЕ АДСОРБЦИИ КАЛИЯ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ Bi_2Se_3 И Bi_2Te_3.

Кахраманов К.Ш., Абдуллаев Н.А., Кахраманов С.Ш., Абдуллаев Ю.А., Мамедова И.А.

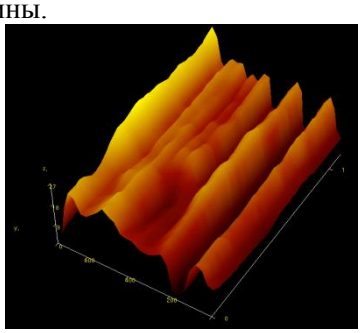
Институт физики им. Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана, Баку,
kamil.qahramanov@yahoo.com

Исследования поверхности кристаллов Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3, являющихся топологичес-кими изоляторами (ТИ) и традиционно используемых в термоэлектричестве, могут расширить диапазон их применения в приложениях электроники и спинтроники, в соединениях наноразмерных устройств, энергоэффективных транзисторах. Атомы щелочных металлов широко используются для модификации поверхности ТИ [1-3] поскольку нанесение немагнитных примесей на поверхность не нарушает симметрию относительно обращения времени и защиту от обратного рассеяния на дефектах, что позволяет сохранять режим электрического тока почти без потери энергии.

Адсорбция сдвигает уровень Ферми E_F за счет переноса электронов из *K*, занимающих поверхностные состояния. В области насыщающего покрытия образцов на гетерофазной границе обнаружен переход в состояние с противоположным изгибом зон, на его механизм влияет состояние поверхности между адсорбционным слоем *K* и Bi_2Te_3, Bi_2Se_3, которое определяется в зависимости от величины переноса заряда с *K*. Это дает возможность создания гибридных структур с заданными свойствами путем настройки параметров, таких как адсорбционные слои и толщина пластины.



а)



б)

Рис. Большая часть адсорбированного калия K^+ диффундирует к краям ступеней - *а)*, образуются одномерные цепочки, некоторые из которых – каналы высокой проводимости - *б)*.

К-адатомы создают короткодействующий изгиб зон в пределах 3-4 нм от поверхности из-за переноса заряда из адатомов в объем кристалла. Расстояние от поверхности вышеуказанного короткодействующего изгиба зон может увеличиваться до 10-20 нм в случае создания слоев при диффузии адсорбированных атомов с террас к краям ступеней и образованием одномерных цепочек, см. рисунок. Энергия поверхностного состояния на гребнях полос смещается в сторону более высоких значений 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 одномерной квантовой нити и могут быть использованы для достижения *1D* мало и бездиссипативного транспорта.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики - гранты № EİF/MQM/ Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1-M-01 и № EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/02/1.

Z.-H. Zhu, et al.. Phys. Rev. Lett. 107, 186405 (2011)
T. Förster, et al.. Phys. Rev. B, 91, 035313, (2015)
K. Park, et al.. New Journal of Physics, 15, 113031. (2013)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.005

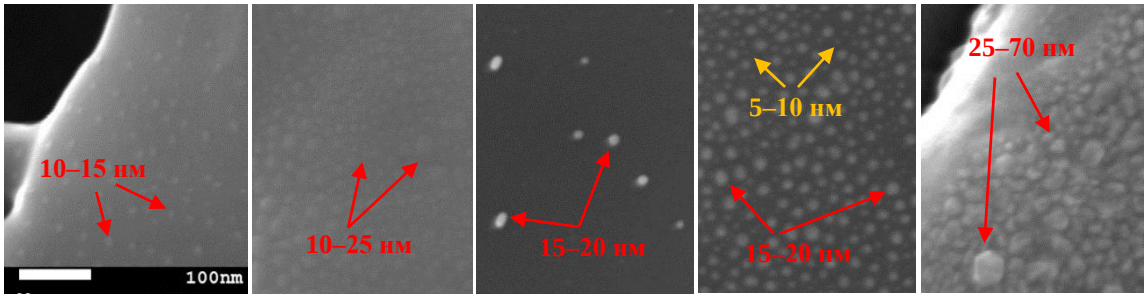
СОЗДАНИЕ НА ПОВЕРХНОСТИ БИОАКТИВНЫХ ПОКРЫТИЙ TIO_2 НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ (CU, FE, AG, PT, ZN)

Пономарев В.А., Штанский Д.В.

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г.Москва, Россия, ponomarev.viktor1993@yandex.ru

Биоактивность и способность противодействовать бактериальным клеткам являются двумя основными требованиями к материалам имплантатов. Активные формы кислорода (АФК) и бактерицидные ионы эффективно уничтожают бактерии, а обеспечить их генерацию можно, создав наночастицы (НЧ) металлов на поверхности. Биоактивность можно обеспечить созданием пор (механическая биосовместимость) и введением Ca и P (химическая биосовместимость).

Методом плазменного электролитического окисления (ПЭО) в электролитах, содержащих элементы Ca, P, были получены покрытия TiO_2. Изучено влияние основных параметров биполярного импульсного режима на морфологию и состав покрытий TiO_2. Установлено, что повышение напряжения положительного импульса (в диапазоне от 150 до 500 В) и его длительности (в диапазоне от 50 до 200 мкс) приводят к увеличению размера пор, количества рутила и концентрации Ca и P в составе, также возрастает вероятность образования Ca,P-фазы после ПЭО. Испытания на биоактивность покрытий в среде, имитирующей внутреннюю среду организма, показали, что покрытия являются биоактивными и способствуют образованию фазы предшественника гидроксилапатита (ГА). Биоактивность покрытий зависит от: (i) доли рутила в составе (чем рутил/анатаз больше, тем выше биоактивность) (ii) наличия центров кристаллизации Ca,P фазы (iii) количества Ca и P в покрытии, (iv) размера пор (поры 1-2 мкм эффективнее, чем 4-5 мкм).



(а) (б) (в) (г) (д)

Рисунок 1 – РЭМ изображения поверхности TiO_2 покрытий после имплантации (а) Cu, (б) Fe, (в) Ag, (г) Pt, (д) Zn.

Имплантация металлов (Cu, Fe, Ag, Pt, Zn) в оптимальное покрытие привела к формированию НЧ. НЧ Cu размером 10–15 нм и были равномерно распределены по поверхности на расстоянии 10 нм друг от друга. НЧ Fe, напротив, были плотно расположены, а диапазон размеров составлял 10–25 нм. Ag образовало НЧ размером 15–20 нм, расстояние между которыми в 10 раз превышало их размер. НЧ Pt имели два характерных диаметра: большие 15–20 нм и малые 5–10 нм, расположенные между большими. Разброс по размеру НЧ Zn составлял от 25 до 70 нм, а располагались они плотно (не более 10 нм) друг к другу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-38-90249\19 («Аспиранты»)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.006

НАНОПОРОШКИ СОСТАВА $BaZrO_3$, СИНТЕЗИРОВАННЫЕ В ОДИН ЭТАП

Гаджимагомедов С.Х., Сайпулаев П.М., Эмиров Р.М., Алиханов Н.М., Магомедов К.Э., Рабаданова А.Э.

Дагестанский государственный университет,
г. Махачкала, Россия, saipulaev525@mail.ru

Исходные нанопорошки состава $BaZrO_3$ синтезированы методом нитрат - органических прекурсоров, согласно рекомендациям из [1]. Последующую термическую обработку порошка проводили при режимах: при температурах 500°С, 600°С, 700°С, 800°С и 900°С с выдержкой при них в течение 30 мин (обозначения –№1-№5) соответственно; поэтапно в течение 30 мин одного и того же порошка до четырех режимов (№6 -№9) – в один этап при 600°С (№6), в два этапа при 600°С и 700°С (№7), в три этапа при 600°С, 700°С и 800°С (№8), в четыре этапа при 600°С, 700°С, 800°С и 900°С (№ 9). Скорости подъема и охлаждения до этих температур составляли ~5°С/мин и ~3°С/мин.

Изготовленные образцы преимущественно (от ~ 80% до ~90%) обладали фазой $BaZrO_3$ со структурой перовскита с пространственной группой P*m-3m* и побочной фазой карбида бария (фаза BaC_2).

На рисунке 1 показан средний размер кристаллитов, рассчитанный по полуширине пиков, используя известную формулу Дебая-Шеррера, в зависимости от режимов термообработки.

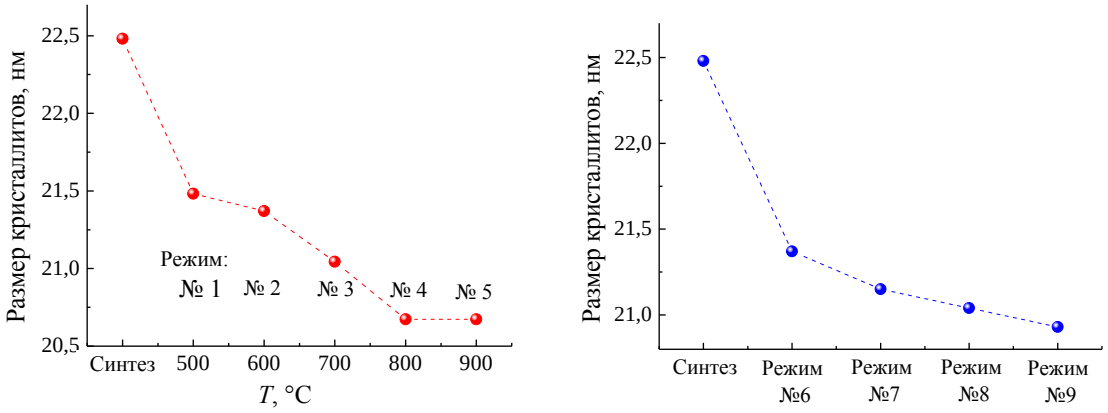


Рис. 1. Средний размер кристаллитов для нанопорошков $BaZrO_3$ до (исходного – синтезированного) и после термообработки при различных режимах обработки.

У исходного образца он составляет примерно ~22.5нм, а для термообработанного при температуре 500ºС (режим №1) уменьшился на ~ 5%. При увеличении температуры на 300ºС размер кристаллитов снижается всего на ~ 4%. Однако с повышением температуры обработки от 800ºС до 900ºС он практически не меняется. При этом с повышением количества этапов и, соответственно, температуры размер также уменьшается с ~22.5 нм до ~20.9 нм.

Итак, установлено снижение средних размеров кристаллитов при увеличении температуры обработки.

Работа выполнена в рамках проекта грантом УМНИК (Заявка №73013) и частично Гос. заданием FZNZ-2020-0002.

2. Алиханов Н.М. и др. Способ получения нанопорошка феррита висмута // Патент № 2641203 от 16.01.2018.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.007

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПРИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЗАМЕЩЕНИЯХ В СИСТЕМЕ

Шапиев Ш.Г., Гаджимагомедов С.Х., Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х., Сайпулаев П.М.

Дагестанский государственный университет,
г. Махачкала, Россия, darkusch@mail.ru

Полупроводниковые керамические материалы (Y-Be-Ba-Cu-O) при технологических замещениях (Be на Ba, в %) в системе $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ получены методом [1] твердофазного спекания. Порошки Y_2O_3, BeO, $BaCO_3$, CuO смешивались с добавлением этилового спирта и прессовались при давлении ~100 МПа. Спекание образцов осуществлялось в течение 20 часов в 3 этапа при температурах 950°С, 970°С и 980°С. Для повышения однородности и плотности после каждого этапа образцы перемалывались и повторно прессовались. Обнаружено, что минимальная плотность γ (рис. 1, слева) у исходного сырца с 10% технологическим замещения Be на Ba, а далее наблюдается тенденция повышения γ с ростом содержания бария.

После спекания для каждого образца проводились исследования терморезистивных свойств. В качестве примера приведена (рис. 1, справа) зависимость сопротивления от температуры, в известных координатах Аррениуса, для образца с 20% замещением Be на Ba после спекания при 980°С и плотностью ~ 3.7 г/см^3.

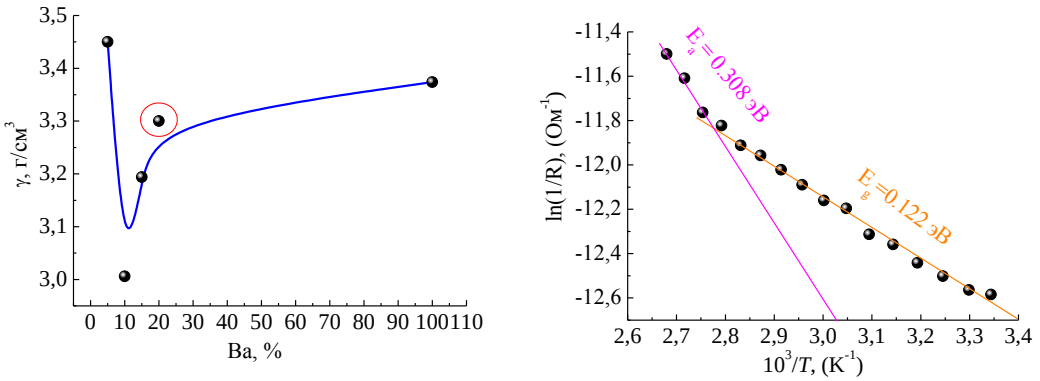


Рис. 1. Зависимости: слева – исходных сырцов от содержания (в %) Ba; справа – в координатах ln(1/R) – 1/T для образца с 20% замещением Be на Ba после спекания при 980°С.

Как видно, на зависимости наблюдается два участка, обусловленные соответствующими (примесным и собственным) вкладами в проводимость. Из низкотемпературного участка была определена энергия активации E_a примесей, а из высокотемпературного – энергию запрещенной зоны E_g. Значения энергии E_a в интервале температур от ~ 303К до ~ 361К составляет ~0.122 эВ, а значение величины E_g в интервале от ~ 361К до ~ 374К в ~ 2.5 раза выше и составляет ~0.308 эВ. Переход от одного типа проводимости на другой тип приходится на значение температуры ~ 361К.

Работа выполнена в рамках проектов: «УМНИК» №14045ГУ/2019, а также частично гранта РФФИ № 18-08-00092а и Гос. задания FZNZ-2020-0002.

Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х., Гаджимагомедов С.Х., Гамзатов А.Г., Мурлиев А.К. // Перспективные материалы. – 2009. – № 3. – С. 57-64.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.008

ЗАВИСИМОСТЬ УРОВНЯ YBCO ОТ ШИРИНЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА

Гаджимагомедов С.Х., Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х.

Дагестанский государственный университет,
г. Махачкала, Россия, darkusch@mail.ru

Наноструктурированным сверхпроводящим керамикам состава YBCO, изготовленным из нанопорошков, синтезированных золь-гель методом [1], характерна высокая дефектность решетки вплоть до атомарного уровня. Повышение такой дефектности приводит к разложению основной сверхпроводящей фазы с температурой перехода, в среднем, ~92К на фазы с различными значениями T_c. Образцы керамик (20 шт.), отличались плотностью, дисперсностью частиц, кислородной стехиометрией и технологическими параметрами получения. Для таких керамик температура начала перехода в сверхпроводящее состояние оказалась выше и составляла $T_{c,\ нач.}$ ~96К. Температура полного перехода образца в сверхпроводящее состояние ($T_{c,\ кон.}$) определялась при значениях производной удельного сопротивления по температуре равных нулю. Эти значения $T_{c,\ кон.}$ использовались для определения уровня допирования ***p*** по известной формуле из [2], а величина $T_{c,\ макс}$ принималась равной 92К. При этом ширина перехода в сверхпроводящее состояние (ΔT_c), обусловленная распадом основной фазы, определялась как $\Delta T_c = T_{c,\ нач.} - T_{c,\ кон.}$ На рисунке 1 приведена зависимость ***p*** от величины обратной ширины перехода (ΔT_c).

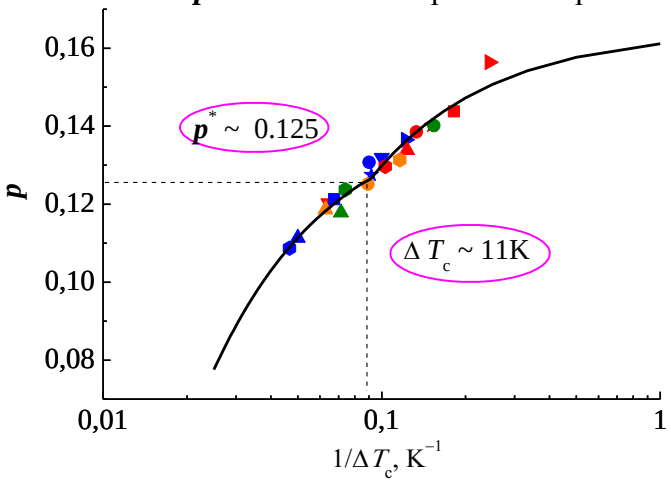


Рис. 1. Зависимость уровня допирования ***p*** от величины $1/\Delta T_c$.

В образцах содержание кислорода достаточно высокое и меняется от 6.7 до 6.9, а величина ***p*** – от ~0.109 до ~0.157. Как видно, прогиб зависимости ***p*** от $1/\Delta T_c$ приходиться на значения p^* ~0.125 и ΔT_c ~ 11К. Данная корреляция указывает не только на разложение основной фазы по кислороду, но и на переход решетки YBCO от орто- II к фазе орто- I.

Работа выполнена в рамках проекта Гос. заданием FZNZ-2020-0002 и частично грантом РФФИ № 18-08-00092а.

Gadzhimagomedov S. K., Palchaev D. K., Palchaev N. A., Presnyakov M. Y., Rizahanov R. N. //Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 3. – С. 470-473.
Tallon J.L., Bernhard C., Shaked H., Hitterman R.L., Jorgensen J.D. // Physical Review B. – 1995. – V. 51. No.18. – P. 12911-12914.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.009

СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА И МИКРОСТРУКТУРА ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩЕГО ПНИКТИДА $EuRbFe_4As_4$

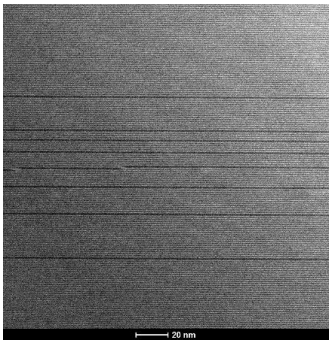
А.Ю. Дегтяренко[1,2], К.С. Перваков[2], В.А. Власенко[2], А.В. Овчаров[1], И.А. Каратеев[1]

[1]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г.Москва, Россия*

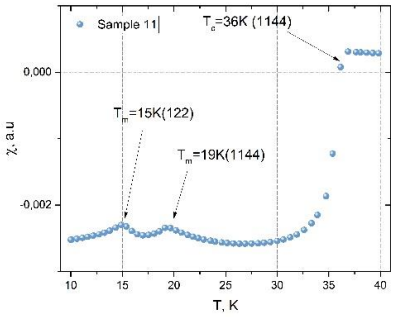
[2]*Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга ФИАН, г.Москва, Россия*, degtyarenkoayu@lebedev.ru

В настоящее время значительный интерес в области высокотемпературной сверхпроводимости представляют сверхпроводники на основе железа ввиду их уникальных физических свойств. Недавно открытая система Fe – содержащих сверхпроводников 1144 -*AeA*Fe_4As_4, где *Ae* – щелочноземельный металл (Ca, Sr, Ba, Eu) и *A* – щелочной металл (K, Rb, Cs), обладает рядом отличительных особенностей [1]. Сверхпроводящие соединения 1144 имеют критическую температуру в диапазоне T_c = 24-36 K и расчётное верхнее критическое поле около 100 Тл [2]. Соединение $EuRbFe_4As_4$ обладает магнитным упорядочением в плоскости ab.

В данной работе были исследованы монокристаллы $EuRbFe_4As_4$, синтезированные методом «self-flux», подробно описанном в работе [3]. Впервые методами просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) были изучены образцы монокристаллов $EuRbFe_4As_4$. Для проведения исследований из образцов с помощью сфокусированного ионного пучка на сканирующем электронном микроскопе были получены тонкие ламели. Срез выполняли вдоль оси *c*. Результаты анализа полученных ПРЭМ изображений указывают на присутствие незначительного количества несверхпроводящей фазы Eu-122. Доля включений фазы Eu-122 составляет 5,6 %, рис.1-а. Рассчитаны параметры кристаллической решетки 1144: *a*, *b* = 3,88 Å, *c* = 13,3 Å, что соответствует литературным данным [4]. Для оценки качества образцов монокристалла $EuRbFe_4As_4$ была измерена температурная зависимость магнитной восприимчивости при ориентации внешнего магнитного поля H || *ab*. Критическая температура сверхпроводящего перехода составляет T_c = 36 K. Магнитный переход для фазы 1144 T_m = 15 K, для фазы 122 - T_m = 19 K, рис.1-б. Наблюдаемые включения несверхпроводящей фазы Eu-122 в приложенном внешнем магнитном поле || *ab* являются двумерными центрами пиннинга.



а)



б)

Рисунок 1 – а) ПРЭМ изображение монокристалла $EuRbFe_4As_4$ с включениями Eu-122, б) Температурная зависимость магнитной восприимчивости для образца монокристалла $EuRbFe_4As_4$.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (21-12-00394).

1. Iyo A et al 2016 J. Am.Chem. Soc. 138 3410
2. Mattew Bristow et al 2020 Phys. RevB. 101, 134502
3. Vladimir Vlasenko et al 2020 Supercond. Sci. Technol. 33 084009
4. https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_16072

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.010

TERMALIZATION OF HOT ELECTRONS IN A MESOSCOPIC SUPERCONDUCTING DISK WITH THE GIANT VORTEX

Samokhvalov A.V.[1†], Shereshevskii I.A.[1], Vdovicheva N.K.[1], Taupin M.[2], Khaimovich I.M.[3], Pekola J.P.[4], Melnikov A.S[1].

[1] *Institute for Physics of Microstructures RAS, Nizhny Novgorod, GSP-105, Russia*
[2] *Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Vienna, Austria*
[3] *Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany*
[4] *QTF Centre of Excellence, Aalto University School of Science, Aalto, Finland*
[†] samokh@ipmras.ru

The progress in low temperature superconducting devices and technologies operating at sub-Kelvin temperatures, requires deeper understanding of the thermalization mechanisms. Such devices are often brought out of equilibrium via processes involving electromagnetic field absorption or the operational drive, and to suppress resulting overheating in a superconductor different types of quasiparticle traps are used. One of the promising types of quasiparticle traps, formed by regions of the reduced superconducting gap and appearing in the Meissner and vortex states, can be efficiently controlled by the external magnetic field. In this report we present the results of the study of behavior of the local density of states and the electron-phonon heat flux in giant vortices penetrating to a circular superconducting mesoscopic sample of the radius R of few coherence lengths ξ, with proper accounting of the sample edge effects. The electronic structure of the giant vortex states in such a superconducting disk is studied in a dirty limit using the Usadel approach in a wide range of magnetic fields H applied perpendicularly to the sample plane. We have demonstrated that transitions between the superconducting states with different vorticities L provoke abrupt changes (jumps) in the local zero bias conductance (ZBC) G_L/G_0 at the edge of the disk (see Fig. 1, G_0 is a conductance of the normal metal junction). These jumps of the ZBC are attributed to the entry/exit of vortices and are accompanied by both the decrease and increase in the ZBC at the sample edge while sweeping the magnetic field up. The change of vorticity L results in jumps in dependence of the electron-phonon heat flux dQ/dt on applied magnetic field H (Fig.2). The flux dQ/dt is measured in the units of the flux $\Sigma / 24\zeta(5)k_B^5$, where Σ is the electron-phonon coupling constant of the material.

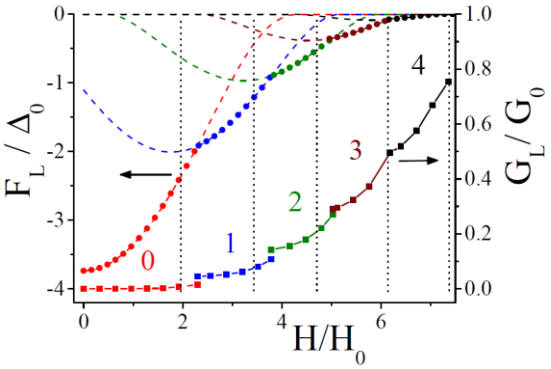


Fig.1 The dependence of the free energy $F_L(H)$ (circles) and the normalized zero bias conductance $G_L(H)$ (squares) at the disk edge for $T=0.1T_c$ (L = 0 - 4; R = 4ξ, $H_0=\Phi_0/\pi R^2$).

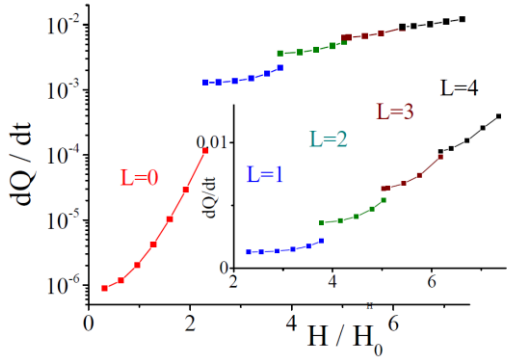


Fig.2 The dependence of the normalized electron-phonon heat flux dQ/dt on the magnetic field H for $T=0.1T_c$ (L = 0 - 4; R = 4ξ, $H_0=\Phi_0/\pi R^2$).

Acknowledgmets. The support by Center of Excellence «Center of Photonics» funded by The Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, contract № 075-15-2020-906.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.011

STRUCTURE OF XE ION TRACKS IN YBCO AND THE INFLUENCE ON THE SUPERCONDUCTIVE PROPERTIES IN MAGNETIC FIELDS

[1]Suvorova E.I., [2]Degtyarenko P.N., [3]OvcharovA.V., [1,3]Vasiliev A.L., [4]Buffat P.A.

[1]A.V. Shubnikov Institute of Crystallography, Federal Scientific Research Centre "Crystallography and Photonics" of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
suvorova@crys.ras.ru
[2]Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences Moscow, Russia
[3]National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia
[4]Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CIME, Lausanne, Switzerland

Along with impurities and nanoscale precipitations, irradiation with heavy ions with low fluences is a potential way to increase the critical current density by creating additional pinning centers with controlled diameters, direction, and continuity. The goal was to analyze the relative importance of the defect morphology on conductive properties in magnetic field up to 8 T at different temperatures from 4.2 to 77 K. Beside the aspect of pinning flux in superconductors, a better knowledge on the possible phase transition in materials (matrix and precipitates) induced by irradiation is also highly desirable with regard to mechanical properties

The effect of irradiation with Xe ions with different energies in the range from 0.13 to 0.77 MeV/nucleon on the microstructure of the $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ (YBCO) layer and yttria precipitates (sizes of about 5–10 nm x 5–10 nm x 10–20 nm in the whole sample) in the HTSC wire (Ag/YBCO/$LaMnO_3$/MgO/Y_2O_3/Al_2O_3/Hastelloy substrate) is studied. In accordance with the transmission electron microscopy results the density of yttria precipitates was about $0.5 – 1.8 \cdot 10^{11}$ cm^{-2} in projection of the 30-40 nm thick sample. While the density of radiation defects is found to be $0.9 – 1.4 \cdot 10^{11}$ cm^{-2} in projection for all samples what corresponds to fluences (about 10^{11} ion/cm^2) applied in this work.

The damaged regions of about 5 nm in diameter contain an amorphous material. The material density drops to 3.60 g/cm^3 compared to the matrix YBCO crystal with a density of 6.36 g/cm^3. The reduction in the superconducting volume does not exceed 4 % from the total sample volume due to the formation of amorphous tracks. The transformation mechanism from crystalline to amorphous structure was attributed to an abrupt increase of the lattice temperature up to melting in a cylindrical region around the ion path followed by a rapid quenching. Y_2O_3 nanocrystals and YBCO matrix retain their pristine structure out of the tracks (cubic and orthorhombic, respectively). Sizes, distributions and shapes of yttria nanoprecipitates before and after irradiation remained essentially unchanged as well no evidences were obtained for irradiation induced precipitation.

Xe ions with high energies create continuous tracks, while discontinuous tracks are formed by low-energy ions. It is shown that the radiation defects - ion tracks have different efficiency in increasing the transport characteristics of superconducting wires in magnetic fields up to 8 Tesla. The largest critical current density occurs in the samples irradiated with the lowest energy applied here (0.13 MeV/nucleon) that corresponds to the highest number of pinning centers (spheroids) along discontinuous tracks. These numerous pinning centers increase the current density in the low and intermediate magnetic fields – 56 MA cm^{-2} (0 T) and 16 MA cm^{-2} (8 T) at 4.2K; 3 MA cm^{-2} (0 T) and 1.6 MA cm^{-2} (8 T) at 77K. If uncoated YBCO wire was considered (after YBCO film growing, for instance), the energy of ions could be reduced.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.012

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЧНОСТИ КОМПОЗИТОВ "МЕТАЛЛ-ГРАФЕН" С ОДНОРОДНОЙ И БИМОДАЛЬНОЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРОЙ

Бобылев С.В., Гуткин М.Ю., Шейнерман А.Г.

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия, bobylev.s@gmail.com

Предложена теоретическая модель, позволяющая рассчитывать предел текучести композитов вида «металл-графен» с однородной ультрамелкозернистой (УМЗ) металлической матрицей, а также с бимодальным распределением зерен по размеру (рис. 1). В рамках модели учитываются как дислокационные механизмы пластичности, так и процессы структурных трансформаций границ зерен, связанные с зернограничным проскальзыванием. В рамках модели предполагалось, что графен преимущественно залегает по границам зерен в УМЗ фазе, а в случае бимодальной структуры также и внутри больших зерен. Предложенная модель учитывает как дислокационные механизмы пластичности, так и зернограничное скольжение. Для случая композитов с однородной УМЗ металлической матрицей на примере композита «УМЗ Ni – графен» было показано, что зернограничное скольжение по пластинам графена может начинаться при реальных напряжениях течения композитов «металл-графен» и уменьшать их предел текучести. Для случая композитов с бимодальной структурой металлической матрицы мы показали, что зернограничное скольжение также уменьшает предел текучести. При этом уменьшение предела текучести композитов, связанное с зернограничным проскальзыванием, проявляется при превышении критического значения объемной доли графена.

Предложенная модель позволяет выявить особенности зависимости предела текучести композитов «УМЗ металл – графен» и «бимодальный металл – графен» от их структурных параметров (размера зерна, объемной доли графена и УМЗ фазы) и определить оптимальные значения этих параметров для достижения максимальной прочности материала.

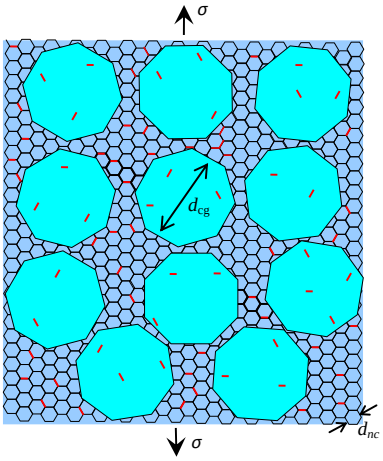


Рис. 1. Бимодальный композит металл-графен (красные линии обозначают графеновые пластины) под действием одноосного растягивающего напряжения.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 18-19-00255.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.013

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ В КОМПОЗИТНЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ С ЯДРОМ В ВИДЕ ДЛИННОЙ ПРЯМОЙ КВАДРАТНОЙ ПРИЗМЫ

Смирнов А.М., Красницкий С.А., Гуткин М.Ю.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, m.y.gutkin@gmail.com

Разработка, получение, исследование и применение различных твердотельных гетероструктур наноскопического масштаба составляют одно из основных направлений развития технологии лазерной фотоники и оптоэлектроники. Сочетание в таких гетероструктурах материалов с разными параметрами кристаллических решеток и коэффициентами теплового расширения приводит к появлению в них высоких упругих деформаций и напряжений несоответствия [1, 2]. При определенных условиях эти деформации и напряжения начинают релаксировать за счет зарождения и развития различных дефектных структур [1–3], в большинстве случаев – дислокаций несоответствия (ДН). Изучение механизмов образования ДН и определение критических условий их срабатывания чрезвычайно важны как для понимания физических процессов развития структуры в неоднородных наноразмерных телах, так и для совершенствования технологии их получения.

В настоящей работе исследованы теоретические модели механизмов образования прямолинейных ДН в цилиндрических композитных нанопроволоках с ядром в виде длинной прямой квадратной призмы, размещенной симметрично относительно цилиндрической поверхности оболочки. Рассчитаны изменения энергии такой системы при образовании ДН, найдены энергетические барьеры для зарождения отдельных полных и частичных дислокаций путем скольжения и переползания со свободной поверхности оболочки, а также путем испускания диполей таких дислокаций ребрами призматического ядра. Показано, что в зависимости от диаметра нанопроволоки и от поперечного размера ее ядра меняется энергетическая предпочтительность срабатывания того или иного механизма релаксации. Например, в нанопроволоке, состоящей из золотого ядра и палладиевой оболочки, наиболее предпочтителен механизм испускания дислокационных диполей ребрами ядра. При этом в более тонких нанопроволоках выгоднее испускание частичных дислокаций, а в более толстых – полных дислокаций. Полученные результаты сравниваются с данными экспериментальных наблюдений.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-19-00617).

Kavanagh K.L. // Semicond. Sci. Technol. – 2010. – Vol. 25. – Art. 024006.

Glas F. // A.F.I. Morral, S.A. Dayeh, C. Jagadish (Eds.), Semiconductor Nanowires I: Growth and Theory, Semiconductors and Semimetals, 93, Elsevier Inc., 2015. – Ch. 2. – P. 79–123.

Smirnov A.M., Krasnitckii S.A., Rochas S.S., Gutkin M.Yu. // Rev. Adv. Mater. Technol. – 2020. – Vol. 2. – No. 3. – P. 19–43.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.014

МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $^{28}Si_{1-x}\,^{72}Ge_x$

Калинина Е.А., Ежевский А.А., Гусейнов Д.В., Сухоруков А.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия, matveevakatya@inbox.ru

В настоящее время актуальна разработка квантового компьютера на спиновых кубитах. Перспективной является идея создания кубита на полупроводниковых материалах, таких как кремний и твердый раствор кремний-германия. Слои $Si_{1-x}Ge_x$ применяются для формирования кремниевой квантовой ямы и индуцированных квантовых точек, при этом, предполагается, что эти слои имеют однородную границу. Актуальным остается вопрос как неоднородность распределения атомов германия влияет на электронные состояния, так как возможно проникновение волновых функций электронов в интерфейсный слой Si/SiGe с нерегулярным распределением атомов германия. Одним из методов изучения особенностей таких структур является электронный парамагнитный (спиновый) резонанс (ЭПР).

В данной работе исследованы монокристаллы $Si_{1-x}Ge_x$, выращенные методом Чохральского (Leibniz Institute for Crystal Growth, Berlin, Germany). Была получена серия образцов с разным содержанием германия (0.39, -5 ат %), обогащенных бесспиновыми изотопами ^{28}Si (99.998%) и ^{72}Ge (99.984%), легированные фосфором в процессе роста. Спектры ЭПР исследовались на спектрометре Bruker-EMXplus-10/12 X-диапазона в интервале T=4-25K (частота 9,6 ГГц).

Спектры ЭПР кремния с естественным содержанием изотопов плохо разрешаются из-за уширения линий, вызванным сверхтонким взаимодействием с ядрами ^{29}Si, что ограничивает возможности анализа экспериментальных спектров [1]. Обогащение кремния бесспиновым изотопом приводит к существенному сужению линий ЭПР электронов, локализованных на донорах [2]. Данный эффект наблюдается и в сплавах $Si_{1-x}Ge_x$, избавляясь от изотопов ^{29}Si и ^{73}Ge. В изотопночистых монокристаллах $Si_{1-x}Ge_x$ при x = 0.39, 1.2, 2.9 ат% наблюдались более узкие линии спектров электронного спинового резонанса по сравнению с аналогичными кристаллами с природной композицией изотопов кремния и германия.

Спектры ЭПР позволили идентифицировать четыре различных типа доноров фосфора в SiGe при малых концентрациях Ge. Им соответствуют пары линий со сверхтонкими константами, *a*=44.4, 42.5, 33.9 и 27.5 Эрст. Деформации, создаваемые атомами германия, искажают структуру A1 основного синглетного состояния фосфора. Исследования эффектов насыщения при разных значениях микроволновой мощности при разных температурах, показали, что скорости релаксации T_1^{-1} возрастают по мере уменьшения констант сверхтонкого взаимодействия. Результаты свидетельствуют о существенно неоднородном распределении германия в твердом растворе $Si_{1-x}Ge_x$. Для разработки спинового кубита необходимо знать, при какой концентрации германия в твердом растворе $Si_{1-x}G_x$ неоднородность распределения атомов не будет оказывать существенного влияния на электронные состояния и волновые функции электронов в смежных слоях.

[1] V.V. Emtsev Jr., C.A.J. Ammerlaan, A.A. Ezhevskii, A.V. Gusev. Physica B, 376–377, 45 (2006)
[2] D.V. Guseinov, A.A. Ezhevskii, C.A.J. Ammerlaan. Physica B, 395, 65 (2007).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.015

РЕЛАКСАЦИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ДЕКАЭДРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦАХ ЗА СЧЕТ ЗАРОЖДЕНИЯ ЦЕНТРАЛЬНОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ

Красницкий С.А., Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Романов А.Е.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, krasnitsky@inbox.ru

Малые кристаллические частицы металлов с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой часто принимают форму многогранника, имеющего оси симметрии пятого порядка, например, пентагональной призмы, икосаэдра или декаэдра. Эти объекты интенсивно изучаются в течение последних сорока лет и до сих пор [1]. Пентагональные частицы характеризуются высоким уровнем внутренних напряжений и запасенной упругой энергии, пропорциональной объему частицы. Хорошо известно, что в процессе роста таких частиц происходит сброс избыточной энергии за счет разнообразных механизмов релаксации, например, образования дислокационных ансамблей, двойниковых границ, поверхностных слоев, включений, пор, трещин, нитевидных кристаллов, растущих с поверхности [2]. Данная работа посвящена изучению релаксации напряжений за счет зарождения поры в одной из таких структур – декаэдрической частице [3].

В рамках энергетического подхода предложена теоретическая модель релаксации напряжений в декаэдрических частицах за счет зарождения центральной сферической поры. Определено аналитическое выражение для упругой энергии полой декаэдрической частицы. Показано, что существует некоторый критический размер частицы, при достижении которого зарождение поры становится энергетически выгодно. Кроме того, показано, что после зарождения поры ее радиус будет увеличиваться, пока не достигнет оптимального значения, соответствующего наибольшему изменению энергии. Полученные теоретические результаты сравниваются с имеющимися экспериментальными данными по наблюдению пор в декаэдрических частицах.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-19-00617).

Marks L.D., Peng L. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2016. – Vol. 28, – Art. No. 053001

Gryaznov V.G., Kaprelov A.M., Romanov A.E., Polonskii I.A. // Phys. Stat. Sol. B. – 1991. – Vol. 167. – No. 2. – P. 441–450.

Ясников И. С., Викарчук А. А. // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48. – №. 8. – С. 1352–1357.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.016

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ МЕЖУЗЕЛЬНОГО ТИПА В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОБЪЕМНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВАХ

Макаров А.С. [1], Гончарова Е.В. [1], Qiao J.C. [2], Кобелев Н.П. [3], Хоник В.А. [1]

[1]*Воронежский государственный педагогический университет, г. Воронеж, Россия*
[2]*Northwestern Polytechnical University, Xi'an, China*
[3]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
a.s.makarov.vrn@gmail.com

Сравнительно недавно были разработаны высокоэнтропийные объемные аморфные сплавы (ВЭОАС), которые благодаря эквимолярному или почти эквимолярному соотношению компонентов в сочетании с аморфной структурой демонстрируют набор многообещающих свойств, таких как высокая прочность, превосходная коррозионная стойкость и др. В силу отсутствия дальнего порядка и повышенной структурной энтропии в ВЭОАС протекают процессы структурной релаксации (СР), которые приводят к изменению практически всех физических свойств. Процесс СР принято интерпретировать с позиции изменения концентрации структурных «дефектов». Природа «дефектов» остается предметом дискуссии. Плодотворность применения межузельной теории (МТ) для описания удельного теплового потока, а также прогнозирования температурной зависимости нерелаксированного модуля сдвига ВЭОАС свидетельствует в пользу дефектов межузельного типа. В настоящем докладе предложен метод оценки энтальпии активации/формирования дефектов межузельного типа в ВЭОАС.

Изменение энтальпии ВЭОАС $\Delta H_{sr}(T)$ может быть экспериментально определено методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) с помощью соотношения $\Delta H_{sr}(T) = \frac{1}{\dot{T}}\int \Delta W(T)dT$, где $\dot{T}$ – скорость нагрева, $\Delta W(T)$ – разность между температурными зависимостями тепловых потоков ВЭОАС и аналогичного кристалла ВЭС. С другой стороны, изменение молярной энтальпии $\Delta H_{sr}(T)$ ВЭОАС связано с изменением молярной концентрации дефектов $\Delta N_{sr}(T)$ с помощью выражения $\Delta H_{sr}(T) = H_f \Delta N_{sr}(T)$, где H_f – энтальпия активации/формирования дефектов. В рамках МТ величина $\Delta N_{sr}(T)$ определяется на основе данных релаксации сдвиговой упругости. Таким образом, параллельные экспериментальные калориметрические измерения (ΔH_{sr}) и исследования релаксации сдвиговой упругости (ΔN_{sr}) позволяют оценить энтальпию образования дефектов H_f.

С целью определения энтальпии образования дефектов межузельного типа проведены специальные измерения для ВЭОАС $Zr_{35}Hf_{17.5}Ti_{5.5}Al_{12.5}Co_{7.5}Ni_{12}Cu_{10}$ и $Ti_{16.7}Zr_{16.7}Hf_{16.7}Cu_{16.7}Ni_{16.7}Be_{16.7}$, с помощью которых получены величины H_f равные 4.3 и 3.5 эВ, соответственно. Следует отметить, что полученные значения H_f хорошо согласуются с величинами энтальпии образования дефектов, рассчитанных при помощи уравнения МТ $H = \alpha\Omega G$, где α – безразмерная константа, Ω – объем, приходящийся на атом, G – модуль сдвига ВЭОАС.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект МК-1101.2020.2).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.017

Механизмы трансформации электромагнитных волн и некоторые критерии неустойчивости образца при расходовании СВЧ энергии

Х. Ф. Махмудов
ФТИ им. А.Ф. Иоффе (Ioffe Institute), Санкт-Петербург, Россия
mailto:h.machmoudov@mail.ioffe.ru

Представлено исследование механизма поглощения и преобразования СВЧ-энергии в тепловую энергию при деструкции образцов влагосодержащих гетерогенных материалов. Установлено, что при поглощении и преобразовании СВЧ-энергии в тепловую энергию начинают выполняться некоторые критерии неустойчивости образца при расходовании энергии и предложен механизм преобразования СВЧ-энергии в тепловую энергию в точках соприкосновения водонасыщенных пор в модельных образцах.

Произведен эксперимент, моделирующий и описывающий механизм трансформации микроволновой энергии в тепловую, отличающийся от ранее рассмотренных механизмов. Механизм основан на резонансных колебаниях СВЧ- волн в порах гетерогенных образцах с последующей трансформацией микроволновой энергии в тепловую в местах соприкосновения. Установлена необходимость определения самого источника зарождения трещиноватости, способа получения и места появления первичного теплового эффекта от микроволнового воздействия при изучении разрушения гетерогенных материалов в области механики разрушения твердого тела.

Рис. Существующая схема, модель твердого тела и схема, добавленная (предложенная) в работе: колонка правая верхняя «микроволновая» и колонка правая нижняя «микроволновая теория разрушения». Микроволновая теория разрушения подробно рассмотрена, и предложено новое направление наряду с другими направлениями разрушения, при изучении модели твердого тела в области исследования прочности и разрушения деструкции во влагосодержащих гетерогенных твердых диэлектриках.

Список литературы

[1] Менжулин М. Г, Махмудов Х. Ф. ЖТФ. 2019, **64**, С. 615- 919
[2] Менжулин М. Г, Махмудов Х. Ф. ЖТФ. 2017, **62,** С.1056 – 1064

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.018

CONDUCTIVITY AND THERMOELECTRIC COEFFICIENTS OF DOPED STO AT HIGH TEMPERATURES

Kh. G. Nazaryan[1] *, M. V. Feigel'man[2,3,1] §

[1]Moscow Institute of Physics and Technology
[2]L.D.Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka, Moscow Region, 143432, Russia
[3]Skolkovo Institute of Science and Technology
*khachnazar@gmail.com, §mvfeigel@gmail.com

Introduction

We developed a theory of electric and thermoelectric conductivity of lightly doped $SrTiO_3$ in the non-degenerate region $k_B T \gg E_F$, assuming that the major source of electron scattering is their interaction with soft transverse optical phonons present due to proximity to ferroelectric transition. We have used kinetic equation approach within relation-time approximation and we have determined energy-dependent transport relaxation time $\tau(E)$ by the iterative procedure. Using electron effective mass m and electron-transverse phonon coupling constant λ as two fitting parameters, we are able to describe quantitatively a large set of the measured temperature dependences of resistivity $R(T)$ and Seebeck coefficient $S(T)$ for a broad range of electron densities studied experimentally in recent paper [1]. In addition, we calculated Nernst ratio $\nu = N/B$ in the linear approximation over weak magnetic field in the same temperature range.

Results of the implemented method

We choose $\lambda = 0.88$ and effective mass $m(T)$ which linearly interpolates between $8.7m_0$ for 100 K to $10.7m_0$ for 700 K. We emphasize that the single set of λ and $m(T)$ was used to fit the data for all different doping concentrations, and relative error is 7-9%.

Acknowledgments

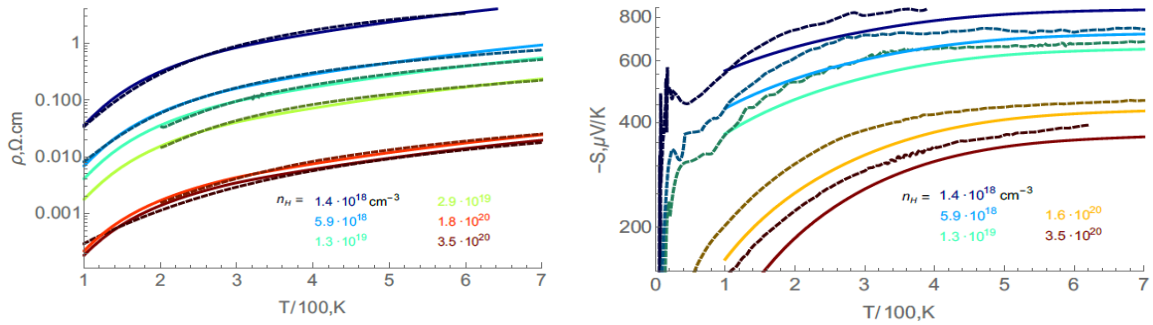


FIG. 1: The comparison of the experimental data (dashed lines) and the theoretical results (full lines) of the resistivity (upper plot) and the Seebeck coefficient (lower plot)

We thank Kamran Behnia and Clement Collignon for many useful discussions of experimental aspects of STO and for providing us with the raw experimental data from [1] we also thank Dirk van der Marel and Igor Mazin for clarifications about the issue of effective electron mass in STO.

We are grateful to Anton Andreev, Denis Basko, Alexei Ioselevich and Dmitry Kiselev for their comments on the theory side. This research was supported by the Russian Science Foundation grant # 21-12-00104.

[1] Clement Collignon, Phillipe Bourges, Benoit Fauque, and Kamran Behnia, "Heavy non-degenerate electrons in doped strontium titanate", Phys. Rev. X 10, 031025 (2020)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.019

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УДАРНЫХ ВОЛН НА ДЕФЕКТНУЮ СТРУКТУРУ ВОЛЬФРАМА

З.А. Шарипов[1], Б. Батгэрэл[3], И.В. Пузынин[1], Т.П. Пузынина[1], И.Г. Христов[2], Р.Д. Христова[2], З.К. Тухлиев[1]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия, zarif@jinr.ru

[2] Софийский университет "Св. Климент Охридски", София, Болгария

[3]Монгольский государственный университет науки и технологии, Улан-Батор, Монголия

Работа посвящена исследованию воздействия ударных волн на дефектную структуру вольфрама с использованием метода молекулярной динамики. Вольфрам и композиты на его основе является перспективным материалом для использования в термоядерных реакторах будущего поколения [1,2]. Чтобы воссоздать условие нахождения вольфрама в термоядерных реакторах используется различные ускорители. Для этого в настоящее время проводятся большое количество экспериментальных исследований для изучения вольфрама под действием различных видов облучения: нейтронами, альфа частицами и тяжелыми ионами высоких энергий. Для математического моделирования воздействия различных видов облучения на вольфрам в основном используется методом молекулярной динамики. Результаты моделирования действия ударной волны при облучении мишени из вольфрама с кристаллической решеткой, содержащей «природные» дефекты, представлять большой интерес в реакторном материаловедении. Различные типы дефектов во многом определяют важные свойства материалов, соответственно изменение дефектов под действием облучения меняет свойства облучаемой мишени. В настоящей работе в рамках метода молекулярной динамики исследуется образцы вольфрама с различными дефектами в глубине под действием ударной волны. Для генерации ударной волны в мишени моделируется облучение тяжелыми ионами вольфрама и кластерами вольфрама различных энергий. В работе получены результаты численного моделирования: пороговая плотность энергии, приводящая к образованию ударных волн, воздействующих на дефектные структуры облучаемой мишени в зависимости от энергии кластера.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта № 20-51-44001 и Полномочного представителя Республики Болгарии в ОИЯИ.

[1] J. Knaster, A. Moeslang and T. Muroga. Materials research for fusion. Nature Physics 12(2016) 424-433.

[2] S. Wurster, N. Baluc, M. Battabyal, et al., Recent progress in R&D on tungsten alloys for divertor structural and plasma facing materials. J. Nucl. Mater. 442(2013), 181-189.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.020

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОРФОЛОГИИ МИКРОПОР В МОНОКРИСТАЛЛАХ МЕТОДОМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВО-КОНТРАСТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ В СИНХРОТРОННОМ ИЗЛУЧЕНИИ

Аргунова Т.С.[1], Кон В.Г.[2]

[1]*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. С.-Петербург,*
argunova@mail.ioffe.ru
[2]*НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва*

Кристаллизация материалов, предназначенных для использования в электронной технике, сталкивается с проблемой микронеоднородности их внутренней структуры. Полную картину с изображением пор, включений и трещин микронного размера в объеме монокристаллов можно получить методом фазово-контрастного изображения объектов на просвет в когерентном синхротронном излучении (СИ). В наших предыдущих исследованиях было показано, что компьютерное моделирование фазово-контрастных изображений позволяет определить параметры микропор в пространственно-неограниченном частично-когерентном пучке СИ с разной шириной спектра [1]. Для получения максимальной яркости энергетическое разрешение $\Delta E/E$ варьировалось от 7×10^{-1}–4×10^{-3} до 10^{-4}–10^{-5} для розового или монохроматического пучка СИ из поворотного магнита или вигглера соответственно. Экспериментально изучены поры разной формы в кристаллах карбида кремния (рис. 1,*a*), нитрида алюминия (рис. 1,*b*) и сапфира (рис. 1,*c*) Моделирование изображений проведено на основе некоторых моделей объектов: капсула, эллиптический цилиндр, сфера (Рис. 1,*d–f*). Расчетные картины получены методом пропагирования волновой функции после освещения объекта в расходящемся от точечного источника излучении. Для моделирования использовалась оригинальная компьютерная программа, которая включала учет фотоэлектрического поглощения, поперечного размера источника и суммирования по спектру.

В данном докладе обсуждаются вопросы определения минимального размера микропор в кристаллах и вычисления их параметров в некоторых случаях. В частности, когда (i) сдвиг фазы очень мал, или (ii) фаза изменяется при поворотах образца, или (iii) положение микропоры в объеме образца заранее неизвестно. Рассмотренные теоретические модели соответствуют экспериментальным данным, полученными при исследовании морфологии и эволюции дислокационных микротрубок в кристаллах SiC. Сделан вывод, что методом компьютерного моделирования можно определять морфологию микропор с размерами сечения от долей микрометра до нескольких микрометров в объеме монокристаллов.

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ № 19-29-12041 mk и 19-29-12043 mk.

T. S. Argunova, V. G. Kohn. // Physics - Uspekhi. – 2019. – V. 62. – № 6. – C. 602–616.

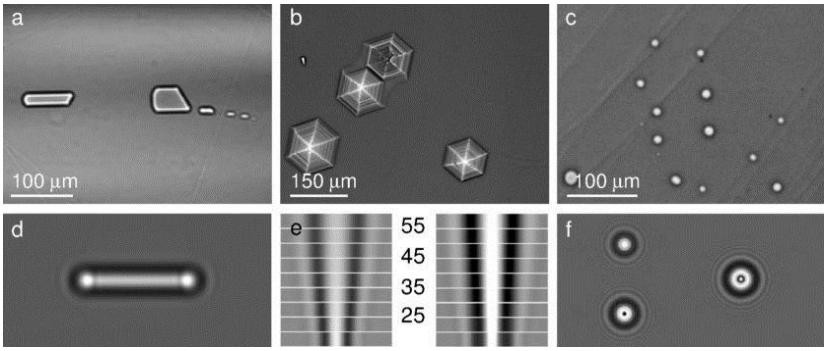


Рис. 1. Изображения микропор в розовом (*a*) и монохроматическом (*b*,*c*) пучке СИ. Расчетные изображения пор в форме капсулы (*d*), трубки (*e*) и сферы (*f*) в кристаллах SiC.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.021

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОЙ ЗАКАЛКИ

[1]Аксенова К.В., [1]Громов В.Е., [2]Иванов Ю.Ф., [3]Ващук Е.С.
[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, 19krestik91@mail.ru
[2] Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
[3]Филиал ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева» в г. Прокопьевске, vaschuk@bk.ru

В настоящей работе проведены исследования структурно-фазовых состояний и дефектной субструктуры рельсовой стали перлитного класса марки Э76Ф после дифференцированной закалки сжатым воздухом по трем различным режимам. Установлено, что независимо от расстояния до поверхности катания рельсов закалка сопровождается формированием морфологически многоплановой структуры, имеющей градиентный характер и представленной зернами пластинчатого перлита (34-87%), зернами феррито-карбидной смеси (12-65%) и зернами структурно-свободного феррита, располагающимися в виде вкраплений по границам зерен перлита. Градиентный характер имеют также зависимости межпластинчатого расстояния, величина которого меняется в пределах 105-200 нм и либо снижается при переходе от поверхности к слою, расположенному на глубине 10 мм (режимы упрочнения 1 и 2), либо не зависит от расстояния до поверхности (режим 3).

Зерна феррито-карбидной смеси фрагментированы и характеризуются наличием в объеме зерна феррита частиц карбидной фазы, которые различаются по размерам и форме. По границам фрагментов располагаются частицы карбидной фазы пластинчатой или глобулярной формы с размерами от 20 до 40 нм.. Объемная доля зерен с глобулярными частицами карбидной фазы изменяется в пределах от 1 % до 21,4 %. В образце после термообработки по 1-му режиму объемная доля зерен с глобулярными частицами карбидной фазы увеличивается по мере удаления от поверхности образца; в образце после термообработки по 2-му режиму – увеличивается незначительно, проходя через максимум (минимум) в слое, расположенном на глубине 2 мм; в образце после 3 режима – уменьшается по мере удаления от поверхности образца. Усреднение по объему слоя толщиной 10 мм показывает, что объемная доля зерен с глобулярными частицами карбидной фазы для рельсов, упрочненных по 1-му режиму, составляет 4,2%, по второму режиму - 4,3%, по третьему режиму - 7,8%.

Ферритная составляющая структуры стали дефектна, выявлены дислокационные субструктуры в виде хаотически распределенных дислокаций, сетчатая, ячеистая и фрагментированная дислокационные субструктуры. В феррите перлитных зерен наблюдаются лишь первые два типа дислокационной субструктуры (субструктура дислокационного хаоса и сетчатая дислокационная субструктура); ячеистая и фрагментированная дислокационная субструктуры выявляются лишь в зернах структурно свободного феррита и в зернах феррито-карбидной смеси. Максимального значения скалярная плотность дислокаций достигает вблизи глобулярных частиц карбидной фазы и составляет ~$8x10^{10}$ $см^{-2}$.

Общим для исследованных рельсов является факт снижения относительного содержания зерен структурно-свободного феррита и зерен феррито-карбидной смеси с увеличением расстояния от поверхности. Следовательно, поверхностный слой исследуемых образцов рельсов характеризуется сравнительно более неравновесным состоянием структуры, что, очевидно, обусловлено повышенной скоростью его охлаждения.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.022

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ РАЗЛИЧНОЙ УПОРЯДОЧЕННОСТИ

Эмиров С.Н. [1,2], **Аливердиев А.А.** [1,3,*], **Заричняк Ю.П.** [4], **Амирова А.А.**[5], **Алиев Р.М.** [1,2], **Рамазанова Э.Н.** [1,2] , [5]**Бейбалаев В.Д.** [1,3]

[1] *ИПГВЭ – филиал ОИВТ РАН, г. Махачкала, Россия*
[2] *Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Россия*
[3] *Дагестанский государственный технический университет, г. Махачкала, Россия я*
[4] *НИУ ИТМО, г. Санкт-Петербург, Россия*
[5] *ИФ ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия*
[*] aliverdi@mail.ru

Анализируются результаты экспериментальных измерений температурной зависимости эффективной теплопроводности различных модификаций GaSb (монокристалл и поликристаллические) и As_2Se_3 (поликристаллическая и аморфная). Теплопроводность измерялась абсолютным стационарным методом [1] при температурах 273-423 K и давлениях 0.1-350 МПа.

Выявлено, что для всех исследуемых образцов температурная зависимость эффективной теплопроводности $\lambda(T,P)$ в обозначенном PT-диапазоне в пределах экспериментальной ошибки может быть представлена в виде степенной функции:

$$\lambda(T,P) = \lambda(T_0,0)\cdot\left(1+\delta_{T_0}(P)\right)\cdot\left(\frac{T}{T_0}\right)^{n_0\cdot(1-\nu(P))},$$

где безразмерные барические функции $\delta_{T_0}(P)$ и $\nu(P)$ аппроксимируются малопараметрическими выражениями. У кристаллических образцов показатель степени при атмосферном давлении имеет отрицательный знак и абсолютное значение, близкое к единице, в то время как у аморфного образца знак показателя степени положительный и абсолютное значение около 0.4. И то, и другое поведение достаточно хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями. [2]

Показано, что для поликристаллических соединений температурная зависимость эффективной теплопроводности с увеличением давления ослабляется (модуль степенного показателя уменьшается). Кроме того, барические зависимости эффективной теплопроводности для поликристаллических образцов имеют существенно больший и нелинейный относительный рост в области от 0.1 до 100 МПа по сравнению с аналогичными зависимостями для аморфного состояния и монокристалла, что свидетельствует о большом вкладе в эффективную теплопроводность границ зёрен.

Работа выполнена в рамках гос. задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации при частичной поддержке гранта РФФИ 20-08-00319а.

Emirov S.N., Aliverdiev A.A., Zarichnyak Yu.P., and Emirov R.M // Rock Mechanics and Rock Engineering. – 2021. DOI: 10.1007/s00603-020-02353-3

Emirov S., Aliverdiev A., Beybalaev V., and Amirova A. // Thermal Science. – on-line first. – 2020. DOI: 10.2298/TSCI200408176E

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.023

INVESTIGATION OF CRYSTAL AND MAGNETIC STRUCTURE OF SPINEL FERRITES UNDER HIGH PRESSURE

Belozerova N.M., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Lukin E.V., Savenko B.N.

Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Moscow Region, Russia, nmbelozerova@jinr.ru

A study of spinel ferrites is great importance regarding their interesting structural and magnetic properties having both fundamental and applied interest [1]. In particular, the canted antiferromagnetic, ferrimagnetic, spin glass and semi-spin glass states can be realized in these compounds [2].

A significant saturation magnetization, relatively high electrical resistivity, low electrical losses and a good chemical stability make the spinel-type ferrites important for broad range of technological applications as transformer cores, radio frequency circuits, rod antennas, data storage devices [3,4]. Moreover, such ferrites may be useful in biomedicine: as an efficient heating agent for treating cancer tissues by means of magnetic hyperthermia, as biomarkers for MRT diagnostics and in magnetic drug delivery systems [4].

A wide range of magnetic properties of spinel ferrites determined by the peculiarities of distribution of iron ions between different crystallographic sites in spinel-type crystal structures [3]. One of the important parts of advanced research of Zn-Cu spinel-type ferrites is the synthesis of complex ferrites with controlled redistribution of iron ions between A and B sites, leading to variation of magnetic properties of ferrites [4]. Understanding the relationship between the structural properties and magnetic order of ferrite spinel can be given by the studies of the modifications of the magnetic structure upon variation of structural parameters under a pressure application.

In present work, a spinel ferrite $Zn_{0.3}Cu_{0.7}Fe_{1.5}Ga_{0.5}O_4$ was chosen at ambient condition, and performed neutron diffraction studies at high pressure. Neutron powder diffraction measurements at ambient and high pressures up to 4.7 GPa were performed at ambient temperatures with the DN-6 diffractometer at the IBR-2 high-flux pulsed reactor [FLNP, JINR] using the sapphire anvil high-pressure cell. In additional, for studies the role of structural parameters across the paramagnetic-ferrimagnetic phase transition we had investigate structure and magnetic moments evolution in temperature range 300 - 425 K.

With increasing temperature and pressure, a gradual decreasing of the magnetic moments of iron ions in the A and B crystallographic sites were observed. This effect corresponds to magnetic phase transition from ferrimagnetic state to paramagnetic one. The lattice parameters, interatomic bond lengths and angles, magnetic moments of iron as functions of temperature and pressure were calculated. The structural mechanisms of the magnetic transition in spinel ferrite compounds are discussed.

The work has been supported by the RFBR grant № 20-02-00550-a.

R. Valenzuela, // Physics Research International. – 2012. – T. 2012.
S.S. Ata-Allah, M. Yehia. // Physica B. – 2009. – T. 404. – C. 2382-2388.
H. El. Moussaoui, R. Masrour, O. Mounkachi, M. Hamedoun, A. Benyoussef. //Journal of superconductivity and novel magnetism. – 2012. – T. 25. – № 7. – C. 2473-2480.
M. Veverka, Z. Jirák, O. Kaman, K. Knížek, M. Maryško, E. Pollert, S. Vratislav. // Nanotechnology. – 2011. – T. 22. – № 34. – C. 345701.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.024

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ

ПОРИСТОГО СПЛАВА TiNi, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

[1]Беляев С.П., [2]Рубаник В.В., [1]Реснина Н.Н., [2]Рубаник В.В. мл., [2]Кулак М.М., [1]Чепела Д.В., [1]Люльчак П.С., [1]Калганов В.Д.

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия,
[2]Институт технической акустики Национальной академии наук Беларуси, Витебск, Белоруссия
spbelyaev@mail.ru

Пористые сплавы с эффектом памяти формы являются перспективными материалами для имплантологии. Основными технологиями получения пористых сплавов с памятью формы на основе TiNi являются послойное лазерное плавление, сплавление с наполнителем и самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС). В первых двух методиках используют порошок TiNi, что сильно увеличивает стоимость изделия. Кроме этого сами методики являются трудоемкими и требуют использования сложного оборудования. Для получения пористых сплавов с памятью формы на основе TiNi методом СВС используют порошки титана и никеля, а сама реакция синтеза длится несколько секунд. Таким образом, получение пористого сплава TiNi методом СВС является очень перспективным, однако структура такого сплава очень неоднородна, что сильно ухудшает его функциональные свойства. Поэтому большое внимание уделяется разработке методов управления структурой пористых сплавов на основе TiNi, полученных методом СВС.

Традиционно в качестве управляющих параметров рассматривают химический состав смеси порошков, температуру предварительного нагрева и термообработку полученных заготовок. В настоящей работе в качестве новых управляющих параметров предлагается использовать давление аргона в камере СВС и ультразвуковое воздействие в процессе СВС. Полученные результаты показали, что увеличение давления аргона в камере от 1 до 5 атм влияет на пористую структуру, которая меняется от равномерной до слоистой, и уменьшает температуры мартенситных переходов, что может быть связано с изменением доли вторичных частиц, обогащенных никелем. Приложение ультразвуковых колебаний к смеси порошков влияет как на пористую структуру, так и на структуру межпоровых перегородок. Установлено, что изменение структуры перегородок зависит от типа и формы волновода и амплитуды колебаний. Вместе с тем, структура межпоровых перегородок слабо меняется в зависимости от того воздействовали ли колебания в процессе СВС или после синтеза. Синтез пористого сплава TiNi с одновременным действием ультразвуковых колебаний приводит к тому, что доля фазы TiNi с концентрацией никеля 50,0 ат. % и менее увеличивается, в то время как доля фазы TiNi с концентрацией никеля более 50,0 ат. % не изменяется. Показано, что это связано с тем, что при наложении ультразвуковых колебаний происходит расслоение никелида титана на области, содержащие сплав TiNi с избытком титана и частицы фазы Ti_2Ni, или сплав TiNi с избытком никеля и частицы фазы Ti_2Ni_3 и Ti_3Ni_4.

Работа выполнена в рамках совместного проекта РФФИ-БФФИ (РФФИ № #20-58-00025, БФФИ # Т20Р-377*)*

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.025

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СТРУКТУРА СПЛАВОВ Ni-Mn-In ПРИ ЗАМЕЩЕНИИ НИКЕЛЯ КОБАЛЬТОМ

Калетина Ю.В., Калетин А.Ю., Герасимов Е.Г., Грешнова Е.Д.

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, г. Екатеринбург, Россия,
kaletina@imp.uran.ru

Сплавы на основе Ni-Co-Mn-In относятся к новому классу интеллектуальных материалов, сочетающих свойства ферромагнетиков с бездиффузионным мартенситным превращением, которые демонстрируют эффект памяти формы, магнитокалорический эффект, большое магнитосопротивление и другие свойства в ходе фазовых превращений, вызванных воздействиями температуры, различных внешних нагрузок и магнитных полей [1-3].

В работе изучали сплавы семейства $Ni_{47-x}Co_xMn_{42}In_{11}$ ($0 \le x \le 5$), где x изменяется от 0 до 5, и атомы никеля последовательно замещаются атомами кобальта при неизменном содержании марганца и индия. Сплавы были выплавлены методом индукционной плавки в атмосфере аргона. Слитки подвергали гомогенизирующему отжигу в вакууме при температуре 1173 К в течение 216 часов с последующей закалкой в воду, а затем вырезали образцы для структурных исследований, дилатометрических и магнитных измерений.

В высокотемпературной области все исследуемые сплавы $Ni_{47-x}Co_xMn_{42}In_{11}$ имеют кубическую кристаллическую решетку аустенита, упорядоченную по типу $L2_1$ фазы. При охлаждении в сплавах происходит магнитный переход из парамагнитного в ферромагнитный аустенит, а затем - мартенситное превращение, сопровождающееся перестройкой кристаллической решетки.

Установлено, что легирование сплавов на основе Ni-Mn-In кобальтом приводит к изменению температур фазовых и структурных переходов. Замещение атомов никеля атомами кобальта в системе Ni-Co-Mn-In уменьшает концентрацию валентных электронов *e/a*, при этом повышается температура Кюри и понижается температура мартенситного превращения.

Обсуждаются особенности структуры мартенсита в сплавах с разным содержанием кобальта. Показано, что при охлаждении в сплавах $Ni_{47-x}Co_xMn_{42}In_{11}$ формируется сложная мартенситная структура. Наблюдаются разные морфологические типы мартенсита - тонкопластинчатый модулированный мартенсит 14*M* и внутренне двойникованный мартенсит.

Проведенное исследование открывает новую перспективу для понимания различных типов мартенситных фазовых превращений в сплавах с эффектом памяти формы, и может быть полезным в практических приложениях.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Структура» при частичной поддержке проекта РФФИ № 20-03-00056.

1. Buchelnikov V.D., Sokolovskiy V.V. // Physics of Metals and Metallography. – 2011. – Vol. 112. – No. 7. – P. 633–665.
2. Kaletina Yu.V., Gerasimov E.G. // Physics of the Solid State. – 2014. – Vol. 56. – No. 8. – P.1634-1638.
3. Kaletina Yu.V., Gerasimov E.G., Terent'ev P.B., Kaletin A.Yu. // Physics of the Solid State. – 2019. – Vol. 61. – No. 4. – P. 654–658.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.026

СТРУКТУРА И СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ЦТС, ОСАЖДЕННЫХ МЕТОДОМ ВЧ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ ПРИ ВАРИАЦИИ РАССТОЯНИЯ МИШЕНЬ-ПОДЛОЖКА

Каптелов Е.Ю.[1], Пронин И.П.[1], Сенкевич С.В.[1], Пронин В.П.[2]
[1]*ФТИ им. А.Ф. Иоффе г. Санкт-Петербург, Россия,*
kaptelov@mail.ioffe.ru
[2]*РГПУ им. А. И. Герцена, г. Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время тонкие пленки твердых растворов $Pb(Zr,Ti)O_3$ (или ЦТС) являются одними из основных материалов для создания энергонезависимой памяти с произвольной выборкой, микроэлектромеханических преобразователей, инфракрасных устройств, и т.д. Важным вопросом при изготовлении устройств на базе ЦТС является возможность оперативного изменения (оптимизации) состава осаждаемой пленки. Одним из таких способов является изменение расстояния мишень-подложка в камере ВЧ магнетронного распыления. Физические причины этого связаны с изменением характера рассеяния распыляемых атомов в газовой плазме в условиях конкретной геометрии взаимного расположения мишени и подложки [1].

Тонкие пленки ЦТС осаждались из составной керамической мишени стехиометрического состава, соответствующего области морфотропной фазовой границы. Исследования состава тонких пленок ЦТС (РЭМ EVO-40, INCA), осажденных при вариации расстояния мишень-подложка 30-70 мм показали, что элементное соотношение Ti/Zr в пленках изменялось в диапазоне 0-1.5 %, рис.1. В отличие от метода вариации состава путем изменения давления рабочего газа [2], в данном методе все пленки характеризовались однофазной перовскитовой структурой. Выявлено изменение фазового состояния (соотношения моноклинной и тетрагональной модификаций сегнетоэлектрической фазы), исследованного методом дифракции отраженных электронов (ДОИ). В работе также приводятся данные по изменению сегнетоэлектрических свойств изготовленных ЦТС структур, проводится обсуждение полученных результатов.

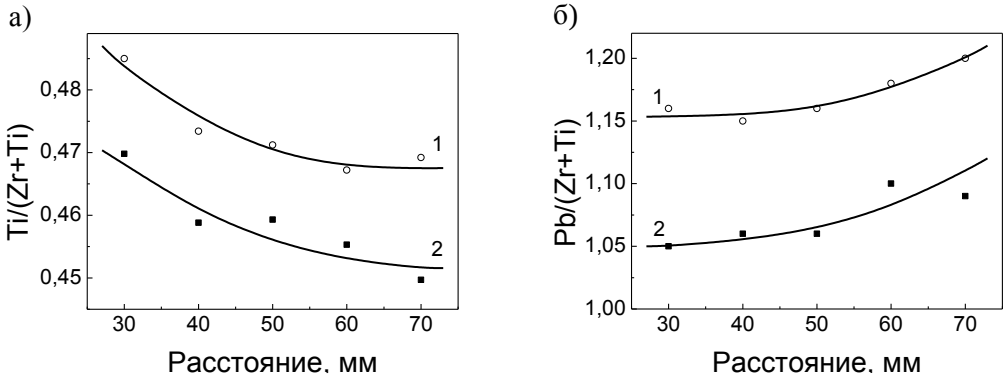


Рисунок 1 Изменения содержания Ti (а) и соотношения атомов Pb/(Ti+Zr) (б) в пленках ЦТС при изменении расстояния от мишени до подложки: в осажденных (аморфных) пленках (1), сформированных в структуру перовскита в результате высокотемпературного отжига (2).

Вольпяс В.А., Козырев А.Б. // ЖЭТФ.– 2011.– Т. 140.– Вып. 1(7).– С.196-204.
Вольпяс В.А., Козырев А.Б., Тумаркин А.В., Долгинцев Д.М., Пронин В.П., Каптелов Е.Ю., Сенкевич С.В., Пронин И.П. // ФТТ.– 2019.– Т. 61.– Вып. 7.– С.1282-1286.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.027

ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА УПРОЧНЕНИЯ 100-МЕТРОВЫХ РЕЛЬСОВ ПОСЛЕ ДЛИТЕЛЬНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Кормышев В.Е.1, Громов В.Е.[1], Рубанникова Ю.А.[1], Иванов Ю.Ф.[2]
[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия, gromov@physics.sibsiu.ru*
[2]*Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия*

Цель настоящей работы: оценка механизмов и установление физической природы упрочнения поверхностных слоев дифференцированно закаленных 100-метровых рельсов по центральной оси после экстремально длительной эксплуатации.

В качестве материала исследования использованы дифференцированно закаленные 100-м рельсы категории ДТ350, изъятые из пути на Экспериментальном кольце РЖД после пропущенного тоннажа 1411 млн. т брутто.

Длительная эксплуатация рельсов приводит к существенной трансформации структурно-фазового состояния рельсов. Во-первых, к разрушению структуры пластинчатого перлита и формированию в объеме перлитных колоний субзеренной структуры субмикронных (100-150 нм) размеров. Во-вторых, к выделению по границам и в объеме субзерен частиц карбидной фазы нанометрового диапазона. В-третьих, к росту микроискажений и параметра кристаллической решетки твердого раствора на основе α-железа. В-четвертых, к деформационному наклепу металла, приводящему к увеличению (в 1,5 раза), относительно исходного состояния, скалярной и избыточной плотности дислокаций.

Выявленные преобразования структуры стали будут существенным образом сказываться на прочностных и пластических характеристиках металла, определяя, в конечном итоге, срок службы изделия. Выявить закономерности, связывающие параметры структуры и прочностные свойства материала, вскрыть физическую природу процесса эволюции свойств, позволяют оценки механизмов упрочнения.

При этом необходимо учитывать вклады, обусловленные трением решетки матрицы, внутрифазными границами, дислокационной субструктурой, присутствием карбидных частиц, внутренними полями напряжений, твердорастворным упрочнением, перлитной составляющей структуры стали.

Общий предел текучести стали в первом приближении, основанном на принципе аддитивности, который предполагает независимое действие каждого из механизмов упрочнения материала, можно представить в виде линейной суммы вкладов отдельных механизмов упрочнения:

$\sigma = \Delta\sigma_0 + \Delta\sigma(L) + \Delta\sigma(\rho) + \Delta\sigma(h) + \Delta\sigma(ч) + \Delta\sigma(тв) + \Delta\sigma(П)$,

где $\Delta\sigma_0$ = 30 МПа – вклад, обусловленный трением решетки матрицы, $\Delta\sigma(L)$ – вклад, обусловленный внутрифазными границами, $\Delta\sigma(\rho)$ – вклад, обусловленный дислокационной субструктурой, $\Delta\sigma(ч)$ – вклад, обусловленный присутствием частиц карбидных фаз, $\Delta\sigma(h)$ – вклад, обусловленный внутренними полями напряжений, $\Delta\sigma(тв)$ – вклад, обусловленный твердорастворным упрочнением, $\Delta\sigma(П)$ – вклад, обусловленный перлитной составляющей структуры стали.

Таким образом, определив количественные характеристики структуры стали, можно в первом приближении осуществить анализ физических механизмов, ответственных за эволюцию твердости стали в процессе эксплуатации рельс, а также выявить физические механизмы формирования градиента твердости рельсовой стали.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-32-60001.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.028

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ, УПРОЧНЕННОГО НАНОЧАСТИЦАМИ КАРБИДА КРЕМНИЯ

Кутжанов М.К., Корте Ш., Нарзуллоев У.У., Матвеев А.Т., Штанский Д.В.
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия, makonyo95year@gmail.com

Одним из методов повышения механических свойств алюминия (Al) является использование дисперсно-упрочняющих добавок нитридов (BN, Si_3N_4 и AlN), боридов (TiB_2, AlB_2 и ZrB_2), оксидов (SiO_2, B_2O_3 и TiO_2) и карбидов (SiC, TaC, TiC и WC) [1, 2]. Благодаря высокой удельной прочности, низкому коэффициенту теплового расширения и низкой плотности, композиционные материалы (КМ) на основе алюминия, упрочненные наночастицами карбида кремния, широко используются в машиностроительной, автомобильной и аэрокосмической промышленности. В данной работе исследовалось формирование Al на поверхности наночастиц SiC при прохождении смеси нанопорошков Al и SiC через микроволновую плазму, а также влияние включения наночастиц SiC на механические свойства КМ на основе Al.

В качестве исходного материала использовались наночастицы Al (d=100-150 нм) и SiC (d=40-90 нм). Для равномерного распределения наночастиц SiC в Al матрице проводился размол смесей порошков Al с различным содержанием SiC в высокоэнергетической шаровой мельнице (ВШМ) E_{max} (Retsch GmbH, Германия). После размола смеси порошков Al/SiC обрабатывались в микроволновой аргоновой плазме (МП). Композиционные частицы Al-SiC, полученные в МП консолидировались методом искрового плазменного спекания (ИПС) на установке LABOX 650 (SINTER LAND Inc., Япония). Испытания полученных КМ Al/SiC для определения их прочности на растяжение проводились на универсальный испытательной машине AG-Xplus 20kN (Shimadzu Corp., Япония).

Для полученных по нескольким режимам ВШМ, МП и ИПС образцов, методом сканирующей электронной микроскопии была выявлена хорошая смачиваемость SiC расплавленным Al, при этом не наблюдается реакционных взаимодействий между фазами. Было изучено влияние параметров плазмохимической обработки на морфологию Al на поверхности наночастиц SiC. Установлено, что при пониженном давлении в реакторе плазма более однородна, что способствует формированию сплошного слоя Al на поверхности частиц SiC. Установлено, что при добавлении в Al матрицу 10 вес. % SiC, прочность КМ на разрыв увеличивается в 1,5 раза по сравнению с исходным алюминием. На основе полученных результатов в качестве наиболее вероятного механизма упрочнения КМ предложен механизм Орована.

Разработанный метод может быть масштабирован в промышленности, что позволяет создать эффективную технологию производства высокопрочных КМ на основе алюминия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-33-90110.

Kvashnin, D.G., M.K. Kutzhanov, S. Korte, et al., Mechanical Properties of the Interface of Al/SiC Heteroparticles and Their Composites: a Theoretical and Experimental Study // Technical Physics Letters, 2020. 46(4): p. 342-345.

Corthay, S., M.K. Kutzhanov, A.M. Kovalskii, et al., Obtaining Heterogeneous Al/BN Nanoparticles in Microwave Plasma // Technical Physics Letters, 2020 46(5): p. 484-486.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.029

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $Bi_{2-X}Mn_XWO_6$ С ПОМОЩЬЮ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

Лис О.Н., Кичанов С.Е., Белозерова Н.М., Лукин Е.В., Савенко Б.Н., Балакумар С.

Объединённый институт ядерных исследований,
г. Дубна, Россия, lisa_9477@mail.ru

Открытие необычных диэлектрических свойств, таких как сегнетоэлектричество, привело к изучению большого количества сегнетоэлектрических оксидов различных структурных семейств с целью выявления новых материалов и/или композиций, которые являются перспективными кандидатами для использования в практических целях. Среди всех этих материалов серьезное внимание было уделено различным бессвинцовым сегнетоэлектрикам (проявляющим сегнетоэлектрические/антиферроэлектрические ферромагнитные/антиферромагнитные свойства в одной и той же фазе) с уникальными свойствами. Огромное внимание привлекли соединения, содержащие ионы Bi^{3+}. Интерес к этим соединениям также обусловлен возможностью использования их в качестве фотокатализатора разложения таких загрязнителей, как ацетальдегид и хлороформ, под действием видимого света. Однако структурные преобразования перовскитоподобных соединений, синтезированных введением переходных металлов в Bi_2WO_6 - $Bi_{2-x}Mn_xWO_6$ - являются менее исследованными сериями.

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической структуры $Bi_{2-x}Mn_xWO_6$ (x=0, 1, 1.2) методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ, Дубна, Россия) с использованием ячейки высокого давления с сапфировыми наковальнями в широком диапазоне давлений и температур. Получены температурные зависимости параметров элементарной ячейки, объема и межатомных расстрояний соединения $Bi_{2-x}Mn_xWO_6$. Рассчитанные коэффициенты сжимаемости указывают на аномалии в поведении параметров элементарной ячейки, межатомных расстояний. Для улучшения понимания неустойчивостей решетки были проведены также рамановские спектроскопические исследования колебательных спектров соединений $Bi_{2-x}Mn_xWO_6$.

Благодарности.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ N19-52-45009 ИНД_а.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.030

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЕФОРМАЦИИ НА ЭФФЕКТ РЕАЛИЗАЦИИ ВЫСОКОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ В УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СПЛАВЕ Al–1.5Cu

Мавлютов А.М., Яппарова Э.Х.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, a.m.mavlyutov@gmail.com

В работе исследованы механические свойства и микроструктура ультрамелкозернистого (УМЗ) сплава системы Al–Cu, подвергнутого интенсивной пластической деформации кручением и дополнительной деформационно-термической обработке, включающей кратковременный отжиг при 150 °C и последующую деформацию кручением на 0.25 оборота. Впервые получена температурная зависимость прочности и пластичности в интервале температур –80 до 20 °C для УМЗ сплава. Установлена критическая температура механических испытаний, при которой происходит активация механизма реализации высокой пластичности (рис. 1, а). Микроструктура УМЗ сплава исследована методами дифракции обратнорассеянных электронов (рис. 1, б) и просвечивающей электронной микроскопии (рис. 1, в). Обсуждается физические природа механизма реализации высокой пластичности УМЗ сплава в корреляции с эволюцией микроструктуры.

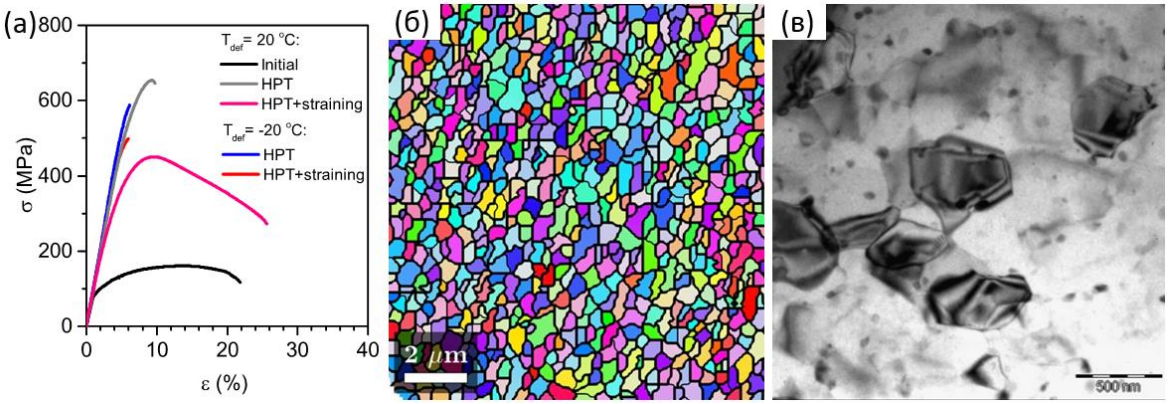


Рис. 1. (а) – кривые «напряжение – деформация» для образцов сплава Al–Cu, полученные при различных температурах испытаний; (б, в) – микроструктура УМЗ сплава.

Благодарности.
Авторы А.М.М. и Э.Х.Я. благодарят Российский научный фонд (грант № 19-79-00114) за финансовую поддержку работы.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.031

ВЛИЯНИЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ В НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ С РАЗНЫМ РАЗМЕРОМ ЗЕРНА

[1]Москвина В.А., [1]Астафурова Е.Г., [1,2]Загибалова Е.А.

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия
[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия, valya_moskvina@mail.ru

С применением методов металлографии, рентгеновского анализа, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии исследовали влияние размера зерна в аустенитной нержавеющей стали Fe-17Cr-13Ni-1,7Mn-2,7Mo-0,5Si-0,01C (масс. %, АНС) на фазовый состав, микроструктуру и ее морфологию в упрочненных слоях, сформированных при ионно-плазменном насыщении поверхности атомами внедрения. Методами термомеханических обработок были получены три типа образцов с аустенитной структурой, которые обладали одинаковыми параметрами кристаллической решетки a=3,597 Å, микронапряжениями ~10^{-4}, а также близкой плотностью дислокаций ρ~10^{13} м$^{-2}$. Два типа образцов обладали мелкокристаллической структурой с размером зерна d=3,7±2,4 мкм (МС-1) и d=5,9±3,9 мкм (МС-2), один – крупнокристаллической структурой с d=54,7±31,2 мкм (КС-3). Диффузионное ионно-плазменное насыщение поверхности образцов атомами внедрения проводили в смеси газов азота (25% N_2), ацетилена (5% C_2H_2) и аргона (70% Ar) при температуре 540°C (12 ч) и давлении 300 Па.

В результате ионно-плазменной обработки в образцах были сформированы поверхностные композиционные слои, состоящие из легированного азотом и углеродом аустенита, феррита, нитридов и карбонитридов разного состава. Независимо от размера зерна в образцах при металлографическом анализе поперечных протравленных шлифов наблюдали двухслойную микроструктуру поверхностно-упрочненных участков (I – внешний и II – внутренний слои). В МС-1 и МС-2 образцах внешний слой I обладал повышенной травимостью, наиболее активно происходило травление вдоль границ и внутри зерен из-за присутствия нитридных и карбонитридных фаз, а слой II имел однородную структуру. При рентгенофазовом анализе и ПЭМ-исследованиях в таких образцах выявляли смесь фаз Cr(N,C), Fe-α и Fe-$\gamma_{N,C}$ во внешнем поверхностном слое I и фазу Fe-$\gamma_{N,C}$ в слое II. Несмотря на слабую травимость в области II, методами ПЭМ в ней наблюдали дисперсные фазы Cr(N,C) и Fe-α в аустенитных зернах. В КС-3 образцах формировался более тонкий внешний слой и наблюдалась меньшая травимость вдоль границ зерен. При этом внутренний слой II был более протяженный, чем в МС-1 и МС-2 образцах. Фазовый контраст в виде полос в теле зерен свидетельствовал о присутствии вторичных фаз в слое II. Так же как и в случае мелкозернистых состояний, в поверхностно-упрочненной области КС-3 образцов наблюдалась смесь фаз, преимущественно Fe_4(N,C) и Fe-$\gamma_{N,C}$, но с меньшей долей частиц Cr (N,C) и Fe-α. Микроструктура упрочненной области представлена исходно-крупными зернами Fe-$\gamma_{N,C}$-фазы и строчечным расположением частиц Fe_4(N,C)-фазы внутри аустенитных зерен. Области размером <1 мкм с мелкодисперсными фазами Cr(N,C)+Fe-α наблюдали преимущественно вдоль границ зерен. На глубине ≈15-18 мкм от поверхности образцов КС-3 частицы Fe_4(N,C)-фазы наблюдались реже, а при достижении глубины ≈50 мкм микроструктура была аналогична исходному состоянию (аустенит). Таким образом, в работе экспериментально показано, что исходный размер зерна в АНС влияет на распределение фаз и морфологию гетерофазной структуры в поверхностно-упрочненных слоях.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ (СП-14.2019.1). Авторы благодарны д.т.н. Рамазанову К.Н. за помощь с ионно-плазменной обработкой.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.032

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОГО ПОКРЫТИЯ СИСТЕМЫ WC-AG-N ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ И АЗОТИРОВАНИЯ

[1]Московский С.В., [1]Почетуха В.В., [1]Романов Д.А., [2]Иванов Ю.Ф.

[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия, psk-svm@yandex.ru

[2]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия, yufi55@mail.ru

Комбинированным методом, сочетающим электровзрывное напыление, электронно-пучковую обработку и азотирование получено покрытие на основе серебра, меди, карбидов и нитридов вольфрама. Методами современного физического материаловедения (сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия, рентгенофазовый анализ) изучены структура и фазовый состав покрытий. Определены износостойкость, коэффициент трения, твердость и электроэрозионная стойкость.

Для дугостойких контактов переключателей мощных электрических сетей используют сплавы на основе меди, серебра, алюминия, платины, золота молибдена, вольфрама и других химических элементов. Такие сплавы должны обладать определенным комплексом свойств, в том числе высокой электропроводностью, теплопроводностью, дугостойкостью, стойкостью против коррозии и др. Этим требованиям отвечают композиционные материалы на основе матрицы, обладающей высокой электропроводностью и наполнителя с высокой дугостойкостью. В качестве матрицы используют такие металлы как медь, серебро, золото, платина и сплавы на их основе. В качестве наполнителя применяют оксиды цинка, олова, меди, кадмия и других металлов, карбиды и нитриды вольфрама и молибдена. Несмотря на приемлемые характеристики этих композиционных материалов их применение неэффективно с экономической точки зрения по сравнению с формированием аналогичных покрытий на поверхности экономичных подложек. Однако, получить такие композиционные покрытия до сих пор не представляется возможным из-за ряда проблем их формирования, в том числе низкой адгезии покрытий, либо невозможности получения покрытия из-за технологических особенностей того или иного метода. Исключение составляет метод электровзрывного напыления, позволяющий формировать композиционные покрытия, в том числе, и с высокой электроэрозионной стойкостью. Улучшить качество поверхности электровзрывных покрытий, гомогенизировать их объем и создать наноструктурное состояние позволяет обработка низкоэнергетическими электронными пучками. Повысить твердость электровзрывных покрытий возможно с применением азотирования. Современная физика конденсированного состояния в качестве одного из приоритетных направлений указывает разработку методов повышения эксплуатационных характеристик материалов.

С учетом вышеизложенного целью настоящей работы является исследование структуры и свойств композиционного покрытия состава Ag-WC-N, сформированного на меди комбинированным методом, сочетающим электровзрывное напыление, облучение импульсным электронным пучком и последующее азотирование в плазме газового разряда низкого давления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-486.2020.8 и кандидатов наук МК-5585.2021.4, а также при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-00044.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.033

ВЛИЯНИЕ ЦИКЛИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ И НАНЕСЕНИЯ ОКСИДНОГО ПОКРЫТИЯ НА УСТАЛОСТНЫЕ СВОЙСТВА СУБМИКРО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И РЕКРИСТАЛЛИЗОВАННОГО ТИТАНА ВТ1-0

Нарыкова М.В.[1], Бетехтин В.И.[1], Кадомцев А.Г.[1], Колобов Ю.Р.[2], Амосова О.В.[1]

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

[2]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

Maria.Narykova@mail.ioffe.ru

В силу особенностей своих свойств титан является одним из основных конструкционных материалов в медицинской области [1, 2]. Поэтому получение высокопрочного титана методами интенсивной пластической деформации (ИПД) и оценка стабильности этих свойств в условиях длительного нагружения весьма актуальна. Не менее важной является оценка влияния на механические свойства субмикрокристаллического (СМК) титана, полученного при ИПД, оксидного покрытия, которое улучшает биосовместимость имплантата с организмом человека [1]. В данной работе изучался СМК титан, полученный по режиму продольной и поперечно-винтовой прокаток [2], со средним размером структурных элементов порядка 190 nm. Однородная рекристаллизованная структура (РС) была получена из СМК структуры после отжига при 823 К в течении часа; средний размер зерен в РС состоянии составлял ≈ 2.35 μm.

Исследование усталостных характеристик титана в СМК и РС состояниях проводилось по схеме нагружение растяжением в симметричном пилообразном цикле в области нагружения $0.9\sigma_{max}$ – $0.2\sigma_{max}$. Количество циклов для исследованных образцов варьировались от $2\cdot10^5$ до $2\cdot10^6$. Величина нагрузки, при которой не происходило разрушение при этом числе циклов, служило характеристикой условного предела выносливости (УПВ).

В работе была проведена оценка степени повреждаемости образцов СМК и РС титана до начала их испытания в режиме усталости. Для этого методом гидростатического взвешивания определялась плотность образцов, а методом малоуглового рентгеновского рассеяния - параметры нанопор и их объем [3]. Были проведены также фрактографические исследования поверхности разрушенных образцов, после их испытаний до $2\cdot10^6$ циклов и «дорыва».

Установлено, что УПВ при $2\cdot10^6$ циклах у СМК титана с покрытием и без него в 1,4 раза выше, чем у РС титана. Оксидные покрытия ведут к небольшому (~8%) повышению усталостных свойств. Обнаружена тенденция снижения УПВ титана с ростом циклов нагружения. Для СМК титана без покрытия УПВ при $2\cdot10^5$ был в 1.6 раз больше, чем для КЗ титана, а с покрытием – в 1.8 раза. Анализируется природа упрочняющего влияния оксидного покрытия на долговечность СМК титана при циклическом нагружении.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-58-26005 Чехия_а).

Huang N., Yang P. et. al.// Biomaterials. – 2003. – Vol.24. – Issue 13.– P. 2177–2187.

Kolobov Yu. // Nanotechnologies in Russia. – 2009. – Vol.4. – № 11–12. P. 758–775.

Бетехтин В.И., Кадомцев А.Г., Нарыкова М.В. //ФТТ.– 2020. – Т. 62. – № 2. С.267–273.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.034

РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ В АЛЮМИНИИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОСТОЯННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Невский С.А.[1], Коновалов С.В.[2], Ващук Е.С.[3], Громов В.Е.[1]

[1] *Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия,* nevskiy.sergei@yandex.ru
[2] *Самарский национальный исследовательский университет им С.П. Королева, г. Самара, Россия,* ksv@ssau.ru
[3] *Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева, Прокопьевский филиал, г. Прокопьевск, Россия,* vaschuk@bk.ru

Изучено влияние электрических полей характеризуемых малыми электрическими потенциалами на процесс релаксации напряжений алюминия при начальных напряжениях в условиях деформации сжатия равных $0{,}89\sigma_т$; $\sigma_т$; $1{,}54\sigma_т$, где $\sigma_т$ – предел текучести материала. В качестве материала исследований был выбран технически чистый алюминий марки А85, который подвергался отжигу при температуре 773 К в течении 2 часов. Скорость траверсы составляла 0,5 мм/мин, что соответствует скорости нагружения $5{,}6 \cdot 10^{-4}$ $с^{-1}$ (при высоте образца 15 мм). После достижения определенного уровня напряжений, нагружение прекращалось, и далее регистрировался спад усилия. Подведение электрического поля осуществлялось от стабилизированного источника питания. Чтобы исключить протекание заряда через образец, он изолировался от элементов испытательной машины. Величина предела текучести, определенная из опытов на активную деформацию сжатия, составила 36,8 МПа. В процессе исследования анализировались изменения средней скорости релаксации и активационного объема. Установлено, что изменение электрического потенциала поверхности материала приводит к увеличению средней скорости релаксации напряжений и уменьшению активационного объема при начальном напряжении $0{,}89\sigma_т$ и $1{,}54\sigma_т$. При начальном напряжении равном пределу текучести влияние электрического поля неоднозначно. Если значение электрического потенциала равно 0,5 В, то наблюдается снижение скорости релаксации напряжений, тогда как при φ = 1 В. Значение активационного объема при потенциале 0,5 В возрастает, а затем наблюдается его снижение. Однако в пределах доверительного интервала по γ можно заключить, что потенциал 0,5 В практически не оказывает влияния на процесс релаксации, а потенциал 1 В наоборот снижает активационный объем в 1,6 раза. Расчет плотности дислокаций и частоты колебаний дислокационного сегмента показал, что при φ = 0,5 В они увеличивается незначительно, тогда как при потенциале 1 В плотность дислокаций и частота колебаний дислокационного сегмента увеличивается в 2,6 и в 1,6 раза соответственно.

Из вышеизложенного можно сделать вывод, что при начальном напряжении равным пределу текучести материала значение потенциала 0,5 В является пороговым значением, после которого влияние электрического поля становится заметным.

Благодарности.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 20-19-00452

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.035

ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ Al-Si-Cu-Fe

Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г., Иванов К.А.
Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, ojv76@mail.ru

В настоящее время достоверно установлено, что на процесс упрочнения стареющих закаленных сплавов существенным образом влияют внешние воздействия – пластическая деформация, статическое и динамическое давление, ультразвуковое воздействие, корпускулярное облучение, малые добавки примесей и т.д. В последние годы наблюдается повышенный интерес к изучению влияния слабых магнитных полей на характеристики и физико-механические свойства различных материалов. Слабые магнитные поля могут влиять на микро- и макроскопические свойства различных диамагнитных материалов, данный эффект получил название магнитопластического эффекта (МПЭ). Под действием магнитных полей изменяются микротвердость, внутреннее трение, предел прочности и другие макроскопические свойства [1–3] в ионных кристаллах, полупроводниках, металлах, молекулярных кристаллах, полимерах и т.д.

Целью данной работы является экспериментальное исследование влияния напряженности постоянного магнитного поля (ПМП) на параметры магнитопластического эффекта и фазообразование при старении алюминиевого сплава Al-Si-Cu-Fe.

Образцы из алюминиевого сплава Al-Si-Cu-Fe после выдержки 2 ч и последующей закалки от 535 °С в воду отжигали при температуре 175 °С длительностью 4 ч в ПМП напряженностью от 1 до 7 кЭ.

Анализ полученных экспериментальных данных позволил сделать следующие выводы:

– установлен так называемый положительный МПЭ [1], приводящий к уменьшению микротвердости до 25 %, при этом пластические свойства сплава возрастают;

– рентгенофазовый анализ показал, что отжиг 4 ч без наложения ПМП приводит к уменьшению интенсивности всех наблюдаемых линий и к увеличению их полуширины, что свидетельствует об искаженности решетки, связанной с процессами старения и перестройкой структуры;

– наложение ПМП напряженностью от 1 до 7 кЭ на старение алюминиевого сплава АК9 приводит к увеличению интенсивности всех наблюдаемых линий и уменьшению их полуширины, что обусловлено формированием более совершенной и однородной структуры сплава.

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В. и др. Магнитопластический эффект: основные свойства и физические механизмы // Кристаллография. – 2003. – Т. 48. – С. 838.

2. Головин Ю.И. Магнитопластичность твердых тел // ФТТ. – 2004. – Т. 46. – № 5.– С. 769 – 803.

3. Моргунов Р.Б. Спиновая микромеханика в физике пластичности // УФН. – 2004. – Т. 174. – №2. – С. 131.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.036

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕХАНИЗМ ДЕФОРМАЦИОННОГО СТАРЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКИМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ РЕЛЬЕФОМ: ОЦК МЕТАЛЛЫ, ПОЛУПРОВОДНИКИ И ДРУГИЕ

Петухов Б. В.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 119333, г. Москва, Россия
E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

Развивается модель динамического взаимодействия дислокаций с примесной подсистемой кристаллов с высоким потенциальным рельефом кристаллической решетки (барьерами Пайерлса). Показано, что модификация примесных миграционных барьеров вблизи дислокационного ядра существенно влияет на сегрегацию примесей на движущейся дислокации. Обосновывается наличие существенно неравновесной начальной стадии кинетики сегрегации, приводящей к ряду аномалий дислокационной динамики и предела текучести материала в некотором температурном интервале.

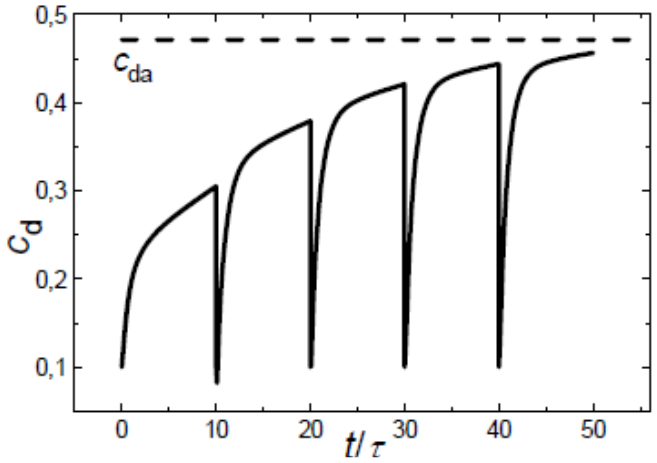


Рисунок 1. Эволюция примесного содержания c_d на первоначально свежей дислокации в ходе последовательных переходов на период решетки. Штриховая линия показывает стационарное амплитудное значение c_{da}, устанавливающееся при $t \to \infty$ (τ – время миграции примесных атомов вблизи дислокационного ядра).

Построенная теория динамического взаимодействия дислокаций с примесной подсистемой кристалла учитывает обратное влияние примесей, увлекаемых движущимися дислокациями, на динамику самих дислокаций. Следствиями самосогласованного характера процесса являются возникновение неустойчивостей движения дислокаций в определенном интервале скоростей и иммобилизация дислокаций при напряжениях ниже некоторого порога. Это позволяет последовательно объяснить наличие наблюдаемой экспериментально иммобилизации дислокаций в полупроводниковых кристаллах, не выходя за рамки принятого для этих материалов кинкового механизма дислокационной динамики.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.037

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕДНОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ CU-MG ПОСЛЕ ВОЛОЧЕНИЯ

Пилипенко А.Г.[1], Луговская А.С[1], Морозова А.И.[1,2]

[1]НИУ «БелГУ», г. Белгород, Россия
[2]НИТУ «МИСиС», г. Москва, Россия
morozova_ai@bsu.edu.ru

На данный момент одними из самых перспективных электротехнических сплавов являются медные сплавы системы Cu-Mg [1]. Интерес к сплавам данной группы вызван высокими значениями проводимости при микролегировании в сочетании с высокой прочностью после нагартовки.

В данной работе исследовали медный сплав Cu-0,25%Mg (масс.%). Исходные образцы подверглись ковке при 800 °С и прокатке при 450°С (исходное состояние). Было осуществлено волочение при комнатной температуре до истинной деформации 5,3. Механические свойства определяли испытанием на статическое растяжение с использованием установки Instron 5882 с начальной скоростью деформации 2×10^{-3}см$^{-1}$.

Предел текучести резко возрастает после проведения волочения со степенью деформации 1,3 с 375 МПа до 525 МПа и продолжает постепенно увеличиваться при дальнейшем волочении (таблица 1). Максимальный предел текучести составил 600 МПа при истинной деформации 5,3. На протяжении всего волочения наблюдали постепенный рост предела прочности, максимальное значение которого составило 680 МПа. В процессе волочения наблюдали резкое снижение пластичности до 7,4% после истинной деформации 1,3. Минимальное значение пластичности было достигнуто после волочения 5,3 и составило 2,6%.

Таблица 1. Механические свойства медного сплава Cu-0,25%Mg после волочения

Состояние	Степень деформации	Предел текучести, МПа	Предел прочности, МПа	Относительное удлинение, %
Исходное	0	375	425	22,9
Волочение	1,3	525	555	7,4
	2,2	545	560	7,1
	3	570	610	7
	3,9	595	670	6,6
	5,3	600	680	2,6

Исследования показали, что проведение пластической деформации волочением способствует увеличению прочностных характеристик до 680 МПа с резким снижением пластичности, которая составила менее 3%.

IOP Conference Series: materials science and engineering. – 2021. – Volume 1014 012030.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.038

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОКРЫТИЯ AG-NI-N, СФОРМИРОВАННОГО НА МЕДИ КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ, СОЧЕТАЮЩИМ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОЕ НАПЫЛЕНИЕ, ОБЛУЧЕНИЕ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ И АЗОТИРОВАНИЕ

[1]Почетуха В.В., [1]Романов Д.А., [1]Громов В.Е., [2]Иванов Ю.Ф.

[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия, v.pochetuha@mail.ru
[2]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия, yufi55@mail.ru

Электрические контакты выключателей электрических сетей независимо от того, что они эксплуатируются с момента демонстрации Т.А. Эдисоном в 1879 г., остаются актуальным объектом фундаментальных и прикладных исследований. Основной технологией промышленного производства контактов переключателей мощных электрических сетей до сих пор остается метод порошковой металлургии. Такие электрические контакты обладают однородной и воспроизводимой структурой во всем объеме изделий. Однако совершенствование этой технологии не может обеспечить низкую пористость готовых изделий, что снижает электропроводность.

Другим методом получения объемных материалов дугостойких электрических контактов является метод электронно-лучевого испарения и последующей вакуумной конденсации. Электрические контакты, полученные этим методом, неоднородны по структуре. Например, для системы W–Cu эта неоднородность проявляется в периодическом чередовании слоев вольфрама и меди переменной толщины. Получение же покрытий, обеспечивающих высокую дугостойкость электрических контактов, в промышленном масштабе в настоящее время до сих пор не реализовано. Это связано с трудностями формирования композитной структуры покрытий и достижения их высокой адгезии.

Комбинированные технологии, сочетающие различные методы воздействия на структуру и свойства материала, в настоящее время являются одним из интенсивно развивающихся направлений модификации металлов и сплавов. В работе выполнено исследование структуры и свойств покрытия состава Ag-Ni-N, сформированного на меди комбинированным методом, сочетающим электровзрывное напыление, облучение импульсным электронным пучком и последующее азотирование в плазме газового разряда низкого давления. Показано, что износостойкость покрытия толщиной до 80 мкм превышает износостойкость меди на 13 %; коэффициент трения покрытия на 3,5 % ниже коэффициента трения меди; твердость покрытия превышает твердость меди на 13 %. Установлено, что основным элементом покрытия является серебро, в значительно меньшем количестве присутствуют никель и медь. Между покрытием и подложкой выявлен переходный слой толщиной до 8 мкм, обогащенный атомами никеля. Показано, что покрытие сформировано твердыми растворами на основе меди, никеля и серебра, а также содержит нитриды никеля серебра и меди. Выявлено, что фазовый состав покрытия существенным образом зависит от плотности энергии пучка электронов (при постоянных значениях длительности и количества импульсов воздействия пучка). Установлено, что покрытие имеет субмикро-нанокристаллическую структуру. Размеры кристаллитов, формирующих покрытие, изменяются в пределах от 50 нм до единиц микрометров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-486.2020.8 и кандидатов наук МК-5585.2021.4, а также при финансовой поддержке РФФИ в

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.039

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОКОМПОЗИТА «YSZ-КЕРАМИКА/ГРАФЕН» С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Рожков М.А., Смирнов А.М., Колесникова А.Л., М.Ю. Гуткин

Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург, Россия,
MARozhkov@corp.ifmo.ru

Функциональная нанокерамика широко используется в различных отраслях промышленности, например, в энергетике. В частности, новый керамический нанокомпозит на основе стабилизированного иттрием оксида циркония (YSZ) с наполнителем в виде слоев графена является перспективным материалом, обладающим как ионной (кислородной) проводимостью, присущей керамике YSZ, так и электронной проводимостью за счет образования кластеров графена в межзеренном пространстве [1, 2]. Такой материал может служить основой для создания эффективного насоса молекулярного кислорода с возможным применением в энергетике, двигателестроении, технологиях тонкого химического синтеза и в разработке нового медицинского оборудования. В то же время стремление достичь лучших функциональных свойств часто приводит к деградации механических характеристик изготовленных образцов [3]. Целенаправленный поиск путей улучшения функциональных свойств нанокерамики и керамических нанокомпозитов без ущерба для их механических характеристик требует разработки теоретических моделей, описывающих механизмы прочности и пластичности таких материалов.

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования механического поведения нанокомпозитов «YSZ-керамика / графен» методом молекулярной динамики. Расчетная модель представляла собой кристалл YSZ с деформируемым включением графена. Взаимодействие графена с керамикой YSZ описывалось различными потенциалами межатомных взаимодействий. Для описания взаимодействия между атомами иттрия, циркония и кислорода использовался потенциал Букингема, между атомами углерода – потенциал ReaxFF, между атомами керамики и углерода – потенциал Леннарда-Джонса. На основе результатов моделирования этих объектов с помощью программного пакета LAMMPS рассмотрены эволюция структуры и механическое поведение отдельного графенового нановключения, а также возможность переноса этих данных на поведение реальных нанокомпозитов.

Благодарности.
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-19-00255).

Comins J.D., Ngoepe P.E., Catlow C.R.A. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. – 1990. – Vol. 86. – P. 1183.
Shackelford J.F., Doremus R.H. Ceramic and glass materials: structure, properties and processing. New York: Springer, 2008.
Ovid'ko I.A. // Philos. Trans. Roy. Soc. A – 2015. – Vol. 373. – Art. 20140129.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.040

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПОКРЫТИЯ SNO_2-IN_2O_3-AG-N, СФОРМИРОВАННОГО НА МЕДИ КОМПЛЕКСНЫМ МЕТОДОМ

[1]Романов Д.А., [1]Почетуха В.В., [1]Громов В.Е., [2]Иванов Ю.Ф.

[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия, romanov_da@physics.sibsiu.ru
[2]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия, yufi55@mail.ru

Цель работы – анализ структуры и свойства покрытия состава SnO_2-In_2O_3-Ag-N, сформированного на меди комплексным методом, сочетающим электровзрывное напыление, облучение импульсным электронным пучком и последующее азотирование в плазме газового разряда низкого давления.

После формирования покрытия образцы облучали импульсным электронным пучком (17 кэВ, 20 Дж/см^2, 200 мкс, 5 имп., 0,3 с$^{-1}$) и подвергали азотированию в плазме газового разряда низкого давления на установке «КОМПЛЕКС». Режим азотирования: 520 °С, 5 часов.

Исследование дефектной субструктуры и элементного состава покрытия осуществляли методами сканирующей электронной микроскопии. Исследование фазового состава и структурных параметров проводилось на дифрактометре XRD-6000 в CuKα-излучении. Анализ фазового состава проводили с использованием баз данных PDF 4+, а также программы полнопрофильного анализа POWDER CELL 2.4. Твердость покрытия измеряли с помощью ультрамикротестера Shimadzu DUH-211 (Pn = 30 мН). Трибологические свойства покрытия изучали на трибометре Pin on Disc and Oscillating TRIBOtester («TRIBOtechnic», Франция) в условиях сухого трения.

В результате трибологических испытаний обнаружено, что износостойкость медного образца с покрытием состава SnO_2-In_2O_3-Ag-N составляет 3,4•10^{-5} мм^3/Н•м и превышает износостойкость меди без покрытия (9,6•10^{-5} мм^3/Н•м) в 2,8 раза. Коэффициент трения образцов с покрытием (μ = 0,479) меньше коэффициента трения меди без покрытия (μ = 0,679) в 1,4 раза. Выявлен различный характер изменения коэффициента трения при трибологических испытаниях. Образец с покрытием характеризуется более длительной стадией приработки по сравнению с образцом без покрытия.

Твердость покрытия измеряли на поперечном шлифе вдоль трех дорожек, проходящих перпендикулярно поверхности покрытия, что позволяло определить среднюю твердость покрытия и выявить зависимость твердости исследуемого материала от расстояния от поверхности покрытия. Твердость покрытия достигает максимального значения, превышающего твердость подложки на 10 %.

Показано, что толщина покрытия ≈ 100 мкм. Износостойкость медного образца с нанесенным покрытием превышает износостойкость меди без покрытия в ≈ 2,8 раза. Коэффициент трения образцов с покрытием (μ = 0,479) меньше коэффициента трения меди без покрытия (μ = 0,679) в ≈1,4 раза. Установлено, что твердость покрытия увеличивается по мере приближения к подложке и достигает максимального значения ≈1400 МПа (твердость подложки 1270 МПа). Методами микрорентгеноспектрального анализа установлено, что основным химическим элементом покрытия является серебро, в значительно меньшем количестве присутствуют медь, олово, индий, кислород и азот. Основными фазами покрытия являются твердые растворы на основе меди и серебра.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-00141).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.041

ВЛИЯНИЕ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА НА РАСТЯЖЕНИЕ СИЛУМИНА МАРКИ АК5М2

Загуляев Д.В.[1], Иванов Ю.Ф.[2], Клопотов А.А.[2], Устинов А.М.[2], Рубанникова Ю.А.[1], Якупов Д.Ф.[1]

[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия, rubannikova96@mail.ru*
[2]*Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия*

Целью работы является анализ воздействия импульсного электронного пучка на структуру и разрушение силумина.
В качестве материала исследования использован силумин марки АК5М2, следующего химического состава (по ГОСТ 1583 – 93): Fe – до 1,3%; Si – 4,0-6,0%; Mn – 0,2-0,8%; Ni – до 0,5%; Ti – 0,05-0,2%; Al – 85,9-94,05%; Cu – 1,5-3,5%; Mg – 0,2-0,8%; Zn – до 1,5%; примесей – до 2,8%.
Воздействие импульсным электронным пучком с параметрами: 17 кэВ, 50 Дж/см^2, 50 мкс, 3 имп. на силумин приводит к плавлению поверхностного слоя толщиной до 90 мкм. Высокоскоростная кристаллизация расплавленного слоя приводит к формированию структуры ячеистой кристаллизации с субмикронными размерами ячеек. Ячейки, сформированные твердым раствором на основе алюминия, разделены тонкими прослойками. Основной фазой прослоек является кремний, имеющий округлую форму и размеры (10-20) нм.
Механические испытания силумина осуществляли путем одноосного растяжения образцов на испытательной машине «INSTRON 3386» с постоянной скоростью 1,25 мм/мин.
В результате испытаний установлено, что образец силумина АК5М2 испытывает хрупкое разрушение. Анализ деформационной кривой позволяет установить, что предел прочности на разрыв равен 136 МПа, предел текучести – 27,97, а относительное остаточное удлинение при разрыве составляет 2,9%. Воздействие на образец импульсным электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 50 Дж/см^2 и при длительности импульса 50 мкс приводит к изменению прочностных характеристик сплава. Предел прочности на разрыв увеличивается на 12,5% и равен 153 МПа. При анализе предела текучести учитывается конечная площадь поперечного сечения образца и сила, соответствующая пределу текучести материала, расчеты показали, что предел текучести образца силумина после электронно-пучковой обработки составляет 38,87 МПа, относительное остаточное удлинение на разрыв – 3,6%.
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-10059).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.042

ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОЕ НАПЫЛЕНИЕ МОЛИБДЕНОВЫХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ

Соснин К. В., Романов Д. А., Проинин С. Ю., Филяков А. Д.

[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,*
k.sosnin@mail.ru

В настоящем материале сообщается об изучении фазового состава электровзрывных покрытий на основе молибдена и титана для медицинских применений. Покрытия были получены экологически безопасным и перспективным методом электровзрывного напыления. Примененная обработка позволяет добиться точного регулирования фазового состава. Полученные результаты исследования фазового состава приведены в таблице 1. Детализация используемой установки, режимов формирования покрытий и марки имплантатов в настоящее время не приведены для обеспечения патентной чистоты.

Таблица 1. Фазовый состав покрытий на основе молибдена и титана

Номер режима обработки	Фазовый состав, масс. %	
	Mo	Ti
1	5	95
2	10	90
3	15	85
4	20	80
5	25	75
6	30	70
7	35	65
8	40	60
9	45	55

Приведем фотографии поверхности электровзрывных покрытий (рис. 1).

а б в

Рис. 1. Внешний вид поверхности молибденовых покрытий, полученных в режимах электровзрывного напыления 1 (а), 5 (б) и 8 (в)

Анализ таблицы 1 показал, что примененная обработка позволяет точно регулировать фазовый состав. В будущем это позволит использовать предлагаемый метод напыления покрытий для коммерческого использования в имплантатах различной конструкции.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-486.2020.8 и кандидатов наук МК-5585.2021.4, а также при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-00044.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.043

EFFECT OF HIGH PRESSURES ON CONDUCTIVITY AND THE SPIN BLOCKADE AT "INSULATOR-METAL" PHASE TRANSINION IN $GdBaCo_2O_{5.5}$

Tarasenko T.N.[1], Sivachenko T.S.[1], Reshidova I.Yu.[1], Burkhovetskii V.V.[1], Mazur A.S.[2]

[1]*Public Institution "Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin", Donetsk, DPR,* t.n.tarasenko@mail.ru

[2]*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

The interest to the study of oxygen-deficient rare earth cobaltites $RBaCo_2O_{5+\delta}$ (here R – lanthanides or yttrium, $0 \leq \delta \leq 1$) initially appeared as to a new class of the compounds undergoing a giant magnetoresistive effect. Perspectives of using the double layered cobaltites as high-temperature fuel cell electrodes define the high relevance of complex study of their physical and, in particular, the electrical transport properties. $GdBaCo_2O_{5.5}$ can be regarded as a typical representative of the ordered oxygen-deficit cobaltites $RBaCo_2O_{5.5}$. The reason for the insulator-metal (I-M) transition in $RBaCo_2O_5$ is known: the transition of Co^{3+} ions from the low-spin (LS) to the high-spin (HS) state.

The aim of this work is to study the effect of high pressures on the first-order insulator-metal (I-M) phase transition in double layered cobaltite $GdBaCo_2O_{5.5}$. Polycrystalline samples of $GdBaCo_2O_{5.5}$ were synthesized by the conventional technology of solid state reactions in air. The sharp X-ray diffraction peaks corresponding to the orthorhombic Pmmm-group, showed good crystallization. No secondary phases are detected. Microstructural studies of the morphology of the fracture surface of the $GdBaCo_2O_{5.5}$ samples revealed that crystallites, often with well-pronounced faceting, have an average size about ~ 5 μm. In polycrystalline samples of double layered cobaltite $GdBaCo_2O_{5.5}$ the resistivity temperature dependence in the vicinity of the point the first order (I-M) phase transition was studied at normal and high pressures. The strong dependence of the shape of the temperature hysteresis loop on the rate of temperature change indicates an infra-slow thermal relaxation of conductivity with characteristic times 10^4 sec [1,2]. The asymmetry of the hysteresis loop expansion is related with the blocking of M phase nuclei. The spin blockade mechanism [3], which describes the transition from hopping conductivity at $T < T_{IM}$ to the band conductivity at $T > T_{IM}$, is used to explain of complicated kinetics of first-order I↔M transition [2]. The study of the effect of high pressure up to 1.6 GPa on the I-M transition was carried out under hydrostatic conditions. The resistivity $\rho(T)$ measurements were performed in the process of increasing the temperature in the range 300-420 K at a low rate of 0.5 K/min and holding between cycles of 24 h. It was found that compression causes a decrease in resistance for the semiconductor and metallic phases. Baric studies have shown an increase in the transition temperature T_{IM} at increasing pressure P with baric coefficient $dT_{IM}/dP \approx 10$ K/GPa. The spin blockade model [3] is used to explain the observed effects: pressure restrains the growth of the oxygen octahedron volume, which means that the transition of Co^{3+} ions from the LS- to the HS-state is blocked and the region of the dielectric phase metastability expands. This leads to a shift in the temperature of the loss of stability of the dielectric phase towards higher temperatures, which is observed experimentally.

Thus, the hydrostatic pressure, preventing the expansion of the lattice during the spin transition, promotes the spin blockade and blocking of the M phase nuclei during the first-order I-M phase transition.

1. Дорошев В.Д. и др. *ФТВД*. 2005. Т. 15, № 2, С. 21–32.
2. Тарасенко Т.Н. *Изв. РАН. Сер. физ.* 2016. Т. 80, № 11, С. 1513–1515.
3. Maignan A. et al. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93, № 2, P. 026401.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.044

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ СТРУКТУРЫ НОВЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ $Fe(bdmimpy)_2^{2+}$ ПРИ СПИНОВОМ ПЕРЕХОДЕ МЕТОДОМ EXAFS СПЕКТРОСКОПИИ

Трубина С.В.[1],, Иванова А.Д.[1], Лавренова Л.Г.[1], Коротаев Е.В.[1], Кривенцов В.В.[2]

[1] *Россия, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН*
svt@niic.nsc.ru
[2]*Россия, Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН*

Спин-кроссовер (**СКО**, спиновый переход) может проявляться в координационных соединениях металлов с электронной конфигурацией $3d^4$–$3d^7$ в октаэдрическом или псевдооктаэдрическом окружении лигандов определенной силы поля. Изменение спиновой мультиплетности происходит под влиянием изменения внешних условий: температуры, давления, облучения светом определенной длины волны и других факторов. К одному из классов соединений, в которых наблюдается спин-кроссовер, принадлежат комплексы железа(II) с полиазотсодержащими гетероциклическими лигандами, имеющие октаэдрическое строение координационного полиэдра, узел FeN6. В ряде таких соединений наблюдается термоиндуцированный СКО.

Использование EXAFS-спектроскопии для изучения локального окружения атомов железа вызвана плохой кристаллизуемостью данного типа соединений. Измерения EXAFS и XANES спектров в районе *K*-краев поглощения Fe проведены с использование СИ накопителя ВЭПП-3 Института ядерной физики СО РАН (ИЯФ СО РАН, Новосибирск). Спектры регистрировались в режиме на просвет образца при температурах выше (475°K) и ниже (300°K) температуры спинового перехода. Обработка экспериментальных данных проводилась с использованием программных пакетов VIPER и DLV EXCURV (Рис. 1).

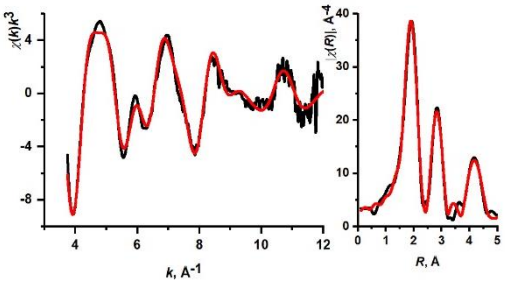


Рис. 1. Сравнение экспериментального (черная линия) и модельного (красная линия) спектров – слева и функций радиального распределения – справа для соединения **$Fe(bdmimpy)_2(NO_3)_2$**. Измерения выполнены: при комнатной температуре.

Результаты исследований методом EXAFS соединений **$Fe(bdmimpy)_2^{2+}$** показывают, что данные комплексы имеют октаэдрическое строение координационного полиэдра. Два лиганда координируются к иону железа(II) тридентатно циклическим способом двумя атомами азота имидазольных циклов и атомом азота пиридина в образованием координационного узла FeN_6 (Рис. 2),

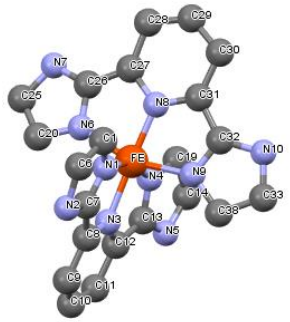


Рис. 2. Общий вид структуры кластера, полученный в процессе моделирования спектров EXAFS комплекса **$Fe(bdmimpy)_2(R)$,** где R – анионная группа

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 20-63-46026

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.045

МОДЕЛИ ПРЯМОЙ И ОБРАТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ХОЛЛА-ПЕТЧА В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КЕРАМИКАХ

Шейнерман А.Г., Гуткин М.Ю.
Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия
asheinerman@gmail.com

Предложены две модели, описывающие как прямую, так и обратную зависимости Холла-Петча, наблюдаемые в нанокристаллических керамиках. Первая модель описывает экспериментально наблюдаемый случай, когда твердость керамики зависит от скорости нагружения. В рамках этой модели пластическая деформация в нанокристаллических керамиках (НКК) реализуется через скольжение решеточных дислокаций в сочетании с термически активированным межзеренным скольжением. Модель демонстрирует, что управляющим параметром, определяющим тип зависимости Холла-Петча (прямая или обратная), является энергия активации межзеренного скольжения. Предполагается, что на эту величину может влиять температурный режим синтеза НКК, что объясняет противоречивые данные, представленные в литературе, относительно существования обратной Холла-Петча в таких материалах.

Вторая модель описывает другую наблюдаемую ситуацию, когда твердость НКК существенно не зависит от скорости нагружения. В рамках второй модели пластическая деформация в НКК осуществляется за счет испускания решеточных и зернограничных дислокаций со ступенек и тройных стыков границ зерен (ГЗ). Модель предполагает, что в начале пластической деформации приложенная нагрузка линейно связана с пластической деформацией и что каждая ступенька ГЗ или тройной стык ГЗ может испускать дислокацию не более одного раза. Модель предсказывает, что переход от прямой к обратной зависимости Холла-Петча связан с увеличением плотности тройных стыков по мере уменьшения размера зерна. Показано, что критический размер зерна для этого перехода зависит от доли тройных стыков, которые могут испускать решеточную или зернограничную дислокацию при заданном напряжении. В свою очередь, интенсивность испускания зернограничных дислокаций из тройных стыков может зависеть от структуры и энергии ГЗ, а также их химического состава. Модель объясняет экспериментальные наблюдения прямых зависимостей Холла-Петча вплоть до очень малых размеров зерен, предполагая, что критический размер зерна для перехода от прямой к обратной зависимости Холла-Петча для материалов, синтезированных в этих экспериментах, меньше минимального размера зерен изготовленных образцов.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.046

REVEALING HYDROGEN STATES IN CARBON STRUCTURES BY ANALYSING THE THERMAL DESORPTION SPECTRA

Nechaev Yu.S.[a,*], Denisov E.A.[b], Alexandrova N.M.[a], Shurygina N.A.[a], Cheretaeva A.O.[c], Kostikova E.K.[d], Öchsner A.[e]

[a]G.V. Kurdjumov Centre of Metals Science and Physics, I.P. Bardin Research Institute for Ferrous Metallurgy, Moscow, Russia, yuri1939@inbox.ru
[b]St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia
[c]Research Institute of Progressive Technologies, Togliatti State University, Togliatti, Russia
[d]Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre of the RAS, Petrozavodsk, Russia
[e]Esslingen University of Applied Sciences, Faculty of Mechanical Engineering, Esslingen, Germany

The efficient methodology of [1-5] of the detailed analysis of thermal desorption spectra (TDS) of hydrogen in micro- and nanoscale carbon structures has been applied for a number of TDS data of one single heating rate, in particular, for graphite materials subjected to irradiation with atomic hydrogen [6-10].

The technique is not less informative, but much less time-consuming in experimental terms compared to the generally accepted Kissinger method, which demands the use of several heating rates, and has strict limits of applicability [4, 5].

The methodology is based on an approximation by Gaussian peaks of the hydrogen TDS and the corresponding processing of the Gaussians, in the approximation of the first-order and the second-order reactions. It results in determining the activation energies and pre-exponential factors of the rate constants of the desorption processes.

The methodology contains several successive steps of its implementation, including the use of several plausibility checks and some verification of the results, with the help of numerical modeling methods, which are described in [4, 5]. This allows one to reveal the physics of the desorption processes through thermodynamical analysis of the obtained peak characteristics and comparison with other related independent data.

The main purpose of the present study is to further reveal the weakly studied characteristics and physics of different states of hydrogen in microscale graphite structures after irradiation with atomic hydrogen, and comparing with the related results for nanoscale carbon structures. It is important for understanding the hydrogen behavior and attitude in a number of cases of energy carbon-based materials and nanomaterials.

This work was financially supported by the RFBR (Project # 18-29-19149 mk).

1. Nechaev Yu.S. // Physics-Uspekhi. – 2006. – V. 49. – P. 563-591.
2. Nechaev Yu.S., Veziroglu T.N. // Int. J. Phys. Sci. – 2015. – V. 10. – P. 54-89.
3. Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Shurygina N.A., Cheretaeva A.O. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2020. – V. 28. – P. 233-237.
4. Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Cheretaeva A.O., Kuznetsov V.L., Oechsner A., Kostikova E.K., Zaika Yu.V. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2020. – V. 45. – P. 25030-25042.
5. Zaika Yu.V., Kostikova E.K., Nechaev Yu.S. // Techn. Phys. – 2021. – V. 91. – P. 210-220.
6. Denisov E.A., Kompaniets T.N. // Techn. Phys. – 2001. – V. 46. – P. 240-245.
7. Zecho T., Guttler A., Sha X., Jackson B., Kuppers J. // J. Chem. Phys. – 2002. – V. 117. – 8486.
8. Zecho T., Guttler A., Kuppers J. // Carbon. – 2004. – V. 42 – 609.
9. Hornekaer L., Šljivančanin Ž., Xu W., Otero R., Rauls E., Stensgaard I., Lægsgaard E., Hammer B., Besenbacher F. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 96 – 156104.
10. Hornekær L., Rauls E., Xu W., Sljivancanin Z., Otero R, Stensgaard I., Lægsgaard E., Hammer B., Besenbacher F. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 97. – P. 1-4.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.047

ON THE "SUPER" STORAGE OF HYDROGEN IN THE KNOW-HOW ACTIVATED GRAPHITE NANOFIBERS

Nechaev Yu.S.[a,*], Denisov E.A.[b], Alexandrova N.M.[a], Shurygina N.A.[a], Cheretaeva A.O.[c], Kostikova E.K.[d], Öchsner A.[e]

[a] *Kurdjumov Centre of Metals Science and Physics, Bardin Research Institute for Ferrous Metallurgy, Moscow, Russia,* yuri1939@inbox.ru
[b]*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*
[c]*Research Institute of Progressive Technologies, Togliatti State University, Togliatti, Russia*
[d]*Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre of the RAS, Petrozavodsk, Russia*
[e]*Esslingen University of Applied Sciences, Faculty of Mechanical Engineering, Esslingen, Germany*

In this work, an effective methodology [1–5] was applied to analyze the well-known (but not reproduced by anyone) data [6–10] on the "super" sorption of hydrogen in the know-how activated graphite nanofibers (GNF). Such processing of the thermal desorption and thermogravimetric data [6, 9] made it possible for the first time to determine (by two independent methods) the characteristics of the main hydrogen desorption peak, namely: the temperature of the highest desorption rate T_{max} = 914 K, the activation energy of desorption Q = 39 ± 3 kJ/mol(H_2), the frequency factor of the rate constant of the desorption process $K_0 \approx 0.15$ s^{-1}, the amount of released hydrogen ~ 7 wt%. These results are in satisfactory agreement with the results of the analysis of the data [10]. At the same time, it should be noted that a large number of attempts to reproduce experimental data [6-10], for example, work [11], have not been crowned with success. The know-how technology of GNV activation in works [6-10] can be disclosed by analyzing experimental data [6-10], especially electron microscopic data in Fig. 5 in [10] (analyzed in [1-3]). The role and atomic mechanism of the spillover effect in the "super" sorption are considered in [3]. Some specific factors and aspects associated with anomalous results [6–10] are considered in reviews [12–14].

The work was financially supported by the RFBR (Project # 18-29-19149mk).

1. Nechaev Yu.S. // Physics-Uspekhi. – 2006. – V. 49. – P. 563-591.
2. Nechaev Yu.S., Veziroglu T.N. // Int. J. Phys. Sci. – 2015. – V. 10. – P. 54-89.
3. Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Shurygina N.A., Cheretaeva A.O. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2020. – V. 28. – P. 233-237.
4. Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Cheretaeva A.O., Kuznetsov V.L., Oechsner A., Kostikova E.K., Zaika Yu.V. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2020. – V. 45. – P. 25030-25042.
5. Zaika Yu.V., Kostikova E.K., Nechaev Yu.S. // Techn. Phys. – 2021. – V. 91. – P. 210-231.
6. Park C., Anderson P.E., Chambers A., Tan C.D., Hidalgo R., Rodriguez N.M. // J. Phys. Chem. B. – 1999. – V. 103. – P. 10572-10581.
7. Rodriguez N.M., Baker R.T.K. // United States patent US 5653951. – 1997.
8. Rodriguez N.M., Baker R.T.K. // United States patent US 6159538. – 2000.
9. Baker R.T.K. // Encyclopedia of Materials: Science and Technology. Elsevier. – 2005. – P. 932-5.
10. Gupta B.K., Tiwari R.S., Srivastava O.N. // J. Alloys Comp. – 2004. – V. 381. – P. 301-308.
11. Rzepka M., Bauer E., Reichenauer G., Schliermann T., Bernhardt B., Bohmhammel K., Henneberg E., Knoll U., Maneck H.-E., Braue W. // J. Phys. Chem. B. – 2005. – V. 109. – P. 14979-14989.
12. Maeland A.J. // Int. Sc. J. for Alternative Energy and Ecology. – 2002. – # 1. – P. 19-29.
13. Nechaev Yu.S., Yurum A., Tekin A., Yavuz N.K., Yurum Yu., Veziroglu T.N. // Amer. J. Analyt. Chem. – 2014. – V. 5. – P. 1151-1165.
14. Nechaev Yu.S., Makotchenko V.G., Shavelkina M.B., Nechaev M.Yu., Veziroglu A., Veziroglu T.N. // Open J. Energy Efficiency. – 2017. – V. 6. – P. 73-79.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.348

НОВЫЙ ПОДХОД К УВЕЛИЧЕНИЮ ПЛАСТИЧНОСТИ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Орлова Т.С.[1], Садыков Д.И.[2], Мурашкин М.Ю.[3], Еникеев Н.А.[3]

[1]*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия,*
orlova.t@mail.ioffe.ru
[2]*Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Уфимский государственный авиационный технический университет, Институт физики перспективных материалов, Уфа, Россия*

Структурирование металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформации приводит к значительному упрочнению за счет формирования ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры. Однако УМЗ материалы часто демонстрируют низкую пластичность, что ограничивает их практическое применение. В настоящей работе предложен новый подход – дополнительная термомеханическая обработка для значительного увеличения пластичности при сохранении высокого уровня прочности и электропроводности для УМЗ проводниковых сплавов Al-Mg-Zr и Al-Cu-Zr, предварительно структурированных методом интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК). Показано, что ИПДК и последующий кратковременный отжиг (125-150 ^{o}C) приводят к комбинации высокой прочности и хорошей электропроводности: σ_{UTS} ~400 MPa и ω~53 %IACS для Al-Mg-Zr и σ_{UTS} ~485 MPa и ω~48.3 %IACS для Al-Cu-Zr, однако пластичность падает до <1-1.5% . Небольшая дополнительная ИПДК на 0.25 оборота при КТ привела к значительному увеличению пластичности (δ~11 %) в сплаве Al-Cu-Zr при сохранении высокого уровня прочности σ_{UTS} ~465 MPa и ω~47.2 %IACS. Однако, обработка ‘отжиг и дополнительная деформация (ДД)’ не обеспечили реализацию эффекта пластификации (ЭП) для УМЗ сплава Al-Mg-Zr. В этом случае эффективным оказался динамический отжиг. Дополнительная ИПДК при 150 ^{o}C и последующая ИПДК на 0.25 оборота при КТ обеспечили сочетание высокой прочности σ_{UTS}~370 MPa и пластичности ~15% при высокой электропроводности 52.5 %IACS. Ранее ЭП наблюдался нами для УМЗ Al [1] и для УМЗ сплава Al-1.5Cu [2]. Подобно СР Al [3], ЭП в сплавах может быть связан с внесением дополнительных решеточных дислокаций в релаксированную при отжиге (традиционном статическом или динамическом) структуру ГЗ и облегчением процесса испускания из них большого количества дислокаций. Микроструктурные исследования подтвердили, что в результате ДД после отжига (статического или динамического) размер зерна практически не изменяется, а происходит увеличение плотности дислокаций главным образом, по-видимому, в ГЗ и приграничных областях. Предложенный подход для достижения значительной пластичности при сохранении высокой прочности может быть эффективным и для других УМЗ сплавов на основе Al.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-08-00474).

1. А.М. Мавлютов, Т.А. Латынина, М.Ю. Мурашкин, Р.З. Валиев, Т.С. Орлова, ФТТ 59 (2017) 10, 1949.
2. А.М. Мавлютов, Т.С. Орлова, Э.Х. Яппарова, Письма ЖТФ 46 (2020) 18, 30.
3. N.V. Skiba, T.S. Orlova, M.Y. Gutkin, Physics of the Solid State 62 (2020) 11, 2094

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.349

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОРАЗМЕРНЫХ СМЕШАННЫХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ ZrO2

Мороз Э.М.[1], Кривенцов В.В.[1], Пахарукова В.П.[1], Шефер К.И.[1], Удовский А.Л.[2]

[1] *Россия, Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, emoroz@catalysis.ru*
[2]*Россия, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, audovskiy@imet.ac.ru*

Смешанные дисперсные оксиды со структурой флюорита состава $(Zr,Y,)O_{2-x}$, легированные двухвалентными катионами, широко применяются в промышленности, что связано с возможностью варьирования их физико-химических свойств, которые зависят от фазового состава, общей и локальной структуры, микро- и нано-структуры, Эти характеристики, в свою очередь, зависят от способа синтеза и химического состава.

С целью выявления влияния модифицирующих катионов на общую, микро - и нано-структуру оксидов циркония выполнено комплексное физико-химическое исследование смешанных оксидов состава $(Zr,Y,Me)O_{2-x}$, где Me=Mg и Fe. Образцы синтезированы методом соосаждения нитратных солей с последующей прокалкой в течение 10 суток при T=1523K. При исследовании использованы: метод масс-спектрометрии и EDX - для тестирования химического состава; РФА - для определения фазового состава, параметров элементарных ячеек, размеров областей когерентного рассеяния, микроискажений; ППА - для уточнения кристаллической структуры; PDF и EXAFS - для определения локальной структуры; метод просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ПЭМВР) - для определения структуры и микроструктуры.

Показано, что все образцы – это твердые растворы со структурой, отвечающие кубической фазе ZrO_2 флюоритного типа. Наблюдаемое аномальное уширение подножий узких дифракционных пиков и диффузное рассеяние в области 40-70°(2θ) по данным ПЭМВР связано с большим количеством микроискажений на границах кристаллитов и наличием, наряду с крупными кристаллитами (>100нм), малых частиц, находящихся на их поверхности и с размерами <10нм. Исследование химического состава образцов методами EDX и масс-спектрометрии дало одинаковые значения для общего состава, но локально химический состав отдельных микро-кристаллитов оказался другим, что подтверждается значениями параметров элементарных ячеек в них. По-видимому, фиксируемые микроискажения возникали вследствие градиента химического состава, а их релаксация происходила за счет формирование наночастиц на поверхности массивной фазы. Уточнения структур в рамках пространственной группы $Fm\bar{3}m$ рентгенографическим методом ППА для крупных частиц давали высокие факторы недостоверности (10-11%). Проведенные расчеты показали, что эти значения определяются не вариациями структурных характеристик в рамках флюоритной структуры, а другими свойствами материалов - их реальной структурой (наличием напряжений на границах зерен и изменениями структурных характеристик в них). При исследовании локальной структуры образцов методом EXAFS обнаружено образование кластеров, включающих только ионы иттрия, окруженные ионами кислорода. Проведенное моделирование по расположению кислородных вакансий методом PDF показало в модифицированных образцах образование цепочек вакансий в кристаллографическом направлении [111] по типу структуры пирохлора Zr2Y2O7.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00530

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.356

РАСПЫЛЕНИЕ МЕДНОГО АНОДА ПЛАНАРНОГО МАГНЕТРОНА ПУЧКОМ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ АРГОНА КИЛОЭЛЕКТРОН-ВОЛЬТНЫХ ЭНЕРГИЙ

Семенов А.П., Семенова И.А., Цыренов Д.Б-Д., Николаев Э.О.

Институт физического материаловедения СО РАН,
г. Улан-Удэ, Россия, dmitriyzak@mail.ru

В приближении переноса кинетической энергии в каскадах столкновений [1], рассматривается численная оценка коэффициента распыления центрального медного анода планарного магнетрона ускоренным пучком ионов аргона в конструкции распылительного газоразрядного устройства [2]. Ионы (рис. 1) из плазмы 1 извлекаются через эмиссионный канал в катоде 2, ускоряются электродом 3, формируются в пучок 4 и распыляют медный центральный анод 5 планарного магнетрона. Показано, при инжекции 1-10 кэВ ионного пучка в магнетрон коэффициент распыления медного анода магнетрона составляет 3-6 атомов (рис. 2) на один падающий ион, что позволяет вносить и регулировать с высокой точностью и в малых долевых соотношени-

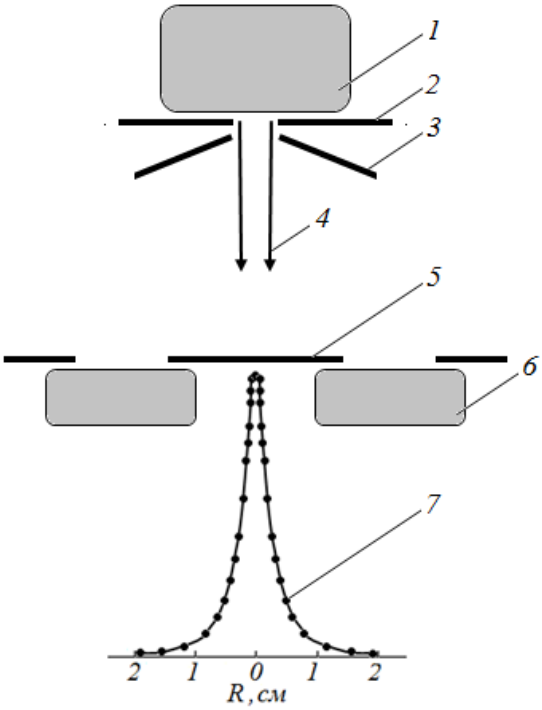


Рис. 1. Схема распыления центрального анода планарного магнетрона ионным пучком: 1-плазма, 2-катод, 3-ускоряющий электрод, 4-пучок ионов, 5-анод магнетрона, 6-плазма магнетронного разряда, 7-распределение ионного тока на поверхности анода.

ях (единицы ат. %) примесь, в частности, медь в процессе синтеза сверхтвердых TiN-Cu покрытий реактивным распылением в магнетронном разряде и направленно воздействовать на нанокристаллическую структуру покрытий.

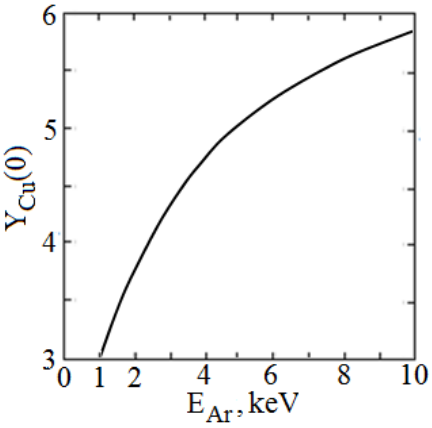


Рис. 2. Расчетная зависимость коэффициента распыления меди от энергии распыляющих ионов аргона.

Работа выполнена в рамках проекта № 20-08-00207А Российского фонда фундаментальных исследований и государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 0270-2021-0001).

1. Sigmund P. // Phys. Rev. – 1969. – V. 184. - № 2. – P. 383-416.
2. Semenov A.P., Semenova I.A., Tsyrenov D.B-D., Nikolaev E.O. // Instruments and Experimental Techniques. – 2020. - V. 63. - № 5. – P. 782-786.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.361

ЛАЗЕРНО-ИНИЦИИРОВАННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Елисеев Н.Н., Киселев А.В., Ионин В.В., Бурцев А.А., Михалевский В.А., Лотин А.А.

ИПЛИТ РАН — филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
140700, г. Шатура, ул. Святоозерская, 1, nikolai.eliseev@phystech.edu

В работе представлены результаты исследований структурных свойств тонких пленок халькогенидных материалов, таких как теллурид германия (GeTe) и сплава на его основе $Ge_2Sb_2Te_5$ (GST). Благодаря своему уникальному свойству – высокому оптическому контрасту между двумя фазовыми состояниями [1], эти материалы нашли широкое применение в перезаписываемых оптических дисках и модулях энергонезависимой памяти [2]. Поэтому исследование изменений их физических свойств при воздействии лазерного излучения позволит лучше изучить природу фазовых переходов и реализовать новые устройства оптоэлектроники и фотоники на их основе.

Методом рентгеновской дифракции были изучены структурные свойства образцов тонких (100 нм) пленок GeTe и GST, полученных методом термического вакуумного напыления на подложках из кварцевого стекла. На рисунке 1 представлены дифрактограммы образцов сразу после напыления, которые были подвергнуты кристаллизации с помощью одиночного лазерного импульса (λ=532 нм, τ=20 нс) и реаморфизированы лазерным импульсом большей интенсивности [1]. Показано, что после лазерного воздействия пленки демонстрируют кубическую кристаллическую структуру с пространственной группой F*m*-3*m*.

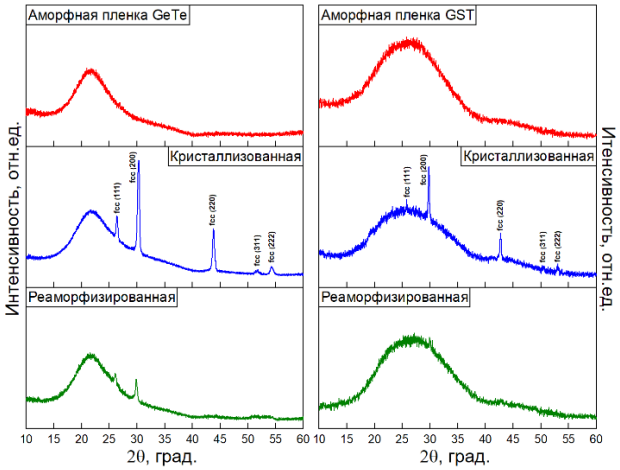


Рис.1. Дифрактограммы образцов тонких (100 нм) пленок GeTe и GST на подложке SiO_2.

Исследование фазовых превращений в халькогенидных материалах под действием лазерного излучения открывает перспективы в создании многоуровневых модулей памяти и вычислительных устройств нового поколения [3].

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00842-20-00 при финансовой поддержке гранта № 075-15-2019-1950, а также гранта РФФИ № 19-29-12024.

1. Eliseev N.N., Kiselev A.V., Ionin V.V., Mikhalevsky V.A., Burtsev A.A., Pankov M.A., Karimov D.N., Lotin A.A. // Results in Physics. – 2020. – 19. – 103466.
2. Raoux S., Shelby R.M., Jordan-Sweet J., Munoz B. et al. // Microelectronic Engineering. – 2008. – 85 (12). – 2330–2333.
3. Zhang W., Mazzarello R., Wuttig M., Ma E. // Reviews Materials. – 2019. – 4. – 150-168.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.362

ОСОБЕННОСТИ ЛЕГИРОВАНИЯ НАНО- И МЕЛКОДИСПЕРСНОГО ТЕРМОЭЛЕКТРИКА GeSi ПРИ ЕГО СИНТЕЗЕ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНЫМ ПЛАЗМЕННЫМ СПЕКАНИЕМ

Дорохин М.В., Ерофеева И.В., Кузнецов Ю.М., Демина П.Б., Здоровейщев А.В.

Нижегородский физико-технический институт ННГУ им. Н.И.Лобачевского
г. Нижний Новгород, Россия, irfeya@mail.ru

Легирование является важнейшим элементом технологии получения полупроводниковых, в том числе термоэлектрических, материалов. При изготовлении термоэлектрического генератора (ТЭГ) для диапазонов средних и высоких температур может быть использован твердый раствор $Si1\text{-}xGe_x$. Среди других материалов он выгодно отличается возможностью формирования обеих (*p*-, и *n*-типа) ветвей ТЭГ,.

В настоящей работе исследуется влияние легирования на процесс формирования мелкодисперсного (150-500 нм) твердого раствора SiGe при электроимпульсном плазменном спекании (ЭИПС) смеси порошков Si и Ge. Спекание проводилось в вакууме под приложенным давлением 70 MPa в интервале температур от комнатной до 1200 ºC. В качестве легирующих примесей n-типа использовались сурьма и фосфор; p-типа – индий и бор. Отличительной особенностью проведенного легирования является введение примеси в виде порошка непосредственно в смесь основных компонентов: до начала размола порошок примеси добавлялся в смесь порошков Si – Ge от 0.5 до 5 ат.%. При легировании SiGe донорной примесью обычно используется порошок фосфора, который является сильно токсичным материалом. В нашей работе был выбран не ядовитый порошок силицида фосфора SiP.

Впервые показано, что добавление мелкодисперсных легкоплавких металлических сурьмы и индия снижает температуру плавления основных компонентов смеси порошков Ge и Si. Обнаружено, что оба элемента проявляют себя как поверхностно-активные примеси, активируют спекание порошковой смеси Si и Ge, ускоряя усадку материала. Процент их содержания в смеси порошков, влияет на температуру появления жидкой фазы спекаемого материала и тем самым определяет температурный режим формирования твердого раствора.

Принципиальным вопросом при выполнении операций легирования является встраивание примеси в положение замещения, т.к. только такой вид встраивания обеспечивает повышение концентрации носителей и смещение уровня Ферми в полупроводнике, необходимое для получения оптимизированных значений коэффициента термоэлектрической эффективности *ZT*.

Определена предельная концентрация (менее 1%) примеси Sb, которая может быть введена в термоэлектрический материал SiGe в режимах ЭИПС, обеспечивающих наименьшее удельное сопротивления и наибольшие значения коэффициента *ZT*. Для оптимизированных значений концентрации Sb получены образцы термоэлектрических материалов, для которых характерны значения коэффициента *ZT*=0.56 при температуре 450 °C, что сопоставимо с мировыми аналогами GeSi:P [1]. При легировании силицидом фосфора *ZT* достигает 0.87–1.01 при T=520 °C.

1. Murugasami R., Vivekanandhan P., Kumaran S. // J. All. Comp.– 2019.– V **773**б. P.– 752.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.369

DEFORMATION OF Cu-Pd-P METALLIC GLASS UNDER CYCLIC MECHANICAL LOAD ON CONTINOUS HEATING

[a]*Fedorov V. A., [a]Berezner A. D.,
[b]Zadorozhnyy M. Yu., [b]Golovin I. S., [c,d]Louzguine-Luzgin D. V.
[a]Derzhavin Tambov State University, Tambov, Russia
[b]National University of Science and Technology «MISIS», Moscow, Russia
[c]Tohoku University, Sendai, Japan
[d]National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Sendai, Japan
*fedorov-tsu.tmb@inbox.ru

The nature of glass transition process is one of the main unsolved problems of solid-state physics. Under fast enough cooling of the metallic melt, amorphous metallic alloys (metallic glasses, MG) undergo glass transition. They exhibit the absence of the long-range order in their atomic structure. This type of metallic alloys is an object of persistent investigations such as mechanical testing, structural estimation and so on.

In this work we study plastic flow of Cu-based metallic glass on heating under dynamic loading (DMA). Deformation of the specimens with 30 mm length and 18.5 mm working zone was carried out using of Q800 (TA Instruments) dynamic mechanical analyser on heating at a heating rate of 5 K/min. Before testing, the specimen had been loaded by the constant stress of 20 MPa that was fixed up to the end of the experiment. In addition to the constant stress, the specimen was also loaded in the sinusoidal mode at 20 kPa amplitude (oscillation strain 0.01 %) and different frequencies of 0.3 Hz and 3 Hz. Thermal stability of the specimens and amorphous structure were verified by differential scanning calorimetry and the X-ray diffractometry (Cu-Kα monochromatic radiation) consequently.

It has been established that the thermal activation and cyclic loading lead to faster deformation of the Cu-Pd-P metallic glassy specimens at a fixed frequency. That can be described by a classical mechanical model (by the formula (1)).

$$l(t) = l_0 + \frac{Ct}{B^2 - Bt},$$

wherein l_0 – is initial length; C and B – are analytical fixed parameters having [m·s] and [s] units, respectively. B – parameter is time of the fracture of a specimen; t – current deformation time and C – is a deformational coefficient. Herewith, the occurrence of the wave areas (nodes and antinodes), wherein elastic force is constant (regions of periodic stability), is predictable for the specimen in the frames of the model equation.

This work has been performed with financial support of the Ministry of Education Science of the Russian Federation in the framework of Increase Competitiveness Program of NUST«MISiS» (№ К2-2020-037).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.370

МЕХАНИЗМЫ УСТАЛОСТНОГО РАЗРУШЕНИЯ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ ПРИ ИСПЫТАНИЯХ НА РАСТЯЖЕНИЕ И ИЗГИБ

Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Федотов Д.Ю.

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина, г. Тамбов, Россия, fedorov-tsu.tmb@inbox.ru

Установленны механизмы усталостного разрушения ленточных образцов аморфных металлических сплавов на основе Co, при испытаниях на изгиб с частотой 2 Гц и растяжение с частотой 12 Гц, на специально разработанной установке, в знакопостоянном цикле. Размер образцов – 20×3,5×0,02 мм.

При испытаниях на растяжение, на поверхности разрушения выявлены области зарождения трещины, её роста, переходная зона и зона долома. В области зарождения трещины имеет место вязкое разрушение с образованием плотнорасположенных микроутяжек. Характерный размер таких утяжек ~ 0,5-1,5 мкм. При переходе к зоне усталостного роста на фоне вязкого разрушения появляются участки роста трещин, похожие на скол. Кроме того, наблюдаются характерные для такого вида разрушения ступени, соответствующие одноразовому скачкообразному (0,2-0,5 мкм) подрастанию трещины. В переходной зоне наблюдаются участки образования более крупных деформационных структур и ячеек. Переход к зоне долома сопровождается переходом к вязкому разрушению с образованием «чешуйчатых» сдвигов, развитием трещин в параллельных плоскостях. В зоне долома трещина продвигается вязко, скачками (5-8 мкм), с образованием локализованных зон пластичности в местах остановки. Отмечено, что при снижении величины нагрузки увеличивается зона роста усталостной трещины.

Механизм роста собственной усталостной трещины представляется следующим. После зарождения с боковой поверхности образца на концентраторах нагрузки трещина образует перед своей вершиной серию микропор, за счет перераспределения свободного объема [1] в области растягивающих напряжений. После слияния пор и разрыва перемычек на поверхности разрушения формируется ступенчатый рельеф. Такой рельеф формируется вплоть до зоны долома.

При испытаниях на изгиб, на поверхности разрушения выявлены три зоны: 1 – зона образования трещины. Поверхность разрушения гладкая, без видимых следов пластичности; 2 – зона усталостного роста, связанная с образованием деформационного рельефа с характерным размером блоков структуры ~ 0,5-1 мкм; 3 – зона долома с развитием грубых пластических сдвигов. Трещина зарождается со стороны поверхности с растягивающими напряжениями в нескольких плоскостях. По характеру формирования деформационного рельефа, разрушение происходит путем образования интрузий и экструзий.

В ненагруженном образце свободный объем равномерно распределен. При циклически повторяющихся изгибах происходит перераспределение свободного объема. Он мигрирует преимущественно в область растяжения. За счет упругого взаимодействия образуются плоские скопления свободного объема в плоскостях нормальных к поверхности растяжения (наподобие образования полигональных стенок). В этих плоскостях зарождаются трещины, поверхности которых испытывают относительно друг друга касательный сдвиг. Изгибные нагружения способствуют раскрытию трещины.

1. Spaepen, F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses / F. Spaepen // Acta Metall. – 1977. – Vol. 25. – P. 407-415.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.371

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И КОРРОЗИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ АМОРФНЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Березнер А.Д., Балыбин Д.В., Федотов Д.Ю., Плужников С.Н.

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина, г. Тамбов, Россия, fedorov-tsu.tmb@inbox.ru

Применение аморфных материалов в сложных эксплуатационных условиях ставит задачи по исследованию их свойств в кислых водных средах [1,2].

В исследовании использовали аморфный сплав $Fe_{92}Si_6B_2$, мембрану из которого (рабочая площадь $S=3{,}63\cdot10^{-4}$ м^2, толщина $\delta=25\cdot10^{-6}$ м) помещали в упрощенную двухкамерную ячейку типа Деванатхана. В поляризационную часть ячейки вводили рабочий раствор (0,1 М HC1+0,9М LiC1; 0,5М HC1+0,5М LiC1; 0,99 М HC1+0,01М LiC1), а в диффузионную – водный раствор 0,01 Н $KMnO_4$. Продолжительность выдержки в растворе составляла 2 часа при температуре 293 К. Для характеристики твердофазной диффузии водорода использовали интегральную плотность тока водорода (j_H), диффундирующего через мембрану. После диффузии водорода проводились исследования механических характеристик образцов.

Экспериментально установлено, что диффузия водорода через мембрану из аморфного сплава на основе Fe уменьшается с ростом концентрации рабочего кислого раствора, зависимость имеет вид спадающей экспоненты. Спектральный анализ показал, что снижение интегрального тока диффундирующего водорода обусловлено процессами окисления металлического железа и образования на поверхности хлоридов, оксидов и гидроксидов железа. Обозначенные соединения могут блокировать доступ водорода к металлу, образуя пространственный барьер. Интенсивное выделение водорода на поверхности наблюдали экспериментально. Увеличение концентрации раствора приводит также к более интенсивному образованию соединений на поверхности и не способствует диффузии водорода вглубь образца. При этом активные центры поверхности могут блокироваться продуктами взаимодействия железа с рабочим раствором, поэтому процесс твердофазной диффузии протекает с незначительной скоростью, по сравнению с образованием молекулярного водорода.

После действия водородосодержащей среды изменяются механические характеристики аморфного сплава на основе железа. При разрушении образуются ветвящиеся трещины и складчатые структуры (200 - 700 нм). На самой поверхности разрушения наблюдается характерный «венный» узор. При увеличении концентрации водорода в рабочем растворе, деформационный рельеф существенно не меняется. Воздействие наводороживающих сред в исследуемых концентрациях уменьшает предел прочности аморфного сплава на основе железа. Модуль Юнга не меняется и составляет ~ 86 ГПа. Микротвердость исследуемых образцов, с повышением концентрации HCl и уменьшением концентрации LiCl, снижается в пределах 10%, ввиду образования оксидных пленок и частичного травления аморфной мембраны кислотным раствором. Циклические испытания на изгиб образцов, подверженных наводораживанию, показали снижение усталостной прочности по мере увеличения концентрации рабочего раствора.

1. Berezner A.D., Pluzhnikova T.N., Fedorov V.A., Fedotov D.Yu., Yakovlev A.V. // Mechanics of Solids. – 2020 – Vol. 55. – No. 1. – Pp. 16–21.
2. Han J., Hong J., Kwon S., Choi-Yim H. // Metals. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 2. – № 304. – P. 1-8.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.377

МЕЗОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫЕ САМООРГАНИЗАЦИЕЙ В ПРОЦЕССЕ РОСТА НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ

Небольсин В.А., Свайкат Н., Перепечина Т.А., Дунаев А.И.
Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия,
nada.s84@mail.ru

Материалы с иерархически организованной мезоскопической структурой привлекают особое внимание исследователей. Иерархическая структура позволяет в рамках одного объекта создавать целые платформы функциональных элементов с большим количеством различных характеристик. Мезоскопическая физика в настоящее время является бурно развивающимся разделом физики конденсированного состояния, и уже получены многие функциональные материалы с многоуровневой иерархической структурой, открывающие пути к созданию принципиально новых по замыслу приборов на их основе.

В настоящей работе представлены результаты получения самоорганизующихся мезоструктур в процессе роста нитевидных нанокристаллов (ННК) кремния [1]. Полученные структуры представляют собой скелетные пустотелые ННК в виде протяженных кристаллических остовов, образованных ребрами с нависающими нишами, лепестковых структур (трех- и шестилепестковые кристаллы), кристаллов блочной мезоструктуры, ограненных плоскостями октаэдра, двойниковых лент, сферолитных и скрученных кристаллов, кристаллов с «гофрированной» поверхностью и поверхностью ундулоида, и др. Элементный состав образцов исследован методом рентгеноспектрального микроанализа в растровом электронном микроскопе JSM–6380LV. Сложную архитектуру мезоструктур изучали по изображениям фрагментов, полученных путем механической фрагментации.

Общей структурной особенностью полученных ННК является наличие центрального протяженного стержня, имеющего субмикроскопические поперечные размеры и покрытого мезоструктурной оболочкой. Указанная особенность свидетельствует о двухстадийности процесса образования мезоструктур. Кристаллографическое направление оси роста центрального ННК-«лидера» <111>, а ориентация лепестков и блоков - в направлении <211> и <110>.

Кремниевые мезоструктуры синтезированы методом химического парового осаждения в системе $SiCl_4$ + H_2 с использованием цинка в качестве металла-восстановителя и, одновременно, катализатора процесса ПЖК (пар-жидкость-кристалл) роста ННК. Выбор Zn обусловлен тем, что он обладает более сильными восстановительными свойствами, чем H_2, что способствует созданию значительных пересыщений в ростовой атмосфере. Вместе с этим Zn отвечает всем необходимым требованиям к металлу-катализатору ПЖК-роста ННК Si.

Образование мезоструктур, полученных самоорганизацией в процессе роста ННК Si, объясняется неравномерным ростом кристаллов в радиальном направлении, затруднениями притока питающего вещества к отдельным участкам граней при высокой движущей силе и скорости процесса на других участках.

Кремниевые мезоструктуры со сложным архитектурным дизайном могут найти применение в фотоэлектрических устройствах для повышения эффективности поглощения света, в биосенсорах для идентификации биомолекул, в качестве активных материалов сорбентов и др.

В. А. Небольсин, Н. Свайкат, В. В. Корнеева Механизмы атомно-молекулярных процессов кристаллизации нитевидных нанокристаллов Si и GaAs // Неорг. матер., 2021. Т. 57. №3. С. 235–242.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.378

Влияние магнитноструктурных неоднородностей на физические свойства композитов на основе Cd_3As_2 в широком интервале температур и давлений.

Л.А. Сайпулаева[1], Н.В. Мельникова[2],А.Н.Бабушкин[2], Тебеньков А.В. [2],
В.С. Захвалинский[3], А.И. Риль[4], С.Ф. Маренкин[4] , М.М. Гаджиалиев[1]
[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2]*Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург, Россия*
[3]*Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия*
[4]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН.*

Данная работа является продолжением начатых нами комплексных исследований электрических, гальваномагнитных и термоэлектрических свойств композитов Cd_3As_2+MnAs в широкой области температур, давлений и индукций магнитного поля.

Представлены результаты экспериментальных исследований электро- и магнитосопротивления композитов на основе дираковского полуметалла Cd_3As_2 с содержанием наногранул *MnAs* при высоких давлениях. Исследованные образцы представляют собой гранулированные структуры, состоящий из наноразмерных ферромагнитных гранул *MnAs* хаотически расположенных в объеме матрицы с характерными размерами 20–30 нм и 50-90 нм.

Исследования магнитосопротивления Cd_3As_2+*n* масс.%MnAs (*n* = 20, 30, 44.7) в области давлений до 9 ГПа позволили обнаружить интервалы давлений, в которых проявляется ОМС. Так, в образце Cd_3As_2+MnAs (20 масс % MnAs) в области давлений 1-2.6 ГПа максимальное значение ОМС составляло ~ 1%, в Cd_3As_2+MnAs (30 масс % MnAs) ОМС с максимумом при P≈0.6 ГПа достигает ~ 1%, в образце Cd_3As_2+MnAs (44,7 масс % MnAs) при давлении ~7.8 ГПа наблюдается область ОМС, которое в максимуме составляет 0.36%.

Кроме ОМС в ряде исследованных образцах установлено наличие особенностей поведения положительного магнитосопротивления в области давлений, соответствующих обнаруженным ранее фазовым переходам в полупроводниковой матрице композита Cd_3As_2 и в ферромагнитных гранулах MnAs.

Также барическое поведение электро- и магнитосопротивления показали существенное изменение скорости уменьшения электросопротивления при росте давления от 25 до 30 ГПа, формирование высоких значений отрицательного магнетосопротивления при увеличении давления и его малые (по модулю) значения при уменьшении давления до 16 ГПа.

Учитывая особенности поведения измеренных характеристик при увеличении и последующим уменьшении давления или при исследовании при циклическом нагружении, можно предположить, что в материалах происходят необратимые или почти необратимые изменения. Полученные результаты согласуются с поведением термоэдс материалов при давлениях до 50 ГПа.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.365

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ДОЭВТЕКТИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Nb –-Si –Al, ПОЛУЧЕННЫХ АЛЮМИНОТЕРМИЕЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ СКОРОСТЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ

Сапегина И. В., Пушкарев Б. Е., Терешкина С. А., Ладьянов В.И.

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия,
sairvl@mail.ru

Согласно фазовой диаграмме Nb-Si, в обогащенной ниобием области системы, в зависимости от состава и условий получения сплавов возможно образование как Nb_{ss}-Nb_3Si, так и Nb_{ss}-Nb_5Si_3 композитов. Эти сплавы обычно хрупкие, в основном из-за присутствия силицидных фаз. Имеются сообщения о попытках улучшить пластичность эвтектических сплавов системы Nb-Si при комнатной температуре [1-2] за счет изменения микроструктуры этих сплавов. Изменение микроструктуры может быть достигнут путем контроля состава сплава, скорости охлаждения и направления кристаллизации.

В данной работе исследовано влияние скорости охлаждения на структуру и свойства доэвтектических сплавов Nb –-Si –Al, полученных алюминотермией. В качестве реагентов при самораспространяющимся высокотемпературном синтезе (СВС) сплава Nb-Si использовали следующие материалы: оксид Nb_2O_5 (99,5 мас.%), кремний марки КР 00 (99,0 мас.%) и порошок алюминиевый марки АСД-1 (99,7 мас.%). СВС проводили в реакторе закрытого типа в атмосфере аргона при давлении 80 атм, в тиглях из графита и оксида магния. Химический состав полученных сплавов определяли энергодисперсионным микроанализом (EDAX Genesis 2000XMS) с нескольких областей слитка: Nb-13,7±0,3 ат.% Si-3±0,4 ат.%Al и Nb-14,0±0,3 ат.% Si-3,2±0,4 ат.%Al для сплавов, полученных в тиглях из графита и оксида магния соответственно.

Регулирование скорости охлаждения сплава, получаемого при алюминотермии, проводили путем замены материала тигля (различие в скоростях охлаждения сплава была около порядка). Разница в скоростях охлаждения не повлияла на фазовый состав полученных сплавов. Основными фазами в полученных сплавах являются твердый раствор на основе ниобия (Nbss) и фаза β-Nb_5Si_3. Наблюдаемые микроструктуры характерны для сплавов доэвтектического состава – дендриты первичной фазы Nb_{ss} и колонии эвтектики Nb_{ss} + Nb_5Si_3. Микроструктура сплава, полученного в тигле из графита, более дисперсная по сравнению со сплавом, полученного в тигле из оксида магния, что связано с разной скоростью охлаждения сплавов, поскольку с ростом скорости затвердевания растет скорость образования центров зарождения кристаллов, но уменьшается время их роста. Формирование более мелкой структуры, привело к возрастанию микротвердости эвтектики, твердости и вязкости разрушения сплава по сравнению со сплавом с менее дисперсной структурой.

1. Chan K.S. // Mater. Sci. Eng. – 2005. – V. 409A. – P. – 257-269.
2. Ma C.L., Li J.G., Tan Y., Tanaka R., Hanada S. // Mater. Sci. Eng. – 2004. – V. 386A. – P. – 375-387.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.366

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ СЖИМАЕМОСТИ НОВОЙ ФАЗЫ $Ca(Fe,Al)_2O_4$ ДО 61 ГПА

Искрина А.В.[1,2], Бобров А.В.[1,2,3], Кузьмин А.В.[4], Спивак А.В.[2], Чаритон С.[5], Федотенко Т.[6], Дубровинский Л.С.[7]

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, г. Москва, Россия,* iskrina@iem.ac.ru
[2] *Институт экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия*
[3]*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, г. Москва, Россия*
[4]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
[5] *Центр передовых источников излучения, Университет Чикаго, г. Чикаго, США*
[6]*Институт физики материалов при экстремальных условиях, Лаборатория кристаллографии, Университет Байройта, г. Байройт, Германия*
[7]*Баварский Геоинститут, Университет Байройта, г. Байройт, Германия*

Фаза $Ca(Fe,Al)_2O_4$ синтезирована при давлении 24 ГПа и температуре 1600°C в Баварском Геоинституте. Полученная фаза $Ca(Fe,Al)_2O_4$ (*Pnma*) имеет структуру кальциоферрита и параметры решетки a = 8,9785 Å, b = 2,9158 Å, c = 10,4253 Å, V = 286,7(19) Å^3. Сжимаемость фазы $Ca(Fe,Al)_2O_4$ изучалась с использованием источника синхротронного излучения в ESRF (Гренобль) до ~61 ГПа. В этом диапазоне давлений фазовых превращений не обнаружено, но зарегистрирован спиновый переход для железа. Также удалось получить уравнение состояния для фазы $Ca(Fe,Al)_2O_4$.

Квантово-химическими методами проанализирована устойчивость различных спиновых состояний атома железа (III) в искаженных октаэдрах "FeO_6" при низком и высоком давлении. Для упрощения расчетов были построены новые аква-комплексы $[Fe(H_2O)_6]^{3+}$ на основе октаэдров FeO_6 при давлениях 2,3 ГПа и 53,9 ГПа. Расчеты электронной структуры S = 1/2, 3/2 и 5/2 спиновых состояний аква-кластеров Fe(III) проводились с использованием теории DFT, функционала B3LYP [1] и программного обеспечения ORCA [2]. Основное различие между октаэдрами $[Fe(H_2O)_6]^{3+}$ при низких и высоких давлениях заключается в относительном изменении энергии (ΔE) для различных спиновых состояний: S=5/2 состояние комплекса Fe(III) является наиболее благоприятным при низких давлениях, в то время как самое низкое S=1/2 спиновое состояние более стабильно при высоких давлениях. Это подтверждает изменение спинового состояния Fe (III) в исследуемом диапазоне давлений.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 20-35-90095\20. Работа выполнялась в рамках научного плана Лаборатории глубинных геосфер МГУ им. М.В. Ломоносова и в рамках Научно-исследовательской программы ИЭМ РАН (АААА-А18-118020590140-7).

1. Becke A.D. (1988). *Phys Rev A.* **B38**(6), P. - 3098–3100.
2. Neese F. (2012). *Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci.* **B2**(1), P. - 73–78.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.372

ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ИНТЕРФЕЙСОВ ГЕТЕРОСТРУКТУР СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК/ДИЭЛЕКТРИК

Мамин Р.Ф.

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия, mamin@kfti.knc.ru

В 2004 году Охтомо и Хвангом был обнаружен электронный газ высокой подвижности на интерфейсе между $LaAlO_3$ и $SrTiO_3$ [1]. Позже было показано, что эта гетероструктура обладает ферромагнитными свойствами [2] и переходит в сверхпроводящее состояние при температурах ниже 300 мК [3]. В нашей группе мы исследовали гетероструктуры на основе сегнетоэлектрических и диэлектриков оксидов со структурой типа $BaTiO_3/LaMnO_3$ и $BaTiO_3/La_2CuO_4$. С помощью расчётов из первых принципов были промоделированы электронные и магнитные свойства этих гетероструктур. Было показано, что в обеих гетероструктурах $BaTiO_3/LaMnO_3$ и $BaTiO_3/La_2CuO_4$ в области интерфейса исчезает запрещенная зона и система переходит в состояние с ненулевой плотностью состояний на уровни Ферми. Таким образом, моделирование гетероструктурах $BaTiO_3/LaMnO_3$ [4] указывает на металлический характер поведения проводимости интерфейса этой гетероструктуры. Кроме этого, в гетероструктурах $BaTiO_3/LaMnO_3$ возникает магнитное упорядочение ферромагнитного типа. Были получены образцы гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, экспериментально измерены сопротивление образцов и показано возникновение квазидвумерной проводимости на интерфейсе гетероструктуры.

В образцах гетероструктуры $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, не подвергнутых никаким воздействиям, электрическое сопротивление значительно уменьшается с температурой при температурах ниже максимума при 160 K, указывая на металлический характер поведения проводимости интерфейса этой гетероструктуры. Температура максимума зависит от термоциклирования во внешнем магнитном поле, и она увеличивается с увеличением количества циклов. Сильное влияние внешнего магнитного поля на сопротивление гетероструктуры свидетельствует о том, что в области интерфейса существует неоднородный магнитный порядок, который постепенно переходит к однородному порядку при приложении магнитного поля при термоциклировании.

При исследовании гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$ был обнаружен своеобразный эффект отрицательной фотопроводимости гетероструктуры во время однородного освещения гетероструктуры со стороны сегнетоэлектрической пленки светом различного спектрального состава. Эффект состоит в том, что при освещении сегнетоэлектрической пленки сопротивление гетероструктуры, измеренное вдоль интерфейса, увеличивается. Величина эффекта зависит от спектрального состава света, наибольший эффект наблюдается при освещении зеленым светом. Также обнаружено изменение проводимости на интерфейсе после приложения неоднородного внешнего электрического поля и освещения к сегнетоэлектрической плёнке.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-12-00179.

1. A. Ohtomo, H. Ywang, *Nature* **427**, 6973 (2004).
2. S. Thiel, G. Hammerl, A. Schmehl et al., *Science* **313**, 5759 (2006).
3. N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, et al., *Science* **317**, 1196 (2007).
4. V.V. Kabanov, I.I. Piyanzina, Yu.V. Lysogorskiy, et al., *Mater. Res. Express* **7**, 055020 (2020).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.363

МЕХАНИЗМ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ВЫСОКОДЕФЕКТНЫХ ФЛЮОРИТПРОИЗВОДНЫХ R_2TiO_5 (R = Er,Tm, Yb, Lu)

Ляшенко Л.П.[1], Щербакова Л.Г.[2], Колбанев И.В.[2] Тартаковский И.И.[3], Максимов А.А.[3] Светогоров Р.Д.[4], Зубавичус Я.В.[4]

[1]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*, lyash@icp.ac.ru
[2]*Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва, Россия*
[3]*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*
[4]*Курчатовский институт, Москва, Россия*

В разупорядоченных флюоритоподобных моно- и поликристаллах R_2TiO_5 (R = Gd, Er, Y, Sc; M=Ti, Zr, Hf) впервые наблюдали образование нанодоменов (~10÷1000 нм) с различной степенью упорядочения [1-3]. В данной работе методами дифракции монохроматического синхротронного рентгеновского излучения и Raman спектроскопии изучены структурные преобразования порядок-беспорядок в высокодефектных флюоритпроизводных твердых растворах (*TP*) xR$_2$O$_3$·(1-x)TiO$_2$ (R=Er, Tm, Yb, Lu; $0.5 \le x \le 0.60$). Установлено, что в процессе синтеза изученных *TP* происходит образование двух кубических фаз одинакового состава: разупорядоченной флюоритоподобной (*F*) (*Fm3m*) и сопряженной с ней с различной степенью упорядочения пирохлорподобной (*P*) (*Fd3m*), состоящей из нанокристаллических и наномасштабных (<100 нм) доменов. Параметры элементарных ячеек *F*- и *P*-фаз в изученных *TP* имеют близкие значения во флюоритной установке, поэтому сопряжение их кристаллических решеток может происходить через слои сопряжения, создаваемые дислокациями и другими дефектами структуры. В Raman-спектрах R_2TiO_5 (R = Er, Tm, Yb, Lu) присутствуют две широкие полосы в низко- и одна в высокочастотной областях с максимумами при ~ 100-176, 292-390 и 720-745 см$^{-1}$, характеризующие *P*- и *F*-фазы соответственно. Из сравнения данных РФА и Raman-спектроскопии следует, что максимумы на фоне широких полос *P*-фазы соответствуют кристаллическим доменам с определенной степенью порядка в массе наномасштабных (<100 нм) частиц с различной степенью упорядочения. В отличие от рентгенофазового анализа, где основные дифракционные отражения *F*- и *P*-фаз практически не разрешаются, в Raman-спектрах их интенсивные полосы находятся в различных частотных областях, что позволило достоверно установить присутствие этих фаз в кристаллическом и наномасштабном состояниях в образцах изученных систем. Образование нанодоменов в процессе синтеза в изученных флюоритпроизводных *TP* объясняет наблюдавшуюся нами ранее высокую диффузионную проницаемость *F*-фазы в монокристаллической диффузионной паре Sc_2O_3/TiO_2 при 1300 и 1400 ºС.

Образование нанодоменов с различной степенью упорядочения в изученных *TP* обусловлено внутренними напряжениями, возникающими из-за высокой плотности структурных дефектов в их элементарных ячейках.

1. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Karelin A.I., Smirnov V.A., Kulik E.S., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V. // Inorg. Mater. – 2016. – V. **52**. – № 5. – P. 483-489.
2. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Tartakovskii I.I., Maksimov A.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V. // Inorg. Mater. − 2018. – V. **54**. – № 3. – P. 245-252.
3. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Tartakovskii I.I., Maksimov A.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V., Kolbanev I.V // Inorg. Mater. – 2020. – V. **56**. – № 2. – P. 190-197. DOI: 10.1134/S0020168520020119.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.357

ВЛИЯНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ СУЛЬФИДА СВИНЦА В ПЛАЗМЕ НА СПЕКТРЫ ОПТИЧЕСКОГО ОТРАЖЕНИЯ

Зимин С. П.[1,2], Колесников Н. Н.[3], Тиванов М. С.[4], Трофимова А. В.[4], Амиров И. И.[1], Наумов В. В.[1], Горлачев Е. С.[1]

[1] Ярославский филиал Физико-технологического института им. К.А. Валиева РАН, Ярославль, Россия, zimin@uniyar.ac.ru
[2] Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова, Ярославль, Россия
[3] Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия
[4]Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

В докладе описываются процессы наноструктурирования поверхности кристаллов (100) PbS в процессе плазменной обработки и анализируется влияние проводимой модификации на спектры оптического отражения. Монокристаллы сульфида свинца были выращены методом вертикальной зонной плавки в аргоновой среде и имели ориентацию [100] вдоль оси роста. Слиток раскалывался на пластины, поверхность которых подвергалась механической полировке. Наноструктурирование поверхности пластин осуществлялось в реакторе высокоплотной аргоновой плазмы высокочастотного индукционного разряда (13,56 МГц) низкого давления. Энергия ионов Ar^+ составляла ~200 эВ, обработка проводилась в два последовательных этапа продолжительностью 2 и 3 мин. Исследования морфологии поверхности проводились при помощи метода растровой электронной микроскопии на установке Supra 40 (Carl Zeiss). Спектры зеркального (8°) и диффузного отражения регистрировались на спектрофотометре Lambda 1050 UV/Vis/NiR (Perkin Elmer) в диапазоне 250-2500 нм.

В результате плазменной обработки при реализации механизма «пар-жидкость-кристалл» был сформирован однородный массив вертикальных наноструктур сульфида свинца высотой около 60 нм, имеющих боковые горизонтальные отростки длиной 20-40 нм, ориентированные в направлениях {100}.

Обнаружено, что формирование ансамбля наноструктур на поверхности PbS методом плазменной обработки приводит к уменьшению коэффициентов зеркального и диффузного оптического отражения в исследованном диапазоне, наиболее заметному в коротковолновой области спектра. При этом значения коэффициентов зеркального и диффузного отражения имеют равные значения, за исключением узкой области спектра для длин волн ~250 нм, для которой коэффициенты отражения поверхности сульфида свинца с наноструктурами составляют 2 и 5% для зеркального и диффузного отражения, соответственно.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме № 0066-2019-0002, Государственного задания ИФТТ РАН Минобрнауки РФ и инициативной НИР ЯрГУ.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.358

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТОВ С ПОМОЩЬЮ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МИКРОЧАСТИЦ PrDyFeCoB

О.В. Коплак, Р.В. Моргунов

Институт проблем химической физики РАН, Россия, 142432, г. Черноголовка,
o.koplak@gmail.com

Молекулярные магниты на основе 3d-металлов представляют большой интерес с точки зрения наномагнетизма, использующего спин-орбитальную связь иона металла, управляющего сильной магнитной анизотропией. Управление спиновыми состояниями парамагнитных молекул, в том числе и мономолекулярных магнитов, возможно с помощью полей рассеяния ферромагнитных микрочастиц PrDyFeCoB. В нашей работе создан композитный материал, поддерживающий независимые от внешнего поля свойства одномолекулярных магнитов. Использование ферромагнитных микрочастиц PrDyFeCoB с сохраняемой заранее заданной намагниченностью позволяет регулировать локальную скорость релаксации спинов в комплексах, покрывающих микрочастицы (рис.1).

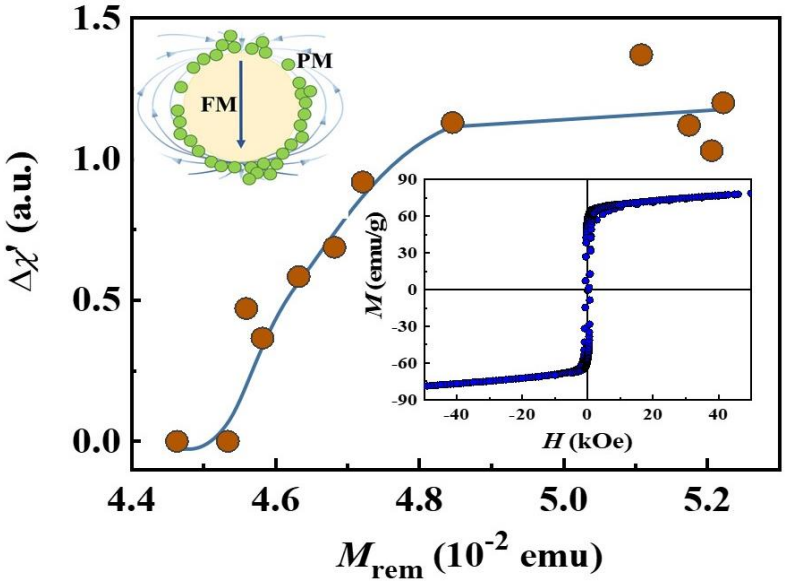


Рис.1. Зависимость прибавки действительной части магнитной восприимчивости Δχ' на частоте переменного поля 1400 Hz в нулевом поле от остаточного магнитного момента предварительно намагниченных микрочастиц. *На вставке вверху:* Схема распределения гексакоординированных комплексов Co (II) (зеленые кружки) вокруг ферромагнитной (FM) микрочастицы в нулевом поле (магнитные моменты и силовые линии показаны стрелками). *На вставке внизу:* Магнитный гистерезис микрочастиц при 2 K.

Показана возможность регулировки остаточной намагниченности микрочастиц внешним полем, что может быть использовано для управления спиновой релаксацией как в гексакоординированных комплексах Co (II), так и в других комплексах, способных обнаруживать локальные остаточные поля в стохастическом ансамбле микрочастиц.

Благодарности.
Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 20-33-90256).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.373

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ, ВЫЗВАННЫЕ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Страумал Б.Б.

Институт физики твердого тела (ИФТТ РАН)
и Черноголовский научный центр (НЦЧ РАН), Черноголовка
НИТУ «МИСиС», Москва
straumal@issp.ac.ru

Интенсивная пластическая деформация (ИПД) не только приводит к сильному измельчению зерен и упрочнению материала, но также может вызвать диффузионные, а также бездиффузионные (мартенситные, сдвиговые) фазовые превращения. Нами изучено влияние кручения под высоким давлением (КВД) на диффузионные и мартенситные фазовые превращения в нанокомпозитах на основе меди и титана. В разбавленных бинарных сплавах на основе меди КВД вызывает конкуренцию между формированием частиц второй фазы, вызванным деформацией, и их растворением в медной матрице. Состав медной матрицы после КВД такой, какой может быть получен после длительного отжига при определенной (эффективной) температуре T_{eff}. Величина T_{eff} в разбавленных бинарных сплавах на основе меди увеличивается с увеличением энтальпии активации диффузии второго компонента и его температуры плавления T_m. Вызванные КВД превращения между интерметаллидами Юм-Розери, ускоренный массоперенос, огранение границ зерен и сегрегация границ зерен также протекают таким образом, как если бы они происходили при определенной (повышенной) T_{eff}. В сплавах Cu–Al–Ni с памятью формы диффузионные превращения, вызванные КВД (выделение α_1- и γ_1-фаз), влияют на последующее мартенситное превращение. Сплавы Ti–Fe, Ti–Co и Ti–Nb перед КВД содержали либо смесь α- и β-фаз, либо смесь α-фазы и интерметаллидов (α+TiFe или α+Ti_2Co). Во время КВД образуются α'- и α''-мартенситы, а также ω-фаза высокого давления. Обсуждаются диффузионные и бездиффузионные механизмы этих превращений.

Работа поддержана РФФИ (гранты 19-58-06002 и 18-03-00067).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.374

СПЛАВЫ ДЛЯ МЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ НА ОСНОВЕ β-ТИТАНА

Страумал Б.Б.[1-3], Горнакова А.С.[1], Рабкин Е.[4], Струг Р.[4], Кильмаметов А.Р.[2], Анисимова Н.Ю.[5], Киселевский М.В.[5]

[1]*Институт физики твердого тела (ИФТТ) РАН, г. Черноголовка, Россия*
[2]*Черноголовский научный центр (НЦЧ) РАН, г. Черноголовка, Россия*
[3]*НИТУ «МИСиС», г. Москва, Россия*
[4]*Израильский технологический институт ТЕХНИОН, Хайфа, Израиль*
[5]*НМИЦ онкологии им. Н.Н.Блохина, г. Москва, Россия*

straumal@issp.ac.ru

Титановые сплавы используют в медицинских целях уже более 60 лет. Их используют при изготовлении искусственных сердечных клапанов, стентов кровеносных сосудов, эндопротезов костей и суставов (плечевых, коленных, тазобедренных, локтевых), для реконструкции ушных раковин, в лицевой хирургии, а также в качестве зубных имплантатов. В материалах первого поколения (таких как технически чистый титан или сплавы типа ВТ6) матрица состояла в из фазы α-Ti или смеси α и β фаз. К сожалению, имплантаты из материалов первого поколения требуют замены уже через 10-15 лет эксплуатации. Это происходит из-за деградации имплантатов и потери контакта с костью. В последнее время и на смену этим материалам пришли β-титановые сплавы. Материалы второго поколения позволяют исключить вредное влияние ионов алюминия и ванадия, выделяющихся при постепенной коррозии имплантата, а их модуль упругости ближе к значениям для живой кости, чем у α и α+β сплавов. К важным направлениям развития β-титановых сплавов относится повышение их механической прочности, усталостной прочности, коррозионной стойкости и биосовместимости. Возникают и развиваются новые методы получения и термомеханической обработки титановых сплавов, такие как аддитивные технологии или интенсивная пластическая деформация. Весьма успешно идет замена дорогих компонентов (таких как тантал, цирконий или ниобий) на более дешёвые (например, хром и марганец). В результате свойства титановых имплантатов постепенно все больше приближается к свойствам человеческой кости, а срок их службы неуклонно возрастает.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 19-58-06002 и Министерства науки и технологии Израиля 3-16534

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.375

OPTIMAL SURFACE ROUGHNESS OF TI6AL4V ALLOY FOR THE ADHESION OF HEK293 HUMAN CELLS

Straumal B.B.[1,2], Gornakova A.S.[1], Kilmametov A.R.[2,3], Kiselevskiy M.V.[4], Anisimova N.Yu.[4], Nekrasov A.N.[5], Strug R.[6], Rabkin E.[6]

[1]*Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Ac. Ossipyan str. 2, Chernogolovka, 142432 Russia*
[2]*Scientific Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences, Lesnaya str. 9, Chernogolovka, 142432 Russia*
[3]*Institute for Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany*
[4]*Laboratory of Cell Immunity "N. N. Blokhin National Medical Research Centre of Oncology" of the Health Ministry of Russia, Kashirskoe highway 23, 115 478 Moscow, Russia*
[5]*Institute of Experimental Mineralogy, Russian Academy of Sciences, Ac. Ossipyan str. 4, 142432 Chernogolovka, Russia*
[6]*Department of Materials Engineering, TECHNION-Israel Institute of Technology, 3200003 Haifa, Israel*

straumal@issp.ac.ru

The wetting behavior of surfaces strongly depends on their roughness. In this work we investigated the effect of surface roughness of Ti – 6 wt.%Al – 4 wt.% V alloy on the adhesion of HEK293 human cells. The array of linear scratches has been produced on the surface of cold-wrought Ti – 6 wt.%Al – 4 wt.% V alloy discs with the aid of various abrasive SiC papers with grit sizes of 220, 400, 600, 800, 1000, 1200, 2000 and 4000 (number of grains per cm^2) and different diamond pastes with grain sizes 6, 3 and 1 μm. These SiC papers grades correspond to the SiC grain size of 68-7 μm. The resulted surface topography of the samples was examined by the conventional and confocal light microscopy and high-resolution scanning electron microscopy. Afterwards, the adhesion of the HEK293 human cells to the samples of different roughness has been measured by fluorescence miscroscopy. The size and morphology of adhered cells were measured by the light miscroscopy. The fraction of adhered cells behaves non-monotonously with grain size. It is about 0.35 for grain size of 1 μm, it increases with increasing grain size up to 0.95 for grain size of 7 μm and then slowly decreases down to 0.55 at abrasive grain size of 68 μm. The position of maximum is comparable with the dimension of HEK293 cells (~14 μm). Thus, the variation of surface roughness opens the way to control and tailor the fraction of adhered cells, depending on demand of medical techniques.

This work was partially carried out within the framework of the state assignment of the Institute of Solid State Physics and the Chernogolovka Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, as well as with the financial assistance of the Russian Foundation for Basic Research (grant 19-58-06002) and Israel Ministry of Science and Technology (grant 3-16534).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.048

ИССЛЕДОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В РАСТВОРЕ CdSe/ZnS В РАСТВОРЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Амарантов С.В.
ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, РАН, г.Москва, Россия,
amarantov_s@mail.ru

Сборка неорганических наночастиц часто приводит к коллективным свойствам, которые отличаются от свойства отдельных компонентов. Например, связывание плазмонных и экситонных наночастиц может изменить оптические свойства отдельных компонентов. В частности, исследованные нами, квантовые точки (КТ, QDs) CdSe/ZnS имеющие экситоный тип переноса возбуждения могут быть связаны с металл-полимерными наночастицами (НЧ, NP), имеющие плазмонный тип возбуждения (ПНЧ, PNP). В результате сборки КТ&ПНЧ (QDs&PNP) могут быть получены частицы с плазмон-экситонным взаимодействием, которые могут быть использованы в качестве сенсоров или светоизлучающих устройств.

В данной работе исследовались структурные характерстики КТ CdSe/ZnS в толуоле с max поглощения 520нм и металл-полимерный композит: 10% Au НЧ 2,2 мг/мл в присутствии ПС-ПВП (полистирол поливинилпиридин) в буфере ДМФА (диметилформамид), методом малоуглового рентгеновского рассеяния. Была построена модель экситонной НЧ - КТ CdSe/ZnS в толуоле и проведена обработка кривой различными методами а именно: однородным эллипсоидом рис.1а, набором однородных шаров различного радиуса рис.1б [1] и системой «ядро-оболочка» рис.1в с отношением плотности ядра к плотности оболочки - как одного из параметра модели и внешним радиусом оболочки R_0 с дисперсией $\sigma(R_o)$.

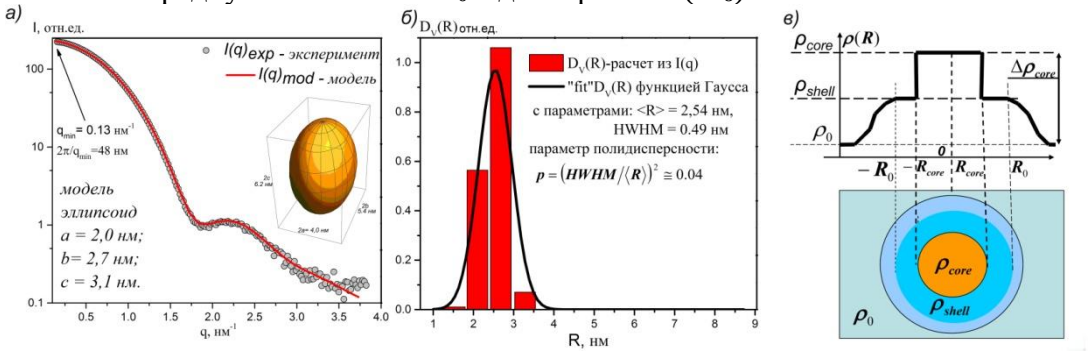


Рис1 а) модель однородного эллипсоида; б) распределение однородных шаров по объемам $D_V(R)$; в) модель КТ CdSe/ZnS «ядро-оболочка» с отношением $\eta = \rho_{core} / \rho_{shell}$ плотности ядра радиуса R_{core} к плотности оболочки радиуса R_0 с дисперсией $\sigma(R_o)$.

а) эллипсоид	б) $D_V(R)$		в) модель «ядро-оболочка»			
полуоси	Средний радиус	Парам. Полидисп.	Внешний радиус	дисперсия	толщина оболочки	Отношение плотностей
(*a*, *b*, *c*) нм	<R>, нм	*p*	R_0, нм	$\sigma(R_o)$, нм	ΔR, нм	$\rho_{core} / \rho_{shell}$
(2.0, 2.7, 3.1)	2.5	0.04	2.5	0.3	0.8	1,15

Таблица параметров моделей: а) эллипсоид, б)распределение объёмов шаров $D_V(R)$ по радиусам, в) «ядро-оболочка».

Образцы были предоставлены ИНХС им. А.В. Топчиева РАН.

[1] Свергун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М. Наука 1986.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.049

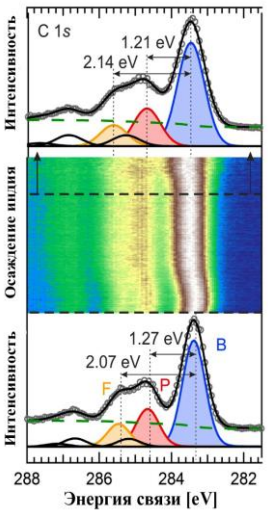
ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ In - $CuPcF_4$ В РЕЖИМЕ МИЛЛИСЕКУНДНОЙ ЗАПИСИ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ

Аристов В.Ю. [1,2], Молодцова О.В.[2,3], Аристова И.М. [1], Бабенков С.В.[2,4], Поторочин Д.В.[2,3]

[1] Институт физики твердого тела РАН, г.Черноголовка, Московская обл., Россия
[2] Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Hamburg, Germany
[3] Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург, Россия
[4]Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universitat, Mainz, Germany
e-mail: aristova@issp.ac.ru

Благодаря многочисленным потенциальным применениям металло-органические гибридные системы, содержащие наночастицы металла, самоорганизующиеся в органической молекулярной матрице, становятся все более привлекательными. Цель данного исследования - создать нанокомпозитный материал путем напыления индия на ультратонкую пленку органического полупроводника - тетрафторфталоцианина меди ($CuPcF_4$) и получить сведения о межфазных явлениях, которые могут радикально изменить электронные свойства органических широкозонных полупроводников. Процессы формирования металлоорганических границ раздела при изготовлении гибридных органико-неорганических систем могут быть быстротекущими. Для контроля и фиксации таких процессов эволюция фотоэлектронных спектров была изучена с помощью динамической фотоэлектронной станции, оснащенной электронным спектрометром "ARGUS" (фирма OMICRON) при источнике синхротронного излучения PETRA III/DESY, позволяющей регистрировать спектры в миллисекундном интервале (до 0,1 сек/спектр) [1]. Прослежена эволюция спектров глубоких уровней C 1s, N 1s и In $3d_{5/2}$, зарегистрированных непосредственно в процессе осаждении индия на поверхность $CuPcF_4$ в условиях сверхвысокого вакуума. В качестве примера на Рис.1 представлена эволюция глубокого уровня C 1s. Все данные были получены в виде циклов последовательной записи в динамическом режиме. Для каждого из глубоких уровней было получено около 150 спектров. Номинальное покрытие индия в процессе напыления увеличивалась от 0 до 5 нм. Установлено: наблюдается сильная диффузия атомов индия вглубь органической пленки; фактически отсутствует химическое взаимодействие индия с атомами углерода; атомы индия располагаются в местах близких к пиррольному азоту молекулы $CuPcF_4$; в процессе сильного взаимодействия атомов In и атомов пиррольного азота происходит перенос отрицательного заряда от индия к молекуле $CuPcF_4$.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН и поддержана РФФИ (Грант № 20-02-00489).



1. S.V. Babenkov, V.Y. Aristov, O.V. Molodtsova, K. Winkler, L. Glaser, I. Shevchuk, F. Scholz, J. Seltmann, J. Viefhaus // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. – 2015. – Vol. 777. – P. 189–193.

Рис.1. Эволюция спектра глубокого уровня C 1s, зарегистрированного в миллисекундном интервале в процессе осаждения индия на поверхность $CuPcF_4$ в условиях сверхвысокого вакуума.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.050

ОБРАБОТКА И АНАЛИЗ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН В MATLAB

Архандеев И.А.[1], Огородников И.И.[2], Яшина Л.В.[3], Кузнецов М.В.[1], Гребенников В.И.[1] и Кузнецова Т.В.[1,4]

[1]*Институт физики металлов им. Михеева УрО РАН, Екатеринбург*
[2]*Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург*
[3]*Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва*
[4]*Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
arkhandeev@imp.uran.ru

Рентгеновская фотоэлектронная дифракция является распространённым методом исследования структуры материала. Благодаря интерпретации фотоэлектронной дифракции в качестве голографии [1] существенно возросли требования к качеству отображения экспериментальных дифракционных картин. Требуется более существенная обработка данных перед дальнейшим анализом и применением в голографических алгоритмах с целью реконструкции атомного окружения в реальном пространстве [2]. Аналогичные требования и перед проведением R-факторного анализа, в котором рассматривается экспериментальная модель и теоретическая (например, выполненная с помощью алгоритма EDAC [3]), показывающая меру их согласованности.

Среда разработки MatLab отлично подходит для обработки экспериментальных дифракционных картин из-за широкого набора встроенных инструментов, собственного языка разработки алгоритмов (m-языка), а также средств визуализации данных в 2D и 3D. В данной работе представлен программный пакет, позволяющий осуществлять все необходимые операции по обработке и анализу дифракционных картин средствами MatLab, начиная с построения необработанных дифракционных картин в цилиндрическом и стереографическом представлениях и заканчивая изображениями, необходимыми для публикации. Программа позволяет построить картину 3D-изображения, благодаря чему операции вращения по азимутальному и полярному углам, становятся максимально упрощенными. Дополнительным преимуществом MatLab также можно назвать широкое распространение среды и гибкость в разработке. Удобный пользовательский интерфейс программы позволяет работать с ней пользователям с *любым уровнем подготовки*.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 19-29-12061 и проводилось в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Спин» № АААА-А18-118020290104-2). Л.В. Яшина благодарит РНФ за поддержку ее экспериментальной работы, грант 19-42-06303.

1. M. V. Kuznetsov, I. I. Ogorodnikov, D. Yu. Usachov, C. Laubschat, D. V. Vyalikh, F. Matsui, and L. V. Yashina, Photoelectron diffraction and holography studies of 2D materials and interfaces, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 061005 (2018).
2. F. Matsui, T. Matsushita, and H. Daimon, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 061004 (2018).
3. F. J. García de Abajo, M. A. Van Hove, and C. S. Fadley, Phys. Rev. B. 63, 075404 (2001).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.051

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

Бадиев М.К., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А.

Институт физики ДФИЦ РАН, ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия, m_zagir@mail.ru

Одним из наиболее интенсивно исследуемых фрустрированных спиновых систем за последние десятилетия являются антиферромагнетики на слоистой треугольной решетке. Однако, на сегодняшний день, остаются невыясненными некоторые вопросы, связанные с влиянием внешнего магнитного поля на фазовые переходы (ФП), термодинамические, критические и магнитные свойства слоистых антиферромагнетиков с треугольной геометрией [1,2].

Анализ литературных данных показывает, что внешнее магнитное поле влияет на многие физические свойства фрустрированных спиновых систем. Поэтому в данной работе нами изучается влияние магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде:

$$\mathrm{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - h \sum_i \vec{S}_i^{\,z} , \qquad (1)$$

где $\vec{S}_i$ – трехкомпонентный единичный вектор $\vec{S}_i = \left(S_i^x, S_i^y, S_i^z\right)$, $J<0$ – константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, h - внешнее магнитное поле. Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 12$. Все параметры приводятся в безразмерных величинах.

Для исследования фрустрированных систем, в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [3].

Исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле выполнено с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели в интервале $0 \leq h \leq 10$ реализуется фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153-а.

1. Sh. Ma. Modern Theory of Critical Phenomena. – Springer –Verlag, London1976.
2. Antonenko S.A., Sokolov A.I. and Varnashev V.B. // Phys. Lett. A. – 1995, V. – 208, P. – 161.
3. Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Biopolymers – 2001. Peptide Science N. – 60, P. – 96.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.052

МИКРОКОНТЕЙНЕРЫ НА ОСНОВЕ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ИНТРАНАЗАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Бусленко А.В. [1], Букреева Т.В. [1,2], Ванцян М.А. [1], Трушина Д.Б.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»,
г. Москва, Россия, anyabuslenko@gmail.com
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Адресная доставка лекарств в мозг является важной проблемой как для фундаментальной науки, так и для медицинских применений. Отсутствие решения этой проблемы существенно ограничивает разработку современных подходов к диагностике и лечению различных церебральных патологий [1].

Интраназальное введение является перспективным способом доставки препаратов непосредственно в центральную нервную систему [2]. Для увеличения биодоступности доставляемых веществ предложено использовать микроконтейнеры на основе пористых частиц карбоната кальция с мукоадгезивной оболочкой [3]. В настоящей работе проводили загрузку микрочастиц $CaCO_3$ пептидным препаратом «Кортексин» методами адсорбции и соосаждения.

Эффективность загрузки частиц была определена спектрофотометрически с использованием реактива Бредфорд. С помощью гель-проникающей хроматографии была показана селективность включения различных фракций пептидного препарата методом соосаждения. Для сформированных частиц $CaCO_3$ методом динамического светорассеяния было получено распределение по размерам, средний размер контейнеров составил 3,0±0,5 мкм [3].
Параметры разработанных контейнеров (средний размер, загрузка, мукоадгезивная оболочка) свидетельствуют об их перспективности для интраназальной доставки препарата.
Список литературы:

3. **Pires P.C., Santos A.O. // J. Control. Release. 2018, 270, 89-100.**
4. **Букреева Т.В., Марченко И.В., Бородина Т.Н., Дегтев И.В., Ситников С.Л., Моисеева Ю.В, Гуляева Н.В., Ковальчук М.В. // ДАН. 2011, 440, 2, 191-194.**
5. **Borodina T.N., Trushina D.B., Marchenko I.V., Bukreeva T.V. // BioNanoSci. 2016, 6, 261-268.**

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.053

СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ 3d МЕТАЛЛОВ НА ПОРИСТОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ

Валеев Р.Г.[1], Алалыкин А.С.[1], Ахметова Л.Б.[2]

[1]ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН», г. Ижевск, Россия, rishatvaleev@mail.ru
[2] Удмуртский государственный университет, г. Ижевск, Россия

Магнитные свойства двумерных наноструктурированных покрытий на основе железа, никеля или кобальта проявляются особенным образом, существенно отличающимся от одно- и трехмерных объектов. Это связано с появлением так называемых поверхностных магнитных структур, таких как «вихрь», «гиперболический вихрь», «цветок» и других [1]. Их появление связано с распределением намагниченности, при котором вектор намагниченности всегда направлен по касательной к окружностям с общим центром, за исключением небольшой области в центре вихря, в которой он направлен перпендикулярно плоскости планарной структуры [2].

При нанесении покрытия различных материалов на поверхность пористых материалов физическими способами (термическое или магнетронное напыление), его осаждение происходит, главным образом, на межпорное пространство с частичным проникновением в поры на глубину не более половины их диаметра [3], что, скорее всего, усложнит механизм формирования магнитных свойств в приграничных областях пор при нанесении ферромагнетиков. Следует отметить, что данная тема практически не изучена вследствие необходимости получения высокочистых матриц пористого оксида алюминия с высокоупорядоченным расположением пор, а также методик осаждения высокочистых покрытий металлов с контролируемыми параметрами толщины [2].

Целью настоящей работы является изучение возможности получения покрытий 3d металлов, таких как Fe, Co и Ni, на поверхности матриц пористого оксида алюминия (ПОА) с высокоупорядоченным расположением пор для создания на их основе хиральных магнитных структур, в которых, как предполагается, вектора намагниченности будут «закручиваться» от границы поры внутрь. При этом локальное взаимодействие этих магнитных структур, формируемых вокруг отдельных пор, благодаря неопределенности «в тройных стыках» межпорных границ, позволит получить уникальные фундаментальные свойства и разработать новые принципы для устройств спинтроники.

Матрицы ПОА синтезированы по методике двухстадийного анодного окисления высокочистых (99,999 %) пластин алюминия в 0,3 М растворе H_2SO_4 при фиксированном напряжении 25 В. Покрытия Fe, Co и Ni осаждались методом магнетронного напыления, толщина контролировалась при помощи кварцевого датчика. Исследованы морфология (атомно-силовая и сканирующая электронная микроскопии), структурное состояние (рентгеновская дифракция) и магнитные свойства (кривые намагничивания и петли гистерезиса).

Исследование выполнено в рамках госзадания Минобрнауки РФ отдела ФХП ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, № гос. регистрации 121030100002-0.

Li J., Rau C. // Phys. Rev. Lett. - 2006 - V. 97 - P. 107201 – 107204.
Фомин Л.В. Микромагнитные состояния эпитаксиальных микро- и наноструктур Fe (001) и Fe (011). // Дисс. на соискание ученой степени канд. физ. – мат. наук. – 2012. – 174 с.
Valeev R., Beltiukov A., Mukhgalin V., Zakirova R. // Mater. Res. Express. – 2016. – V. 3. – 015902.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.054

Подавление обменного взаимодействия сильновзаимодействующих двумерных электронов в режиме квантового эффекта Холла

Ваньков А.Б.[1], Кукушкин И.В.[1]

[1] *ИФТТ РАН, 142432, МО, г.Черноголовка, ул. Ак. Осипьяна, 2*

Некоторые секреты физики конденсированного состояния раскрываются на примере определенных модельных задач. Так, эффекты, связанные с обменным взаимодействием двумерных электронов в квантующем магнитном поле, изучают в простейшем случае квантово-холловского ферромагнетика (QHF) с $\nu = 1$. Это состояние устойчиво даже в системах со сколь угодно малым Зеемановским взаимодействием, что объясняется значительным выигрышем в обменной энергии. Сведенный до минимума набор встроенных корреляций делает это состояние наиболее пригодным для теоретического анализа, хотя последовательный учет многочастичных эффектов возможен лишь при условии малости кулоновских вкладов по сравнению с циклотронной энергией. Ранее на примере двумерных электронных систем в GaAs был показан эффективный способ зондирования обменных эффектов через энергию циклотронных возбуждений с переворотом спина (CSFE), измеряемую методом неупругого рассеяния света [1]. Наблюдалось хорошее согласие эксперимента с расчетами в приближении Хартри-Фока при выполнении условия малости кулоновских вкладов относительно циклотронной энергии. В появившихся сравнительно недавно системах на основе гетероперехода ZnO/MgZnO взаимодействие на порядок сильнее, а сильное смешивание уровней Ландау качественным образом затрудняет теоретическое описание коллективных эффектов, так как даже точный вид основного состояния системы неизвестен. В этих условиях было снова проведено экспериментальное исследование обменной энергии рассеянием света на коллективном возбуждении CSFE.

В настоящей работе было проведено экспериментальное исследование обменной энергии в сильновзаимодействующих двумерных электронных системах на основе ZnO. Методом неупругого рассеяния света на коллективных спиновых возбуждениях в состоянии КЭХ □=1 было установлено [2], что в системах с параметром взаимодействия Вигнера-Зейтса r_s>7, обменная энергия электронов *имеет масштаб циклотронной энергии* , качественным образом отличающийся от ожидаемой величины $e^2/\varepsilon\ell_B$ - кулоновской энергии на расстоянии магнитной длины. Причиной нетривиального поведения обменной энергии является сильное смешивание уровней Ландау, приводящее к эффективной перенормировке кулоновского взаимодействия при $r_s >> 1$. В работе показано, что хорошую оценку многочастичного вклада в энергию коллективных возбуждений можно получить даже в этом пределе, проводя вычисления все же в проекции на несколько нижайших уровней Ландау, но заменяя влияние остальных уровней введением статической диэлектрической функции в Фурье-компоненту Кулоновского потенциала. Вычисления как методом Хартри-Фока, так и методом точной диагонализации энергетического спектра электронов дают хорошее согласие с экспериментом.

[1] A.B. Van'kov, L.V. Kulik, I.V. Kukushkin et al., Phys. Rev. Lett. ***97****, 246801 (2006).*

[2] A. B. Van'kov, B. D. Kaysin, S. Volosheniuk, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 100, 041407(R) (2019).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.055

ПОВЫШЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ *AB INITIO* ПОИСКА ФОРМЫ НАНОЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

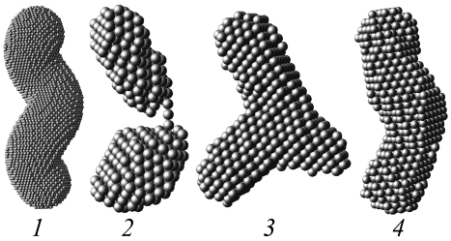
Волков В.В.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия, volkicras@mail.ru

Определение трехмерной формы частиц по одномерным данным интенсивности рентгеновского или нейтронного малоуглового рассеяния $I(s)$ неоднозначно (s – модуль вектора рассеяния). К тому же, в силу плохой обусловленности обратной задачи, решение неустойчиво и зависит от параметров алгоритма поиска. Следовательно, на практике необходимо не только оценивать степень стабильности решения, но и подбирать параметры как метода решения, так и самой модели. К настоящему времени разработано несколько методов *ab initio* восстановления формы с использованием модели малых объемных элементов, чаще всего шариков [1–3]. Поиск решения (пространственного размещения шариков) ведут с помощью методов глобальной минимизации, например, моделирования отжига (simulated annealing) [1, 2] или с помощью генетических алгоритмов [3]. Алгоритм, основанный на методе моделирования отжига, оказался исключительно эффективным в силу ряда алгоритмических решений, в частности из-за отказа от вариации на каждом шаге поиска всех параметров модели (число параметров равно числу узлов в прямом пространстве, в которых могут быть размещены шарики модели). Вместо этого проводят варьирование только одного параметра, выбираемого случайным образом. В нашей работе предложена тактика поиска, реализованная в программе DAMMINV, заключающаяся в перемежающемся режиме определения набора моделей формы частицы, представленной в виде структуры, состоящей из плотноупакованных шариков малого размера. Набор решений получают при периодическом варьировании относительного вклада членов минимизируемой целевой функции: критерия отклонения модельной кривой рассеяния от экспериментальной, штрафов за рыхлость и разрыв структуры тела, за отклонение среднего числа контактов шариков от заданного значения, и др.

Важно также подобрать оптимальную весовую функцию $W(s)$, на которую умножаются интенсивности рассеяния перед расчетом невязки с целью перераспределения в невязке вкладов от разных частей углового диапазона данных.

Приведены примеры решения как модельных задач, так и определения формы биомолекул по измерениям, выложенным в банке структур SASBDB.



Типичные результаты восстановления формы частицы 1 по теоретическим данным рассеяния: 2 – программа DAMMIN [1], $W(s) = s^2$; 3 – DAMMINV, $W(s) = s^2$, перемежающийся режим; 4 – DAMMINV, $W(s) = s$, перемежающийся режим).

Работа выполнена в сотрудничестве с группой Д.И. Свергуна (EMBL c/o DESY, Hamburg) и поддержана грантом Российского научного фонда № 19-14-00244, а также Минобрнауки России в рамках Государственного задания ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН в части развития программного обеспечения.

1. Svergun D.I. // Biophys. J. – 1999. V. 76. P. 2879–2886.
2. Franke D., Svergun D.I. // J. Appl. Cryst. – 2009. V. 42. P. 342-346.
3. Chacon P., Moran F., Díaz J.F. et al. // Biophys. J. – 1998. V. 74. P. 2760– 2775.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.056

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ $Bi_{1-x}Sb_x$

Герега В.А., Суслов А.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Колобов А.В.

РГПУ им. А.И. Герцена,
г. Санкт-Петербург, Россия, gerega.vasilisa96@gmail.com

В настоящей работе рассматриваются результаты исследования структуры, электрических и гальваномагнитных свойств тонких пленок твердого раствора $Bi_{1-x}Sb_x$ (x = 0.05 и 0.12) на подложке из слюды в диапазоне толщин 10–30 нм. Этот диапазон соответствует ранее обнаруженному в тонких пленках чистого висмута переходу температурной зависимости удельного сопротивления к металлическому виду при толщине менее 18 нм. Как предполагается в работе [1], этот эффект связан с изменением положения экстремумов валентной зоны и зоны проводимости, которое обусловлено наличием деформации растяжения в пленке, возникающей за счет различия коэффициентов температурного расширения висмута и подложки. При этом механизм возникновения эффекта остается под вопросом, так как на него могут влиять проявления топологических состояний или же сильные изменения параметров кристаллической решетки в ультратонких образцах. В связи с этим интерес представляет исследование свойств тонких пленок твердого раствора висмут-сурьма того же диапазона толщин, так как добавление сурьмы, с одной стороны, приводит к известным изменениям параметров кристаллической решетки [2], а, с другой, состояние топологического изолятора экспериментально обнаружено в этих твердых растворах.

Образцы получены методом непрерывного термического испарения в высоком вакууме на подложках из слюды. С помощью метода атомно-силовой микроскопии установлено, что размер кристаллитов на порядок больше толщины пленки. Электрические и гальваномагнитные свойства тонких пленок измерялись при постоянном токе и магнитном поле до 0.7 Тл в диапазоне температур 77–300 К.

Электрические и гальваномагнитные свойства составов $Bi_{0.95}Sb_{0.05}$ и $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ в исследованном диапазоне значительно различаются. На температурных зависимостях удельного сопротивления $Bi_{0.95}Sb_{0.05}$ не обнаружено перехода к металлическому виду, однако, на зависимостях $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ он обнаружен. Коэффициент Холла пленок $Bi_{0.95}Sb_{0.05}$ большей толщины на подложках из слюды имеет отрицательный знак, в то время как во всех исследованных образцах он положителен. При этом для $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ характерно изменение знака коэффициента Холла с отрицательного (наблюдается у пленок большей толщины) на положительный при толщинах менее 18 нм.

Значения магнетосопротивления образцов весьма малы, что затрудняет расчет концентрации носителей заряда и параметров зонной структуры на основе двухзонного приближения. В связи с этим в дальнейшем предполагается проведение моделирования на основе теории функционала плотности и сравнение с полученными экспериментальными результатами.

Благодарности.
Работа выполнена при финансовой поддержке Минпросвещения России (проект № FSZN-2020-0026).

Демидов Е.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Каблукова Н.С., Крушельницкий А.Н. // ФТП. – 2018. – Т. 60. – № 3. С. – 452-455.
Грабов В.М., Комаров В.А., Каблукова Н.С. // ФТТ. – 2016. – Т. 58. – № 3. С. – 605-611.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.057

ОСОБЕННОСТИ ФОТОПРОВОДИМОСТИ И ЭФФЕКТА ПОЛЯ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ СОЕДИНЕНИИ TiS_3

Горлова И.Г., Никонов С.А., Зыбцев С.Г., Покровский В.Я.

ИРЭ им. В.А.Котельникова РАН г. Москва, Россия, gorl@cplire.ru

Особый интерес к квазиодномерным проводникам связан с образованием в них волны зарядовой плотности (ВЗП) [1]. Исследование температурной зависимости проводимости, σ, квазиодномерного слоистого полупроводника TiS_3 указывает на 2 фазовых перехода в коллективное состояние [2]. При температурах 50 K и 15 K наблюдаются максимумы $-d\ln\sigma/d(1/T)$, ниже 50 K проводимость становится нелинейной. Эти свойства характерны для пайерлсовских проводников, таких как NbS_3 и TaS_3. Однако прямого подтверждения образования ВЗП пока нет, так как нет надежных данных исследования кристаллической и электронной структуры кристалла при низких температурах. В настоящей работе исследовано воздействие излучения ИК, ВЧ диапазонов, а также эффекта поля на температуры предполагаемых переходов и нелинейную проводимость вискеров TiS_3.

Исследование фотопроводимости показало, что при понижении температуры, T, от 300 K фотопроводимость растет, проходит через максимум при 50 K, и уменьшается при дальнейшем понижении температуры. Вторая особенность находится вблизи T=15 K, при которой происходит резкий спад фотопроводимости.

Зависимости проводимости от смещения на затворе V_g были измерены в диапазоне температур от 300 K до 4.2 K. В области 50 K наблюдается максимум чувствительности проводимости к V_g, $d\ln\sigma/dV_g$. При температурах T > 50 K нелинейная проводимость слабо зависит от V_g, а при T < 50 K возрастает с ростом V_g и с понижением температуры. При этом дифференциальная проводимость при T = 4.9 K и V_g =+8В даже больше, чем при T = 29 K.

При облучении ВЧ полем с частотой 10 МГц линейная проводимость увеличивается без существенного изменения формы ВАХ. Похожее поведение наблюдалось ранее в дефектных образцах с ВЗП. Это означает, что если ВЗП образуется в TiS_3, она состоит из отдельных некогерентных кусков.

Таким образом, обнаружены особенности фотопроводимости и эффекта поля в TiS_3 при температурах 50 K и 15 K, при которых ранее наблюдались максимумы $d\ln\sigma/d(1/T)$, что указывает на изменение электронного спектра при этих температурах, возможно, связанное с образованием ВЗП.

Работа поддержана РФФИ (гранты 20-02-00827 и 20-32-90231).

P. Monceau, Adv. Phys. – 2012. – V. 61. – P.325.
Горлова И.Г., Покровский В.Я., // Письма в ЖЭТФ – 2009. – Т.90. – С.320-324.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.058

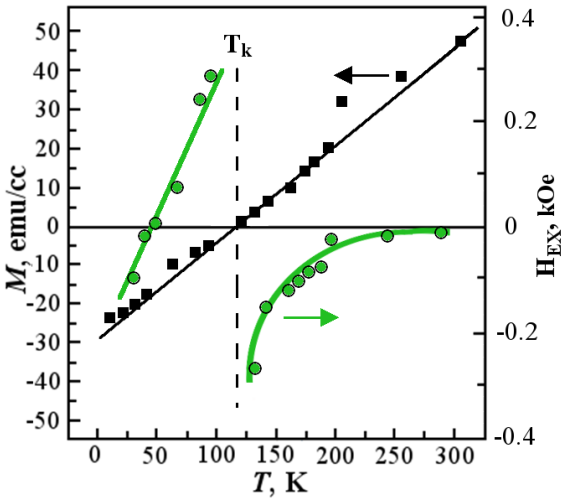
КИНЕТИКА ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ОБМЕННО-СВЯЗАННОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ GdFeCo /IrMn ВБЛИЗИ ТОЧКИ КОМПЕНСАЦИИ ФЕРРИМАГНИЕТИКА

[1]Горнаков В.С., [1]Шашков И. В., [1]Кабанов Ю.П., [2]Коплак О.В.
[1]Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия
[2]Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия
E-mail: gornakov@issp.ac.ru

Исследована кинетика преобразования доменной структуры в ферримагнитной (ФМ) плёнке, обменно связанной с антиферромагнитным (АФМ) слоем, в широком диапазоне температур. Такие FM/AFM гетероструктуры является перспективными при создании новых элементов спинтроники благодаря использования в них аморфной интерметаллической плёнки GdFeCo с перпендикулярной магнитной анизотропией обладающей сверхбыстрым переключением намагниченности под действием фемтосекундных лазерных импульсов. Зависимость гистерезисных характеристик в таких гетероструктурах от температуры будет в значительной степени определяется преобразованием магнитной структуры ферримагнитного слоя, обладающего сильной температурной зависимостью намагниченности и, как правило, температурой компенсации.

Гетероструктура Ta(3нм)/Pt(3нм)/$Gd_{21.6}Fe_{67.8}Co_{10,5}$(20нм)/$Ir_{20}Mn_{80}$(7нм)/Pt(5нм) была выращена магнетронным напылением на стеклянной подложке размером (5x5)мм^2. Макроскопические петли гистерезиса были получены с помощью СКВИД-магнитометра в поле, параллельном оси однонаправленной анизотропии. Микроскопические процессы перемагничивания в образцах изучались с помощью магнитооптического эффекта Керра.

Показано, что зависимость магнитного момента M двухфазной плёнки GdFeCo/IrMn от температуры, полученной из измерений петель гистерезиса, является практически линейной в области температуры компенсации T_K=120K (см. рисунок). Установлено, что при приближении температуры к точке компенсации, поле однонаправленной анизотропии H_{EX} растёт и меняет знак на противоположный (см. рисунок), претерпевая разрыв вблизи T_K. Показано, что поле коэрцитивности H_C также растёт при T, стремящемся к T_K.



Анализ экспериментальных данных, полученных при визуализации доменной структуры с использованием эффекта Керра вблизи температуры компенсации показывает, что перемагничивание гетероструктуры происходит через зарождение доменов и движение гибридных FM/AFM доменных стенок. Показано, что при $T>T_K$ переключение образца из основного состояния в новое метастабильное состояние происходит с образованием спиновой пружиной в IrMn, а при $T<T_K$, наоборот, переключение происходит из метастабильного состояния в основное. Установлено, что обменное взаимодействие на интерфейсе между ионами Fe-Co FM-слоя и ионами IrMn AFM-слоя остаётся неизменным при прохождении T через точку компенсации T_K.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.059

БАКТЕРИЦИДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА

Гудзь К.Ю.[1], Антипина Л.Ю.[1], Игнатов С.Г.[2], Штанский Д.В.[1]

[1]*Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС», г. Москва, Россия,* kristinkagudz@mail.ru

[2]ФБУН «Государственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии», г. Оболенск, Россия

Борьба с постоперационной инфекцией является важной научной и социальной проблемой. Несмотря на рост количества резистивных к антибиотикам штаммов бактерий, медикаментозная терапия остается основным методом борьбы с инфекцией. Применение новых материалов, насыщенных лекарственными препаратами, позволит существенно снизить фармацевтическую нагрузку на организм за счет доставки бактерицидного препарата непосредственно в область возникновения инфекции. Целью данной работы является разработка различных поверхностей с высокой бактерицидной активностью в отношении патогенных микроорганизмов на основе гексагонального нитрида бора (*h*-BN), допированного частицами серебра (Ag) и различными антибиотиками.

Наночастицы *h*-BN были получены в процессе химического осаждения из газовой фазы при взаимодействии аммиака с парами оксида бора (BO, B_2O_2), образующимися в результате термической диссоциации бороксидного прекурсора [1]. Осаждение частиц Ag осуществляли методом ультрафиолетового разложения нитрата серебра ($AgNO_3$). Далее наночастицы *h*-BN были насыщенны терапевтическими препаратами, бактерицидного и фунгицидного действия (гентамицин, амфотерицин B). Концентрации антибиотиков выбиралась на основе результатов анализа склонности наночастиц к агломерации и измерения заряда поверхности наночастиц. Был изучен состав поверхности исходных и поверхностно-модифицированных наночастиц *h*-BN. Методами математического моделирования было подтверждено, что антибиотики по-разному связываются с поверхностью h-BN и Ag, что влияет на общую загрузку и, следовательно, на десорбционные свойства наночастиц.

Согласна результатам биологических исследований наночастицы, загруженные гентамицином, оказали сильное антибактериальное действие против 38 типов штаммов бактерий кишечной палочки (*E. Coli)*, 2 типов штаммов золотистого стафилококка (*S. Aureu)*s и 2 типов штаммов синегнойной палочки (*P. Aeruginosa)*. После высаживания наночастиц серебра на поверхность, спектр действия материалов увеличился до 47 типов штаммов *E. Coli*. Кроме того, наночастицы с противогрибковым антибиотиком амфотерицином B показали высокую фунгицидную активность против штаммов грибов *C. Albicans*, *C. auris*, *C. parapsilosis* и *N. crassa*.

Благодарности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90040.

Kovalskii, A.M., Matveev, A.T., Lebedev, O.I., Sukhorukova, I.V., Firestein, K.L., Steinman, A.E., Shtansky, D.V., Golberg, D. // Cryst. Eng. Comm. – 2016 – № 18 – C. 6689-6699.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.060

КИНЕТИКА РОСТА НАНОПРОВОЛОК ИЗ СПЛАВА FE-NI В ТРЕКОВЫХ МЕМБРАНАХ

Долуденко И.М.[2,1], Бограчев Д.А.[2]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Ленинский пр-т, д.59, г. Москва
[2]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Мясницкая 20, г. Москва , doludenko.i@yandex.ru

В настоящее время большой интерес в науке уделяется нано-структурам. Одномерные наноструктуры- нанопроволоки (НП) обладают комбинацией уникальных свойств и привлекают особое внимание. Целью представляемой работы было установления динамики роста НП из сплава железо-никель получаемых методом гальванического заполнения трековых мембран (матричным синтезом). В работе были проведены исследования скорости роста НП, выхода по току на различных этапах заполнения матрицы, проведены расчеты для точного контроля заполняемости пор, которые были проверены на практике.

В качестве матрицы применялись «промышленные» трековые мембраны (производства ОИЯИ, г. Дубна). Для заполнения пор использовался электролит описанный в работе [1]. Были получены образцы НП с разным временем заполнения. После образцы исследовались методом РЭМ с торца образца, оценивалась степень заполнения пор (длинна НП). Показано, что НП практически повторяют форму пор, а диаметр увеличивается на 10-15%, что связано с окислением на воздухе.

Степень заполнения пор от времени имеет нелинейный характер. По полученным данным рассчитывались скорость роста, протекший заряд и выход по току на каждом участке (этапе) заполнения пор. Изменения показателя выхода по току соответствует изменениям скорости роста. Среднее значение выхода по току составляет 48,4%.

На первом этапе наблюдается снижение скорости роста, это объясняется скачком тока в начале осаждения и насыщенностью электролита вблизи рабочей зоны с дальнейшим обеднением электролита вблизи рабочей зоны. Далее, наблюдается линейное увеличение скорости роста, предположительно связанное с ростом диффузионного слоя до выхода его на поверхность матрицы. Предполагается, что в дальнейшем образуется общий диффузионный слой, который захватывает все поры – скорость роста стабилизируется. Она сохраняется до образования локальных переростов – полного заполнения матрицы в случайных участках, связанное с неоднородностью роста НП. После заполнение некоторых пор (локальных переростов) на поверхности матрицы образуются «шляпки». При продолжении процесса осаждение преимущественно идет на шляпках за счет их большей площади и меньшего диффузионного слоя. Таким образом, скорость роста общего фронта роста НП в порах матрицы падает. Методом линейной интерполяции была выведена функция длинны НП в зависимости от времени осаждения, Результаты расчетов проверены на практике.

Благодарности.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Растровая электронная микроскопия проводилась на оборудовании ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Долуденко И.М., Загорский Д.Л., Фролов К.В. и др. // Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62. Вып. 9. С. – 12

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.061

ОСОБЕННОСТИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ДИОДОВ С CoPt ИНЖЕКТОРОМ В СИЛЬНЫХ И СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Дорохин М.В.[1], Дёмина П.Б.[1], Здоровейщев А.В.[1], Зайцев С.В.[2], Кудрин А.В.[1]

[1]*Нижегородский университет им. Н.И. Лобачевского,*
г. Нижний Новгород, Россия, dorokhin@nifti.unn.ru
[2] *Институт физики твердого тела Российской академии наук,*
г. Черноголовка, Россия

Спиновые светоизлучающие диоды на основе полупроводниковых гетероструктур InGaAs/GaAs/CoPt являются компактным и простым вариантом источника циркулярно-поляризованного света, работающего при комнатной температуре [1]. Работа таких приборов основана на инжекции спин-поляризованных носителей из намагниченного CoPt электрода в полупроводниковую гетероструктуру. Параметры спиновой инжекции определяются магнитными свойствами электрода; в частности, ранее нами был обнаружен эффект прецессии спин-поляризованных носителей в поперечном магнитном поле, образованным вследствие неоднородного намагничивания контакта CoPt [1].

В настоящей работе представлены результаты исследований влияния неоднородной намагниченности CoPt на явление спиновой прецессии. С этой целью были выполнены измерения циркулярной поляризации электролюминесценции в двух диапазонах магнитных полей: в слабом поле (до 0,3 Тл), обеспечивающем намагничивание слоя CoPt и в сильном поле (до 5 Тл), оказывающим существенное влияние как на магнитные характеристики плёнки, так и на процессы спиновой инжекции и спинового транспорта. Полупроводниковые структуры были сформированы методом МОС-гидридной эпитаксии, ферромагнитный контакт формировался на следующей стадии методом электронно-лучевого испарения. Подробно методика получения описана в [1]. Исследования в малых магнитных полях от 0 до 300 мТл проводились при 10К в криостате замкнутого цикла. Исследования в магнитных полях до 5 Тл проводились при 2К в проточном гелиевом криостате со сверхпроводящим соленоидом.

На магнитополевой зависимости степени циркулярной поляризации электролюминесценции (ЭЛ) структур наблюдаются два характерных участка. В малом поле циркулярная поляризация ЭЛ повторяет магнитополевую зависимость намагниченности, описывает петлю гистерезиса и выходит на насыщение примерно в 0,3 Тл. Подобие магнитополевых зависимостей намагниченности и степени поляризации позволяет связать последнюю с инжекцией спин-поляризованных носителей из намагниченного CoPt электрода. Значение степени поляризации зависит от положения активной области (квантовой ямы) относительно CoPt инжектора. В сильном магнитном поле для ряда структур было зарегистрировано дополнительное линейное по полю повышение степени циркулярной поляризации, не связанное с Зеемановским расщеплением уровней. Полученный эффект связывается с дополнительным намагничиванием CoPt электрода в сильном магнитном поле.

Благодарности.
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 21-79-20186).

Dorokhin M.V., Ved' M.V., Demina P.B., Zdoroveyshchev A.V., Kudrin A.V., Rykov A.V., Kuznetsov Yu.M. // Phys. of the Sol. St. – 2017. – V.59, I.11. – P.2155-2161.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.062

НАНОПРОВОЛОКИ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ: ПОЛУЧЕНИЕ, ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ, ВОЗМОЖНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ

Загорский Д.Л., Долуденко И.М., Муслимов А.И., Черкасов Д.А., Жигалина О.М., Хайбуллин Р.И.*

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Ленинский пр-т,59, Москва, Россия,
**КФТИ им Завойского- ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*
dzagorskiy@gmail.com

Наноматериалы различных типов представляют огромный интерес как с точки зрения теории, так и в плане возможных практических применений. Один из интереснейших типов наноматериалов–это одномерные структуры, т.н. «нанопроволоки» (НП, - нанонити, нанопровода). Такие структуры могут быть получены методом матричного синтеза- заполнением требуемым материалом цилиндрических сквозных пор в заранее приготовленной матрице, например- в трековой мембране. В настоящей работе рассмотрено получение как однородных структур (НП из сплавов), так и гетерогенных структур (слоевые НП).

Синтез НП из сплавов проводился в потенциостатическом или гальваностатическим режимах, с получением контрольного графика (записью зависимости (соответственно, тока или напряжения) от времени). Синтез слоевых НП проводился двумя способами- т.н. «однованновым» или «двухванновым». В первом случае использовался один электролит, содержащий требуемые ионы. Чередование осаждения различных металлов достигалось путём чередование потенциала осаждения. Во втором случае чередование различных слоёв достигалось путём использования различных электролитов («ванн»).

Исследование структуры получаемых НП проводилось методами микроскопии- СЭМ (с элементным анализом) и ПЭМ, а также рентгеновским методом. Показано, что состав НП из железо-кобальтового сплава практически соответствует составу ростового электролита. В то же время, в железо-никелевых НП содержание железа значительно превышало его содержание в электролите. Структура железосодержащих НП в большинстве случаев определяется структурой железа (ОЦК). Лишь в случае высоких концентраций второго элемента кобальта или никеля (более 70-85%) - наблюдается соответственно ГПУ или ГЦК структура.

Магнитометрия показала, что для массивов НП с достаточно большим диаметром (200 нм и более) наблюдаемые свойства близки к свойствам объёмных материалов: кобальтовые НП были сравнительно магнито-жёсткими (КС- 700-1000 Э), а никелевые НП- магнито-мягкими (КС около 100 Э). В то же время, уменьшение диаметра в никелевых НП приводило к резкому росту коэрцитивной силы. Для слоевых НП ось лёгкого намагничивания совпадала с осью НП в случае толщины слоёв большей чем диаметр проволоки. При уменьшении же толщины слоёв лёгкая ось была перпендикулярна оси НП.

Рассмотрены возможности применения массивов НП в качестве эмиттеров (острийный эффект в конических НП), в качестве заготовок для получения магнитных частиц калиброванных размеров (путём разделения слоевой НП на фрагменты) для применения в биологии (доставка лекарств) и в качестве генераторов излучения Терагерцовой частоты (протекание спин-поляризованого тока через переходы между различными магнитными слоями в НП).

Благодарности. Авторы благодарят П.Ю.Апеля (ОИЯИ, Дубна) за предоставление мембран. Работа проводилась в рамках Госзадания ФНИЦ «КиФ» РАН

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.063

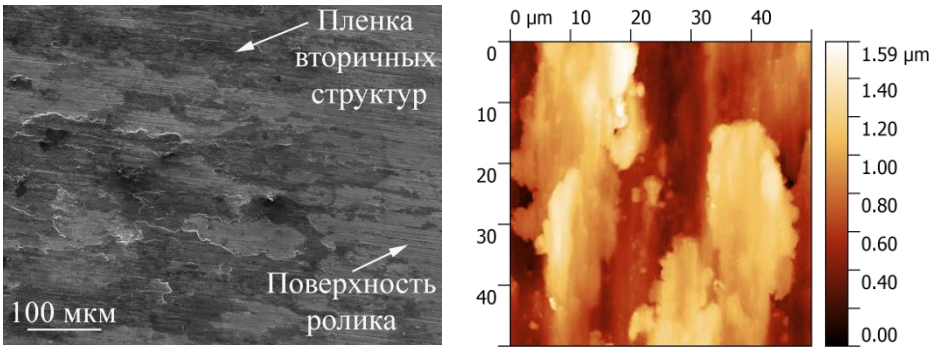
ИЗУЧЕНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПЛЕНКИ ВТОРИЧНЫХ СТРУКТУР ПРИ СКОЛЬЖЕНИИ ПАРЫ ТРЕНИЯ «АЛЮМИНИЕВЫЙ СПЛАВ – СТАЛЬ»

Муравьева Т.И.[1], Шкалей И.В.[1], Щербакова О.О.[1], Загорский Д.Л.[2]

[1] *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Россия*
[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», г. Москва, Россия,* muravyeva@list.ru

Антифрикционные алюминиевые сплавы всё чаще используются в современном машиностроении, в том числе и при изготовлении узлов трения. Особенностью таких сплавов является выделение в процессе трения мягкой фазовой составляющей, на основе которой на контактной поверхности формируется пленка вторичных структур (ВС). Изучению этого процесса посвящена данная работа. Объектом исследования служил экспериментальный сплав на основе системы Al–20%Sn–5%Si. Условия эксплуатации моделировались на трибометре Т-05 по схеме колодка (из сплава) – ролик (из стали Ст45). Изучение поверхности образцов проводили с использованием электронной (РЭМ Quanta 650) и зондовой (АСМ «Smart SPM™») микроскопии.

Исследования показали, что в процессе трибоиспытаний на поверхности образуется характерный рельеф. Установлено, что при увеличении давления и скорости на контактных поверхностях происходит выделение мягкой фазы и массоперенос элементов. Данный эффект в сочетании со сложными механическим и физико-химическими процессами, протекающими в зоне контакта, приводит к образованию пленки ВС. В случае стандартных испытаний в смазке, на ролике формируется равномерно распределенная пленка ВС, защищающая поверхность от разрушения [1]. В данной работе испытания проводили по экспресс-методике – без смазки. На рис. 1 приведено изображение поверхности ролика после испытаний при давлении 1,0 МПа и скорости 1 м/с.



СЭМ-изображение АСМ-изображение

Рисунок 1. Изображения поверхности ролика после трибологических испытаний

Рисунок демонстрирует пленку ВС, неравномерно распределённую на поверхности, и формирование соответствующего развитого рельефа. Этот процесс впоследствии может приводить к задиру. Из проведенных исследований следует, что сплав обладает хорошими антифрикционными свойствами, в частности, образуется пленка ВС. Однако, в различных условиях трения пленка ВС может как защищать поверхность от разрушения, так и способствовать задиру.

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации АААА-А20-120011690132-4) и частично поддержана грантом РФФИ №20-58-00007 (отработка методики определения параметров пленки вторичных структур).

Щербакова О.О., Муравьева Т.И., Загорский Д.Л., Мезрин А.М., Сачек Б.Я. // Физическая мезомеханика. – 2018. – Т. 21. – № 4. – С. 97-106.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.064

ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОПОВОЛОК РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ ИЗ СПЛАВОВ 3D-МЕТАЛЛОВ

Хайретдинова Д.Р.[1], Луккарева С.А.[1], Мельникова П.Д.[1], Долуденко И.М.[2], Панина Л.В.[1], Загорский Д.Л.[2]

[1]НИТУ «МИСиС», Ленинский пр-т,4, Москва, Россия
[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Ленинский пр-т,59, Москва, Россия

griadine@gmail.com

В работе исследовались массивы металлических нанопроволок (НП) различных типов, полученные методом матричного синтеза в порах полимерных трековых мембран (ТМ). Использовались ТМ производства ОИЯИ (г. Дубна) с толщиной 12 мкм, с диаметрами пор от 30 до 200 нм и поверхностной плотностью пор $1{,}2*10^9$. Были выращены железо-никелевые НП с одинаковым содержанием Fe (около 22%) и с различным диаметром -30,100 и 200 нм. Измерение петель гистерезиса показало, что коэрцитивная сила (H_c) возрастает с уменьшением диаметра образцов. Так , если у НП с диаметром 200 нм и 100 нм она составляла 45 Э и 65 Э, соответственно, то в НП с диаметром 30 нм значение H_c достигало 700 Э. Поскольку FeNi сплавы в объемном состоянии являются магнитомягкими, увеличение коэрцитивности обусловлено магнитной анизотропией формы при доминировании процессов когерентного вращения намагниченности.

Объёмные сплавы железа и кобальта имеют большую намагниченность насыщения (M_s) и применяются в устройствах магнитной памяти. Актуальным является поиск путей получения материалов, имеющих как высокую намагниченность насыщения, так и большую коэрцитивную силу. Предполагается, что получение одномерных наноструктур на основе FeCo сплавов также позволит добиться значительного увеличения H_c за счет сильной магнитной анизотропии формы. Исследованы НП FeCo с одинаковым диаметром (100 нм), но с различной концентрацией железа (от 7% до 83%). Показано, что H_c (при приложении магнитного поля как параллельно, так и перпендикулярно оси НП) нелинейно зависит от содержания Fe, уменьшаясь в области высокой концентрации Fe. Максимальные значения H_c (360 Э) соответствуют составу сплава, близкому к эквиатомному. Во всех случаях большие значения H_c и коэффициента прямоугольности достигаются при поле, приложенным вдоль оси роста проволок. Очевидно, это является следствием анизотропии формы и ориентации магнитных моментов в НП вдоль оси роста. Для увеличения H_c будет необходимо уменьшить размер пор для достижения однодоменного состояния.

Слоевые структуры с чередованием слоев из магнитных и немагнитных материалов представляют интерес в качестве сенсоров и датчиков магнитного поля (за счёт эффекта гигантского магнитного сопротивления -ГМС). В работе исследовался эффект ГМС в массивах НП Ni/Cu с толщиной слоев Ni 7,5 и 30 нм. Величина магнитосопротивления в исследуемых структурах составила от 0,6 до 1%. Были получены петли гистерезиса для образцов с различной толщиной слоев магнитного материала при приложении магнитного поля вдоль и перпендикулярно оси НП. Показано, что H_c уменьшается при увеличении толщины слоя Ni и слабо зависит от ориентации образца в магнитном поле.

Благодарности. Синтез и микроскопия НП выполнены в рамках Госзадания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, магнитных свойств изучены в НИТУ «МИСиС»

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.065

МЕХАНИЗМ РАЗЛОЖЕНИЯ ФЕРРОЦЕНА ПРИ 8 ГПА И ВЫСОКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ С ОБРАЗОВАНИЕМ НАНОКОМПОЗИТОВ ТИПА ЯДРО@ОБОЛОЧКА

Заяханов В.А.[1], Старчиков С.С.[1], Любутин И.С.[1], Васильев А.Л.[1], Никифорова Ю.А.[1], Фунтов К.О.[1], Любутина М.В.[1], Куликова Л.Ф.[2], Агафонов В.Н.[3], Давыдов В.А.[2]

[1]*Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия, zaiahanov@gmail.com*
[2]*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк Москва, Россия*
[3]*Francois Rabelais University, GREMAN, UMR CNRS 7347, 37200 Tours, France*

В настоящее время особое внимание уделяется биомедицинским применениям наноструктур типа ядро@оболочка на основе карбидов железа. Высокие магнитные характеристики и биосовместимость этих материалов позволяют использовать их в адресной доставке лекарств, гипертермии, в качестве контрастных агентов для МРТ [1]. Одним из способов получения подобных нанокомпозитов является разложение ферроцена $Fe(C_5H_5)_2$ при высоком давлении и температуре. Этот метод позволяет получать наноструктуры типа ядро@оболочка различного размера и фазового состава. Основной задачей данной работы является изучение механизма разложения ферроцена при давлении 8 ГПа и температуре 900 °C при различном времени изотермической выдержки *t* от 10 до 10000 секунд.

Установлено, что при коротком *t* полученные нанокомпозиты имеют средний размер около 10 нм, и в основном состоят из оксидов железа, инкапсулированных в матрицу из графитизированного углерода. Увеличение *t* до 1000 с приводит к образованию структур ядро@оболочка с общим размером около 30-50 нм и толщиной оболочки около 5-7 нм (рис. 1). При этом ядро нанокомпозита состоит из карбида железа Fe_7C_3 с ромбической кристаллической структурой, а в оболочке присутствует как аморфный углерод, так и частицы оксидов железа $Fe_3O_4/\gamma\text{-}Fe_2O_3$ размером несколько нанометров. На основе полученных результатов сделаны выводы о механизме разложения ферроцена при высоком давлении и температуре [2].

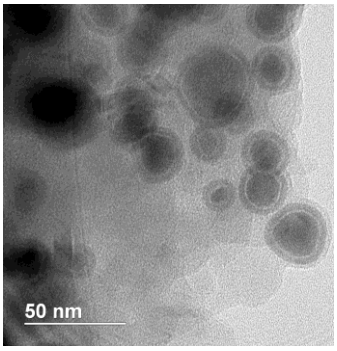


Рис.1 ПЭМ изображение продуктов разложения ферроцена при времени выдержки 1000 с

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-00095) в части анализа порошковых рентгенограмм, проведения мёссбауэровских и рамановских экспериментов, обработке и анализу результатов.

Tian X. et al. Functional magnetic hybrid nanomaterials for biomedical diagnosis and treatment // Wiley Interdiscip. Rev. Nanomedicine Nanobiotechnology. 2018. Vol. 10, № 1. P. 1476.
S.S. Starchikov, et. al, Core@shell nanocomposites Fe7C3 / FexOy /C obtained by high pressure-high temperature treatment of ferrocene Fe(C5H5)2, // Carbon. 2021.Vol.178, P.708.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.066

КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ ПРОВОДНИКЕ NbS_3 С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ.

Зыбцев С.Г., Никонов С.А., Покровский В.Я.

ИРЭ им. В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия zybt@cplire.ru

В квазиодномерных проводниках с волной зарядовой плотности (ВЗП) узкополосная генерация и ступеньки Шапиро могут наблюдаться только при достаточной когерентности скольжения ВЗП, которая определяется, прежде всего, совершенством кристаллов. Влияние контактов на когерентность ВЗП практически не исследовалось.
Известно, что при движении ВЗП вблизи токовых контактов происходит так называемый процесс проскальзывания фазы (ПФ). При конверсии тока квазичастиц в ток ВЗП (и наоборот) происходит подавление пайерлсовской щели, что проявляется в появлении избыточного напряжения, – напряжения ПФ, V_{ps}. В 1D случае V_{ps} должно быть равно энергии щели ВЗП в эВ, но эксперимент обычно показывает напряжение порядка нескольких мВ. Это объясняется тем, что конверсия проходит через образование дислокаций (дислокационных петель) ВЗП.
Нами выращены совершенные кристаллы квазиодномерного проводника NbS_3 моноклинной фазы [1], на которых были проведены исследования контактных явлений. В этих кристаллах ВЗП-1 образуется при температуре пайерлсовского перехода T_{P1}=365 K, ниже которой проводимость падает с энергией активации Δ=2000 K. Наблюдается высокая степень синхронизации скольжения ВЗП при облучении СВЧ полем.
Контактные явления изучались в 2-хсекторной и 4-хзондовой схемах. В 2-хсекторной схеме сравнивались ВАХ длинного и короткого секторов, в 4-хзондовой схеме – ВАХ при 2-хзондовых и 4-хзондовых измерениях. На основе полученных данных оценивалась величина V_{ps} и длина области ПФ, L_{ps}. Получены следующие результаты:
1) Показано, что как и в [2], где исследования проводились на $NbSe_3$, избыточное напряжение обусловлено не столько непосредственно деформацией ВЗП в области ПФ, сколько распределением процесса конверсии тока ВЗП на макроскопической длине L_{ps}. V_{ps} растет при увеличении нелинейного тока и с понижением температуры. L_{ps} уменьшается с увеличением тока, растет с уменьшением температуры, но, в отличии от [2], при температурах меньше 200 K резко падает.
2) В 4-хзондовой схеме получены невозмущающие потенциальные контакты, для которых использованы нановискеры NbS_3. В этой конфигурации впервые удалось получить полную синхронизацию ВЗП, когда ступенька Шапиро представляет собой область постоянного тока ВЗП.
3) В 4-хзондовой схеме при воздействии СВЧ пороговые поля оказываются больше, чем в 2-хзондовой, что неожиданно. Такое поведение может быть связано только с неоднородностью тока ВЗП на длине L_{ps}: ВЗП теряет свою когерентность на макроскопической длине, что делает невозможным получить полную синхронизацию в 2-хзондовой схеме.

Работа поддержана РФФИ (гранты 20-02-00827 и 20-32-90231).

1. S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, et al. // Phys. Rev. B. – 2017. – V. 95. – P. 035110.
2. J. C. Gill, // Phys. Rev. Lett. – 1993. – V. 70. – P. 331

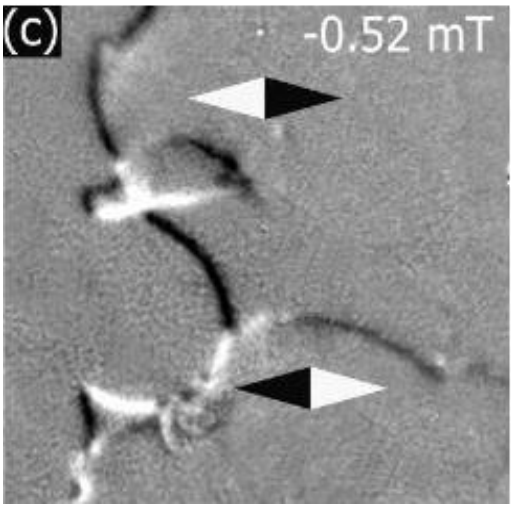
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.067

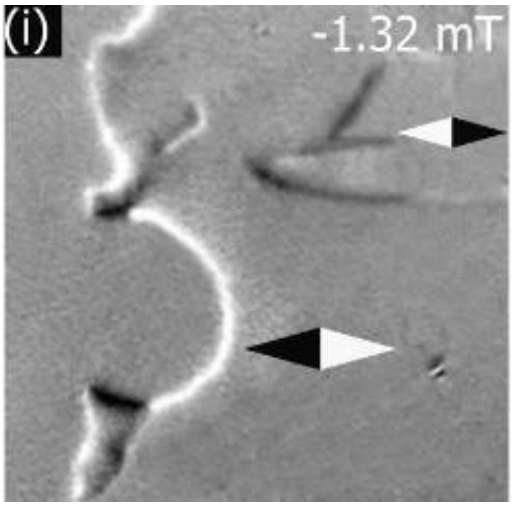
ДИНАМИКА ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА ОБМЕННО-СВЯЗАННОГО С СИНТЕТИЧЕСКИМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОМ

Yury P. Kabanov a,b, Robert D. Shull a, Chao Zheng c, Philip W.T. Pong c, Daniel B. Gopman a, Ivan V. Shashkov b

a *Materials Science and Engineering Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 20899, USA*
b *Institute for Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka 142432, Russia*
c *Department of Electrical and Electronic Engineering, University of Hong Kong, Hong Kong,*
kabanov@issp.ac.ru

Мы сообщаем о динамике перемагничивания в плоскости свободного слоя сплава Гейслера Co_2FeSi, обменно-связанного через туннельный барьер из тонкой (2nm) плёнки MgO с закрепленным снизу синтетическим антиферромагнетиком CoFe / Ru / CoFeB. Магнитный туннельный контакт имеет туннельное магнитное сопротивление (TMR) 149%. Используя изображение магнитооптической индикаторной пленки, мы визуализируем магнитные домены этого слоя и вращение его магнитного момента. Динамика магнитных доменов обнаруживает анизотропное перемагничивание внутри Co_2FeSi под действием приложенных плоскостных магнитных полей. В то время, как перемагничивание под действием полей в плоскости, приложенных перпендикулярно направлению обменного смещения в плоскости, указывает на плавное, когерентное вращение намагниченности в сторону от легкой оси в направление внешнего поля, перемагничивание вдоль легкой оси демонстрирует асимметричное поведение этого процесса. Вновь зародившиеся домены распространяются от краев пленки внутрь (РИС (c)) для перехода свободного слоя в антипараллельное упорядочение с обменно-связанным слоем синтетического антиферромагнетика. С другой стороны, домены распространяются изнутри пленки к краям (РИС (i)), когда намагниченность свободного слоя переключается в параллельное направление с закрепленным синтетическим антиферромагнитным слоем (IrMn / CoFe / Ru / CoFeB). Эти результаты имеют важное значение для эффективности устройств с магнитным туннельным переходом Гейслера.





DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.068

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА В ПАРАХ СЕЛЕНА И ОБРАБОТКИ АРГОНОВОЙ ПЛАЗМОЙ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА Bi_2Se_3

Кахраманов К.Ш., Абдуллаев Н.А., Кахраманов С.Ш., Абдуллаев Ю.А., Бадалова З.И., Мамедова И.А

Институт физики им. Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана, Баку
Е-почта: kamil.qahramanov@yahoo.com

Исследование поверхностей кристаллов Bi_2Se_3 имеет научный и практический интерес при создании быстродействующих приборов и миниатюризации их рабочих элементов. Их легируют, чтобы удалить дефекты в объеме материала, создающие энергетические уровни в запрещенной зоне и закрепляющие положение уровня Ферми E_F [1], поскольку управление E_F относительно узла Дирака необходимое условие практического использования топологических изоляторов. Вакансии *Se* и дефекты Se_{Bi} как эффект электронного легирования, сдвигают E_F вверх к зоне проводимости. Незначительное количество вакансий *Se* на поверхности не разрушают топологические поверхностные состояния (*TSS*), а при их увеличении, нарушающем спин-орбитальное взаимодействие, *TSS* могут опускаться с первого во второй квинтетный слой и отделяться от вакансий [2]. Отжиг в парах *Se* приводит к уменьшению вакансий и носителей заряда [3], обработку поверхности аргоновой плазмой [4] использовали для снижения дефектности.

Исследовались образцы *n*-типа кристаллов Bi_2Se_3, $n = 1{,}1\times10^{19}$ см$^{-3}$ и $\alpha = -52$ мкв/град. Результаты данных исследований показывают, что для слоистых кристаллов Bi_2Se_3 наряду с осаждением NO_2, HfO_2 и других поверхностных дырочных доноров, с помощью которых удавалось достичь совмещения узла дираковского конуса с E_F, можно использовать отжиг в парах селена, для уменьшения вакансий *Se*, которые являются электронными донорами: установлено, что наиболее оптимальным режимом является отжиг при температуре 100-150^{0}C в течении 70 часов. Эффективное воздействие на состояние поверхности с идентичной целью оказывает обработка образца в тлеющем разряде в среде аргона. Было определено, что обработка дозой ионов ~ $1{,}1\cdot10^{17}$ ион/см$^{-2}$, причем как после, так и без предварительных обработок в виде отжига или химического травления, ведет к существенному уменьшению концентрации носителей в приповерхностной области кристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики - гранты № EİF/MQM/ Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1-M-01 и № EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/02/1.

1. D.O. Scanlon, P.D.C. King, R.P. Singh, A. de la Torre, S. McKeown Walker, G. Balakrishnan, F. Baumberger, C.R.A. Catlow. Controlling bulk conductivity in topological insulators: Key role of anti-site defects. *Advanced Materials*, 2012, vol. 24, iss. 16, pp 2154–2158. /dx.doi.org/10.1002/adma.201200187.
2. B. Yan, D. Zhang, C. Felser. Topological surface states of Bi_2Se_3 coexisting with *Se* vacancies. *Phys. Status Solidi RRL*, 1–3 (2012). doi: 10.1002/pssr.201206415
3. G. Martinez, B.A. Piot, M. Hakl, M. Potemski, Y.S. Hor, A. Materna, S.G. Strzelecka, A. Hruban, O. Caha, J. Novák, A. Dubroka, Č. Drašar, M. Orlita. Determination of the energy band gap of Bi_2Se_3. *Scientific reports*. 2017 Jul 31; 7(1):6891. doi: 10.1038/s41598-017-07211-x.
4. I. Childres , J. Tian, I. Miotkowski, Y. Chen. AFM and Raman studies of topological insulator materials subject to argon plasma etching. *Philosophical Magazine.* 2013, vol. 93, iss. 6, pp. 681-689. doi.org/10.1080/14786435.2012.728009

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.069

Vibrational properties of quasi-one-dimensional ternary iron sulfides $KFeS_2$ and $RbFeS_2$

A.G. Kiiamov[1], Z. Seidov[2], V. Tsurkan[3, 4], D. Croitori[4], H.-A. Krug von Nidda[3], A. Günther[3], F. Mayer[3], H.-C. Wille[5], I. Sergueev[5], O. Leupold[5], D.A. Tayurskii[1], and L.R. Tagirov[1,6]

[1] *Institute of Physics, Kazan Federal University, 420008 Kazan, Russia*
[2]*Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Sciences, AZ-1143 Baku*
[3]*EP V, EKM, Institute of Physics, University of Augsburg, D-86135 Augsburg*
[4]*Institute of Applied Physics, MD-20208 Chisinau*
[5]*Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, D-22607 Hamburg, Germany*
[6]*Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, Russia.*
AiratPhD@gmail.com

Ternary potassium-iron sulfides, $KFeS_2$ and $RbFeS_2$, belong to a family of quasi-one-dimensional compounds with the general chemical composition $AFeCh_2$ (where A – K or Rb; Ch – S or Se) [1]. These compounds share a structural motif, *i.e.*, a chain of edge-sharing chalcogen tetrahedra with iron ions inside [1]. Because of iron's strong magnetism, these compounds are considered as model compounds to study the magnetic properties and behavior of a quasi-one-dimensional magnetic chain.

The heat capacity's temperature dependence of the magnetic subsystem of $KFeS_2$ and $RbFeS_2$ could be used for the finer analysis of the magnetic properties of this quasi-one-dimensional chain antiferromagnet. Moreover, if the magnetic contribution to heat capacity is determined in a wide temperature range, the change in the magnetic subsystem's entropy after transition from a full magnetic disorder in the paramagnetic state at high temperatures to an ordered state at low temperatures (ordinarily at LHe temperature and below) can be evaluated and compared with that predicted for the particular spin states.

The heat capacity of these compound consists of two contributions: (*i*) lattice specific heat and (*ii*) heat capacity of the magnetic subsystem. The magnetic heat capacity can be determined as the difference between the experimental value of the total specific heat and the calculated lattice contribution in different temperature ranges.

The lattice specific heat can be obtained from the phonon density of states which can be delivered from density functional theory (DFT) *ab initio* calculations [2,3]. In general, DFT should provide these data without fitting parameters; however, it is known that the frequency scale of the calculated phonon density of states needs to be corrected because of systematic underestimation of inter-ion forces [2,3].

Some sensitive and susceptible to the vibrational properties of solids experimental methods can be used for calibration of the calculated PDOS. The nuclear inelastic scattering (NIS) method yields PDOS in an output which can be directly compared with the calculated one and find the necessary frequency correction factor [2,3].

The goals of the present study are to calculate PDOS and eventually the temperature dependence of the lattice specific heat of the compounds $RbFeS_2$ and $KFeS_2$. The latter hereafter allows estimation the temperature dependence of the specific heat of the magnetic subsystem of the compounds.

This work was supported by the joint RFBR-DFG project No 19-52-12068 (RFBR) and No KR 2254/3-1 (DFG).

[1] M.R. Harrison, M.G. Francesconi, Coord. Chem. Rev. – 2011. – V.255. – P.451–458.
[2] A.G. Kiiamov, *et al.*, Phys. Rev. B. – 2018. – V.98. – Art.214411.
[3] A. Kiiamov, *et al.*, Appl. Sci. (MDPI). – 2020. – V.10. – Art. 7212.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.070

ЭВОЛЮЦИЯ МОРФОЛОГИИ ПЛЕНОК В ПРОЦЕССЕ КОАГУЛЯЦИИ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ИЗ РАСТВОРОВ В NMMO В ИЗОБУТАНОЛЕ

Архарова Н. А.*, Макаров И. С., Миронова М. В.**, Клечковская В. В.***

**Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника». РАН. Москва, Россия,* klechvv@crys.ras.ru

***Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

Волокна, пленки, мембраны на основе целлюлозы, являются биоразлагаемыми продуктами, что исключительно важно для экологии, и тем самым привлекательны для ученых и технологов. Морфология и структура получаемых продуктов являются определяющими факторами их дальнейшего применения и служат показательным аспектом при осуществлении их направленного синтеза. За последние четверть века наиболее популярным процессом получения продуктов на основе целлюлозы является новый NMMO-процесс, получивший широкую популярность в промышленности, благодаря его высокой растворяющей способностью по отношению к целлюлозе практически 100%-ной регенерации [1] и отсутствием вредных выбросов в технологическом процессе. Однако, структура пленок, получаемых по NMMO процессу является одним из самых дискуссионных вопросов [2,3].

В данной работе рассмотрена эволюция морфологии при осаждении растворов целлюлозы в N-метилморфолин-N-оксиде “мягким” осадителем - изобутиловым спиртом различной температуры. Сопоставление данных оптических исследований с результатами растровой электронной микроскопии позволило определить последовательность и механизм фазового разделения с формированием полимерной фазы в зависимости от температуры изобутилового спирта. Так, в случае осадителя комнатной температуры по фронту осаждения формируется гетерогенная пленка с укрупняющейся по толщине капельной текстурой. Для описания процесса формования раствора целлюлозы в горячий изобутанол предложена двухстадийная схема процесса коагуляции. На первой стадии происходит струйное проникновение осадителя в прядильный раствор, приводящее к формированию вакуолей. Распад раствора на фазы протекает в пределах вакуолей, как микрореакторов, с образованием концентрированной по полимеру оболочки и разбавленной по полимеру фазы в полости вакуоли. На второй стадии осадитель, диффундирует через оболочку вакуоли в объем раствора, вызывая его медленное, но равномерное осаждение. Визуализирован процесс формирования вакуолей. Проведен ЭДС анализ поперечного скола пленки, позволивший установить различное содержание атомов C, N и O на стенках вакуолей и в области пленки с однородной ячеистой морфологией.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда (грант №17-79-30108) и при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (проект RFMEFI62119X0035) в части электронно-микроскопических исследований.

Rosenau T., Potthast A., Sixta H., Kosma P. // Progr. Polym Sci. – 2001. – V.26.– № 9. – P. 1763.
Kulichikhin V., Makarov I., Mironova M., et al. //Materials. –2020. – V.13.– P. 3495.
Biganska O., Navard P. //Cellulose. – 2009 – V.16. – P. 179.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.071

ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН С МАГНИТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ $CoFe_2O_4$

Астанина ПН [1], Коплак ОВ[2]

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт проблем химической физики , Черноголовка, Россия*
p_astanina@mail.ru

Магнитные наночастицы (МНЧ) используют в терапии рака, в качестве контрастного вещества в МРТ и адресной доставке лекарств. Главным преимуществом МНЧ является их магнитная управляемость. МНЧ применяют для маркировки клеток: они могут накапливаться в зоне повреждения кровеносных сосудах и опухоли. Основным барьером для более широкого применения МНЧ являются до сих пор существующие вопросы о механизме взаимодействия МНЧ с живыми объектами, в частности - с липидными мембранами. В нашей работе мы рассматривали взаимодействие ферромагнитных МНЧ с азолектиновой липидной мембраной методами ^{1}H ЯМР спектроскопии. На спектре (Рисунок 1 **Спектр 1H ЯМР липидного раствора без наночастиц (1), липидного раствора после добавления к липидному раствору магнитных наночастиц с поверхностной концентрацией C = 6.5 106 мм-2 (2), наночастиц (3).**) можно заметить химический сдвиг в диапазоне, отвечающему CH_2 и CH_3 группам (с 1.115 ppm на 1.308 ppm для CH_2 и с 0.725 ppm на 0.905 ppm для CH_3). Также можно заметить перераспределение интенсивностей для этих групп: пик при CH_2 группе больше, чем при CH_3.

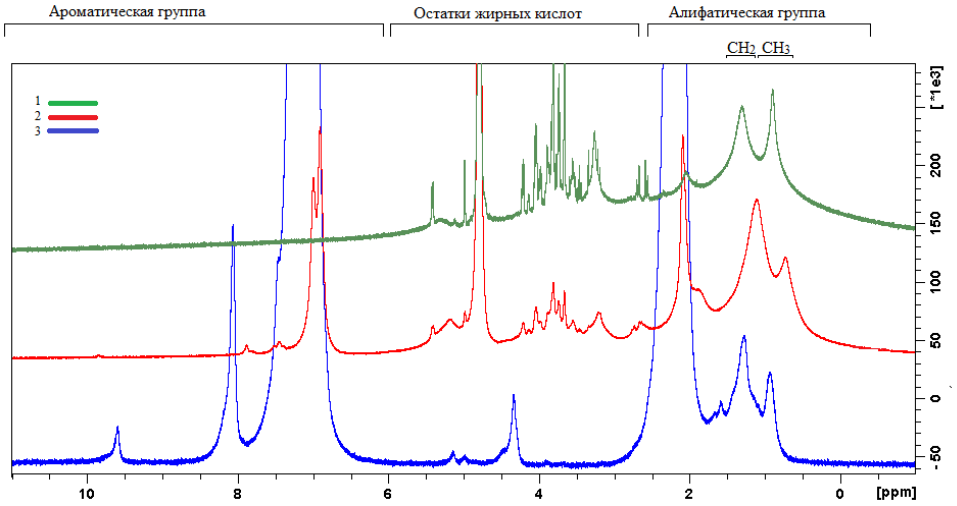


Рисунок 1 Спектр 1H ЯМР липидного раствора без наночастиц (1), липидного раствора после добавления к липидному раствору магнитных наночастиц с поверхностной концентрацией C = 6.5 10^6 мм$^{-2}$ (2), наночастиц (3).

После добавления МНЧ в мембрану в жидкой фазе наночастицы образовывают водородные связи с липидом, из-за чего сигнал в ЯМР смещается в более слабое поле. Обнаружено изменение спектров ^{1}H ЯМР липидных мембран после добавления $CoFe_2O_4$ наночастиц, обусловленное их взаимодействием с фосфолипидами. На спектрах ^{1}H ЯМР после добавления наночастиц заметен химический сдвиг и увеличение интенсивности линий при 1,308 ppm и 0,905, отвечающих CH_2 и CH_3 группам. Образование водородных связей между МНЧ и липидами вызывает дезэкранирование ядер ^{1}H и смещение сигнала в ЯМР.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.072

Многослойные микропровода на основе переходных и редкоземельных материалов

Погорелец Ю.С., Белянин А.Е., Коплак О.В.
инженер
Институт проблем химической физики, Черноголовка, Россия
E-mail: pogorelets.yuri@gmail.com

Одним из новых направлений применения магнитов последнего поколения со сверхвысокой магнитной энергией, представляется создание прототипов медицинских магнитных нано и микроманипуляторов[1-3]. Вероятность применения магнитного пинцета на основе сплава FeCoB-PrDy для магнитного позиционирования магнитомеченных биологических объектов предсталена в [2]. Новые возможности для инженерии микромагнитных концентраторов магнитного поля, способных прецизионно манипулировать биологическими микрообъектами, выявляются при применении многослойных микропроводов основанных на базе сплавов редкоземельных сверхсильных магнитов 3 поколения. В данной работе изучены микропровода, диаметром 80 μm, выявленные методом экстракции висящей капли расплава FeCoB-PrDy.Формирование двуслойных микропроводов, состоящих из железного ядра и ферримагнитной оболочки, демонстрирующие узкую петлю магнитного гистерезиса,образованны при сверхбыстром охлаждении расплава. (рис. 1а).

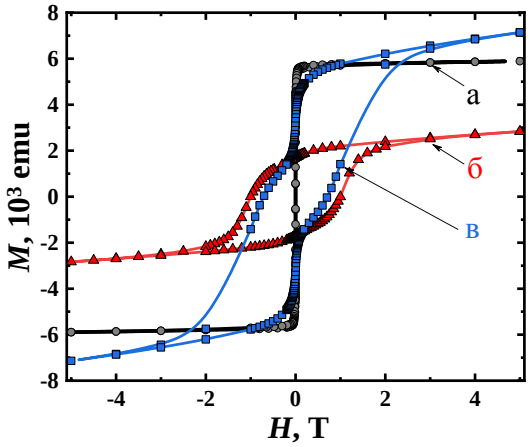


Рисунок 2 Петля магнитного гистерезиса микропроводов FeCoB-PrDy: а – до отжига, б – после отжига при *T*= 900 °C, с - после напыления слоя железа. Магнитное поле направлено вдоль образца.

К увеличению доли кристаллической фазы и увеличению коэрцитивной силы Hc более 1T, приводит отжиг при температуре 900 °C (рис. 1б). При помощи метода магнетронного напыления был создан слой железа, покрывающий отожжённый микропровод. На наличие двух компонентов - «жесткой» и «мягкой» фаз указывает сложный вид пели гистерезиса(рис. 1в). В работе рассматривается баланс обменных взаимодействий в сложных сплавах PrDy(FeCo)B, влияние дополнительного покровного слоя железа на магнитные свойства микропроводов, до и после отжига.

1. Morgunov R.B., Koplak O.V., et al., Core-shell ferromagnetic microwires extracted from PrDyFeCoB and GdPrDy(FeCo)B melts // JMMM. 2020, 497, 166004.
2. Morgunov R., Koplak O., Focused magnetization in sharpened rare-earth microwires with four switchable magnetic states // Mat.Lett. 2020, 273, 127954.
3. Koplak O.V., Morgunov R.B. Exchange bias and spin-reorientation transition in α-Fe/PrDyCoFeB core/shell microwires // Mat. Sci. and Eng.B. 2021, 263, 114845.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.073

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПЛЕНКИ, СОДЕРЖАЩИЕ НАНОЧАСТИЦЫ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В ПОЛИ-П-КСИЛИЛЕНОВОЙ МАТРИЦЕ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Криничная Е.П.[1], Иванова О.П.[1], Завьялов С.А.[2], Журавлева Т.С.[1]

[1]Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия, elkrina@mail.ru

Процесс введения в полимерную матрицу неорганических частиц позволяет получать композиционные материалы с определенными физико-химическими свойствами с целью дальнейшего их использования в качестве функциональных материалов для нано-, микро- и оптоэлектроники.

Работа посвящена разработке оптимальных условий поверхностной полимеризации из газовой фазы с целью получения наноструктурированных композиционных поли-*п*-ксилиленовых пленок ППК–CdS (толщиной d≈1.0 мкм) с различной концентрацией наночастиц сульфида кадмия CdS (C_{CdS}=5 ÷ 90 об. %) и пленок чистого CdS на поверхности подложек из монокристаллического кремния в специальной вакуумной установке [1] и исследованию их структурных и оптических свойств. Для получения детальной информации о структуре пленок был использован метод сканирующей атомно-силовой микроскопии (микроскоп СММ-2000, Россия). С помощью специального программного обеспечения вычислены значения среднеквадратичной шероховатости, построены гистограммы дифференциального распределения частиц по размерам, получены интегральные кривые гранулометрического состава, определены размерные характеристики и форма элементов наноструктур.

На основании проведенных исследований выявлены особенности морфологии и структуры приповерхностного слоя пленочных нанокомпозитов ППК–CdS на Si-подложках: с увеличением концентрации диспергированных наночастиц CdS в полимерной матрице от 20 до 90 об. % происходит наноструктурирование композитных пленок с образованием элементов приповерхностного активного слоя в виде выступающих наноглобул, полусферолитов, нанокластеров, трехмерных фрактальных и дендритных фигур. Обнаружено, что концентрация наночастиц оказывает существенное влияние на степень структурирования полимерной матрицы, а, следовательно, и на степень кристалличности пленки.

Измерены и проанализированы спектры оптического поглощения (спектрофотометр TU 1901 фирмы Beijing Purkinje General Instrument Corporation Ltd.) в диапазоне 200÷900 нм. Исследование спектров поглощения и их сравнительный анализ позволили экспериментально доказать, что с повышением концентрации наночастиц CdS наблюдается немонотонный сдвиг спектров поглощения в длинноволновую область.

Можно предположить, что увеличение концентрации наночастиц приводит к увеличению центров зародышеобразования, росту частиц и, соответственно, формированию более плотной структуры пленок с образованием упорядоченных надмолекулярных структур на поверхности.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН (№01201253304) и при поддержке РФФИ (грант №18-03-00582).

1. Григорьев Е.И., Завьялов С.А., Чвалун С.Н. // Российские нанотехнологии. - 2006. - Т. 1.- № 1–2. - С. 58–70.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.074

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ ИНТЕРКАЛИРОВАННОГО ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА В ПРОЦЕССАХ ИХ «САМОСБОРКИ» НА ПОВЕРХНОСТИ КВАРЦЕВЫХ ПЛАСТИН И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СТРУКТУРЫ

Криничная Е.П.[1], Иванова О.П.[1], Голубь А.С.[2], Лененко Н.Д.[2], Журавлева Т.С.[1]

[1]*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, г. Москва, Россия*
[2]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, г. Москва, Россия,* elkrina@mail.ru

Исследование процессов формирования тонких нанокристаллических пленок интеркалированного дисульфида молибдена и выяснение связи морфологии их поверхности и электрофизических свойств является актуальной задачей для создания новых устройств опто- и микроэлектроники.

Для синтеза пленок интеркалированных соединений MoS_2 использовали метод монослоевого диспергирования [1,2]. В результате совместной упаковки из жидкой среды отрицательно заряженных монослоев MoS_2 и «гостевых» слоев органических катионов (гексадецилтриметиламмоний, триэтилбензиламмоний родамин R6G, оксазин) были получены интеркалированные соединения MoS_2: $[C_{16}H_{33}(CH_3)_3N]_{0.3}MoS_2$, $(Et_3BzN)_{0.17}MoS_2$, $(R6G)_{0.07}MoS_2$, $(Ox)_{0.11}MoS_2$. Затем сформировавшиеся частицы нанодисперсного материала выделяли, промывали, суспендировали в ацетонитриле и наносили на подложки методом послойного полива. Толщина пленок составляла d=0.150 ÷ 0.600 мкм. Методом атомно-силовой микроскопии (СММ–2000, Россия) проведено исследование процессов кристаллизации пленок, нанесенных из суспензии на пластинки из оптического кварца, исследована структура и особенности рельефа поверхности нанокристаллических пленок неинтеркалированного и интеркалированного MoS_2. Получены интегральные кривые гранулометрического состава, построены гистограммы распределения наблюдаемых на поверхности нанокристаллитов по размерам, оценена величина шероховатости пленок. Поверхности пленок интеркалированного MoS_2 представляют собой достаточно плотные «упаковки» ступенчато-слоистых структур, произвольно ориентированных по отношению к плоскости подложки. Расположенные на поверхности нанокристаллиты имеют четкую огранку и отличаются друг от друга размерами. В зависимости от природы интеркалата и толщины пленки наблюдается неоднородность структурных изменений поверхности, которую можно объяснить особенностями процесса образования кристаллических структур при формировании пленки на подложке.

В результате проведенных исследований выявлены закономерности формирования нанокристаллических пленок интеркалированного MoS_2 в процессах их «самосборки» на поверхности подложек. Изменение степени кристалличности поверхности в зависимости от природы интеркалата и толщины пленок дает возможность целенаправленного модифицирования структуры и свойств нанокристаллических пленок.

Данная работа была выполнена в рамках государственного задания ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН (№01201253304).

Голубь А.С., Зубавичус Я.В., Словохотов Ю.Л., Новиков Ю.Н. // Успехи химии. - 2003. – Т. 72:2. – С. 138-158.

Е.П. Криничная, О.П. Иванова, Т.С. Журавлева, Н.Д. Лененко, А.С. Голубь, Ю.Н. Новиков. // *Российские нанотехнологии*, - 2010. - Т.5. - №3-4. – С. 24-28.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.075

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ КЛИНОВИДНОЙ ПЛАСТИНЫ НА МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В СПЛАВЕ $NI_{46}MN_{41}IN_{13}$

Д.Д. Кузнецов[1], Е.И. Кузнецова[2], А.В. Маширов[1], А.С. Лошаченко[3], Д.В. Данилов[3], Г.А. Шандрюк[4], В.Г. Шавров[1], В.В. Коледов[1]

1 ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия, kuznetsov.dmitry89@gmail.com

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

3 Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

4 Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия

В сплаве, номинального состава $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$, методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) изучалось метамагнитоструктурное фазовое превращение (ФП) мартенситного типа, а также измерялась температурная зависимость намагниченности образца при помощи вибрационного магнитометра. Исследовалось влияние толщины пластины на температуру начала мартенситного превращения (МП).

Температуры метамагнитоструктурного фазового перехода определялись по данным дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) в температурном интервале 75…673,15 К: Ms = 253 K, Mf = 164 K, As = 203 K, Af = 236 K. С помощью метода ДСК была определена точка Кюри, Tc=323 K (при охлаждении из аустенитной фазы) и 329 K (при нагреве из мартенситной фазы).

Установлена зависимость температуры начала мартенситного превращения (МП) от толщины образца в виде клинообразной пластины. Обнаружено, что мартенситная фаза при прямом мартенситном превращении, в тонких областях пластины (первый цикл охлаждение-нагрев-охлаждение), начинает появляться при 215 К (то есть при более низких температурах, чем в объёмном материале), дальнейшее снижение температуры приводит к расширению мартенситной области, однако, превращение блокируется на расстоянии 600 нм от края образца.

Методом ПЭМ исследовались МП, промежуточные фазовые превращения и модулированные структуры в нестехиометрическом сплаве NiMnIn. Усреднённый локальный состав в исследуемой области по данным EDX анализа Ni41.98Mn37.65In13.00O7.37. Превращение из высокотемпературной аустенитной фазы L21 в промежуточную (предмартенситную) фазу характеризовалось появлением диффузного рассеяния в виде тяжей на дифракционных картинах, сопровождающееся появлением твидового контраста в виде интенсивных тонких полос на микрофотографиях. Периодичность, погасания и усиления наблюдаемого диффузного рассеяния позволяют соотнести его с фононными колебаниями атомов, периодически искажающими исходную кристаллическую решетку. При дальнейшем охлаждении сплава на дифракционной картине присутствуют рефлексы принадлежащие, как аустенитной, так и мартенситной фазам. Ниже температуры Ms происходит сдвиговая перестройка в структуру мартенситной фазы. Таким образом, сплав испытывает при охлаждении ступенчатое превращение L21 → предмартенситная фаза → мартенсит.

Работа частично выполнена в Междисциплинарном ресурсном центре по направлению «Нанотехнологии», ЦКП Научный парк, СПбГУ.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01748)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.076

ФОРМИРОВАНИЕ УЧАСТКА ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ НА ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ СТРУКТУР

Куимов Е.В., Ветрова Н.А.

Московский Государственный Университет им. Н.Э. Баумана
г. Москва, Россия, ekjmo@mail.ru, vetrova@bmstu.ru

Участок отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) на вольт-амперных характеристиках (ВАХ) резонансно-туннельных структур (РТС) представляет интерес как рабочий участок высокочастотных генераторов сигналов [1,2]. Однако, на сегодняшний день, существующих модели, описывающие гистерезиса и “плато” на этом участке носят феноменологический характер. В качестве причины этих феноменов указывают на особенности поведения электронов в квантовой яме РТС [3] и переходы электронов между метастабильными состояниями в спейсере и квантовой яме [4]. От того, какой процесс вносит больший вклад в формирование участка ОДП, зависит вид модели токопереноса на этом участке. Для того, чтобы установить роль указанных процессов в формировании участке ОДП, в данной работе использовался подход на основе представления фазового пространства. В результате работы была построена модель с высоким валидационным уровнем (рисунок 1).

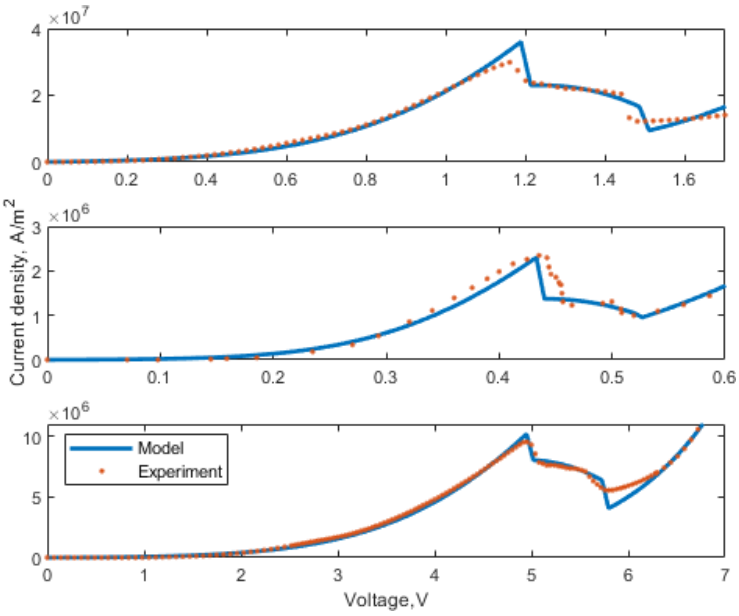


Рисунок 1 Расчетные ВАХ РТС в сравнении с экспериментальными данными

Список литературы

1. Chen Y., Suzuki S., Asada M. // 2018 43rd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 2018, PP. 1-2.
2. Asada M., Suzuki S. // Sensors. 2021. V. 21 №. 4. P. 1384.
3. Gardner C.L. // Journal of Computational Electronics. 2020. doi:10.1007/s10825-020-01612-4
4. Moskaliuk V.A., Fedyay A.V. // 21st International Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology. 2011

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.077

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ ДЕКОГЕРЕНЦИИ КОЛЛЕКТИВНЫХ СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ В 2ДЭГ МЕТОДОМ ВРЕМЯРАЗРЕШЕННОГО КЕРРОВСКОГО ВРАЩЕНИЯ

Э. Степанец-Хуссейн[ab], Л.И. Мусина[bc], А.В. Ларионов[b], А.С.Журавлев[b], И.В.Кукушкин[b], Л.В. Кулик[b]

musina.li@phystech.edu

[a] НИУ ВШЭ, 101000, Москва, Россия.
[b] ИФТТ РАН, 142432, Черноголовка, Россия.
[c] МФТИ, 141701, Долгопрудный, Россия.

Изучение спиновой степени свободы в 2ДЭС приобрело особое значение в свете недавних работ по детектированию дробных спиновых состояний не-лафлиновского типа, а также изучению локальной несжимаемости электронной системы, связанной с формированием спиновых текстур в основном состоянии. Согласно этим результатам, спиновые корреляции в частично спин-поляризованной 2ДЭС могут играть определяющую роль в формировании новых коллективных состояний и квантовании Холловской проводимости.[2]

В данной работе была исследована структура сигнала время-разрешенного керровского вращения от двумерной электронной системы, помещенной в квантующее магнитное поле. На основе полученных экспериментальных данных и микроскопической теории был выделен нелинейный вклад в затухание ларморовских осцилляций, возникающий при низких температурах, когда спин-спиновые корелляции определяют основное состояние двумерной электронной системы. Таким образом, была исследована динамика синхронизирующих и дефазирующих факторов в системе прецессирующих электронных спинов. Кроме того, микроскопическая теория [1] позволила получить на основе этих результатов оценку различных физических параметров системы, в том числе, были произведены оценки параметров флуктуирующего магнитного поля, действующего на отдельные электронные спины.

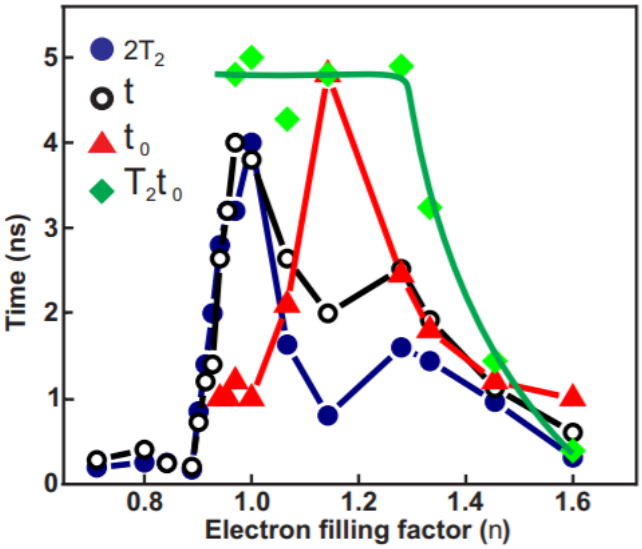
Спиновая динамика электронов в двумерной системе определяется двумя независимыми механизмами: одночастичной релаксацией, связанной с пространственными флуктуациями магнитного поля и многочастичным обменным взаимодействием, сохраняющим коллективную прецессию спинов электронов с общей ларморовской частотой [1]

$$\left\langle S_+(t)\right\rangle = S_\perp(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon_z t}\left[1+\mathrm{Re}\, f_a(t)\right]$$

$$\mathrm{Re}\, f_a = -\left(t/T_2\right)\left\{(2/\pi)\arctan\left(2t/\tau_0\right) - \left(\tau_0/2\pi t\right)\ln\left[1+\left(2t/\tau_0\right)^2\right]\right.$$

$$1/T_2 = \pi\tau_0\left(\Delta_g/2\right)^2 \qquad \tau_0 = M_x\left(\Lambda/l_B\right)^2$$

Применяя эти формулы к экспериментальным данным, полученным методом время-разрешенного керровского вращения, получаем следующие оценочные значения для параметров системы:



Качественный вид зависимости характеристических времен T_2 и t_0 от фактора заполнения 2ДЭС. Для сравнения показано эмпирическое время, при котором амплитуда ларморовских осцилляций уменьшается в е-раз (точки).

Благодарности.

S. Dickmann, J. Phys.: Condens. Matter 32, 015603 (2020).
E. Stepanets-Khussein, L.I. Musina, A.V. Larionov et al., Nonexponential decoherence of collective spin states in 2DES probed by time-resolved Kerr rotation, Solid State Communications (2021), doi: https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114285.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.078

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СЛОЁВ AlN, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ МПЭ В СЛАБО И СИЛЬНО МЕТАЛЛОБОГАЩЕННЫХ УСЛОВИЯХ

Мясоедов А.В., Нечаев Д.В., Ратников В.В., Калмыков А.Е. Жмерик В.Н.

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург, Россия, amyasoeodov88@gmail.com

Разработка источников и приемников излучения среднего УФ диапазона на основе AlGaN является одним из стремительно развивающихся направлений современных полупроводниковых технологий. Значительное рассогласование параметров решеток между AlN и *c*-Al_2O_3 – основным типом подложек, массово применяемых в производстве, – обуславливает высокие значения плотности прорастающих дислокаций (ПД), вплоть до 10^{10} см$^{-2}$.

В работе методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской дифрактометрии (РД) исследовано влияние морфологии ростовой поверхности буферных слоёв AlN, выращенных методом плазменно-активированной молекулярно-пучковой эпитаксии (ПА МПЭ) в слабо и сильно металлобогащенных условиях, на снижение плотности ПД.

ПЭМ исследование выполнено на микроскопе Philips EM420 при ускоряющем напряжении 100 kV. РД исследование проводилось с использованием Cu$K_{\alpha 1}$-излучения. Оценка плотности винтовых и краевых ПД получена на основе измерений полуширины соответственно симметричного 0002 и кососимметричного $10\bar{1}1$ рефлексов в геометрии Брэгга соответственно.

Буферные структуры толщиной 1-1.6 мкм на основе AlN были выращены методом ПА МПЭ на *c*-Al_2O_3 подложках при температуре T_S = 780-850 °C, с предварительным отжигом и нитридизацией поверхности подложки. Для исследования была выбрана серия образцов, для которых первый этап роста буферной структуры проходил в слабо металлобогащённых условиях, при соотношении потоков F_{Al}/F_{N*} в диапазоне от 1.06 до 1.33, а второй (последние 300-500 nm) уже при сильно металлобогащённых условиях – F_{Al}/F_{N*} ~ 2.1-2.3 и температуре подложек до T_S = 850 C – так называемый этап «выглаживания». Отдельно была исследована эффективность применения ультратонких вставок GaN (~3 nm) при фильтрации ПД.

Анализ результатов ПЭМ и РД исследований показал, что в слабо металлобогащённых условиях (F_{Al}/F_{N*} = 1.06) на первом этапе, формируется фасетированная морфология поверхности, которая обеспечивает большее снижение плотности ПД, чем при более металлобогащённых условиях, когда наблюдается гладкая морфология ростовой поверхности. В образцах, выращенных в этих условиях, плотности винтовых и краевых ПД составляют $4\cdot10^8$ и $8\cdot10^9$ см$^{-2}$ соответственно. Для выглаживания морфологии поверхности буферной структуры до уровня шероховатости 0.7 нм в конце роста необходимо использовать более металлобогащённые условия роста (F_{Al}/F_{N*} ~ 2.1) при высоких температурах подложки (T_S = 850 °C). Снижение плотности ПД на первом этапе связывается с загибом дислокаций в направлении к наклонным фасеткам, формирующим трёхмерную ростовую поверхность, под действием сил изображения, и их закреплением на межзёренных границах.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-29-12041 мк.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.079

МЕХАНИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННЫЕ СТУПЕНЬКИ ШАПИРО В КВАЗИОДНОМЕРНОМ ПРОВОДНИКЕ TaS_3

Никитин М.В.[1], Зыбцев С.Г.[1], Покровский В.Я.[1], Логинов Б.А.[2]
[1]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия,* nikitin@cplire.ru
[2]*НИУ МИЭТ, г. Зеленоград, Россия,* b-loginov@mail.ru

В квазиодномерных проводниках с волной зарядовой плотности (ВЗП) наблюдаются электромеханические эффекты, связанные со взаимодействием ВЗП и кристаллической решетки [1]. В частности, обнаружена сильная деформация кручения нитевидных кристаллов (микровискеров) под действием электрического поля [1]. В режиме синхронизации ВЗП внешним ВЧ полем на зависимостях угла кручения от подаваемого на образец напряжения V наблюдались особенности, аналогичные ступенькам Шапиро (СШ) [2]. При напряжениях выше порогового, V_t, возникают также механические колебания образцов на фундаментальной частоте скольжения ВЗП f_f [3], а также НЧ колебания со спектром типа $1/f$ [1].

Учитывая данные результаты, мы нацелились на поиск обратного эффекта: влияния механических колебаний образца на динамику ВЗП. Если образец периодически деформируется, можно ожидать, что на ВАХ появятся особенности в точках, в которых f_f совпадает с частотой деформации f. Для исследований была выбрана ромбическая фаза TaS_3 – характерного соединения с ВЗП, в котором хорошо изучены электромеханические эффекты [1].

Поиск эффекта синхронизации осуществлялся на частотах резонансных колебаний образца, подвешенного между двумя актюаторами из пьезокерамики ЦТС-19. Были получены «дифференциальные ВАХ», dV/dI в зависимости от V, при различных частотах f высокочастотного напряжения, приложенного актюаторам. На ВАХ обнаружены особенности, аналогичные СШ, возникающим при приложении переменного напряжения на той же частоте непосредственно к образцу. При отклонении f от резонанса особенности на ВАХ исчезают, если напряжение приложено к актюаторам, в то время как вид и положение «обычных» СШ практически не изменяются. Это свидетельствует о механической природе СШ. Влияние вибрации на ВАХ качественно похоже на влияние ВЧ напряжения. Так, в обоих случаях наблюдается снижение значения V_t.

Таким образом, мы наблюдали качественно новый эффект: синхронизацию скольжения ВЗП, вызванную гармоническими механическими колебаниями. Это означает, что периодическая деформация решетки на частоте f_f вызывает чрезвычайно сильную модуляцию тока ВЗП. Результат открывает новую область электромеханических эффектов в проводниках с ВЗП и представляет эти соединения в качестве преобразователей механических колебаний нового типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 17-19-01748).

6. Покровский В.Я. и др. // УФН. – 2013. – № 183. – С. 33-54.
7. Зыбцев С.Г., Никитин М.В., Покровский В.Я. // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – Т. 92. – Вып. 6. – С. 448-453.
8. Nikitin M.V., Zybtsev S.G., Pokrovskii V.Ya. // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86. – L.045104.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.080

СИНХРОНИЗАЦИЯ СКОЛЬЖЕНИЯ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ СВЧ ПОЛЕМ В МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ БЕЗЫНЕРЦИОННОГО ОБЪЕКТА

Никонов С.А., Зыбцев С.Г., Покровский В.Я.

ИРЭ им. В.А.Котельникова РАН г. Москва, Россия, nikonow2014@gmail.com

Одно из свойств квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности (ВЗП) – синхронизация скольжения ВЗП в СВЧ поле, которая приводит к возникновению ступенек Шапиро (СШ) на ВАХ.

Типичным соединением с ВЗП является моноклинная сингония NbS_3, на которой наблюдаются три пайерлсовских перехода: при 460К (ВЗП-0), 360К (ВЗП-1) и 150К (ВЗП-2). ВЗП-1, скольжение которой можно наблюдать при комнатной температуре, обладает высокой когерентностью, что позволило нам наблюдать до 8 осцилляций СШ и порогового поля от амплитуды СВЧ сигнала [1].

На рис.1 показаны кривые σ_d от V, снятые при СВЧ напряжении (75 МГц) от 0 (нижняя кривая) до 900 мВ (верхняя). Значение тока ВЗП в каждый момент времени можно вычислить, зная мгновенное значение напряжения и нелинейный ток, $I_{nl}(V)$, из ВАХ, измеренной без облучения. Получаем, что перемещение ВЗП в режиме СШ за полупериод СВЧ $\delta x/\lambda = I_{nl}/2I_1$, где

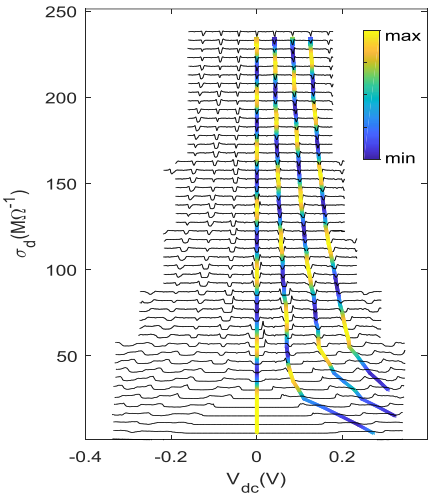


Рис.1. – Зависимости дифференциальной проводимости, σ_d, от напряжения при разных амплитудах СВЧ поля (75МГц).

I_1 – ток первой гармоники, λ – период ВЗП. Если перестроить ширину ступенек от перемещения ВЗП, то первый минимум первой ступеньки Шапиро соответствует перемещению ВЗП δx_1 на 2λ за первые пол периода и δx_2 на $-\lambda$ за второй полупериод, второй минимум – на 3λ и -2λ. Аналогично для второй ступеньки первый минимум соответствует 3λ и $-\lambda$, второй минимум 4λ и -2λ и для третей ступеньки первый минимум 4λ и $-\lambda$, второй минимум 5λ и -2λ и т.д..

Также можно решить обратную задачу: определить положение ступеньки Шапиро по напряжению и ее экстремумы. Так как перемещение ВЗП δx является функцией напряжения, зная, что для ступеньки Шапиро за период СВЧ $\delta x = n\lambda$, где n =0,1,2,3 – номер ступеньки Шапиро, можно вычислить ее положение на ВАХ. Минимумы первой ступеньки соответствуют условию $\delta x_1 - \delta x_2 = 3\lambda, 5\lambda, 7\lambda$ и т.д.. Аналогично для второй ступеньки условия минимумов СШ $-\delta x_2 = 4\lambda, 6\lambda$ и т.д., для третей $\delta x_1 - \delta x_2 = 5\lambda, 7\lambda$ и т.д.. Максимумы будут равны половине пройденного пути между минимумами .Относительное изменение амплитуды ступенек Шапиро между максимумами и минимумами иллюстрируется постепенным изменением цвета между ними, как показано на рис.1.

Таким образом, экспериментально показана периодичность осцилляций порогового поля и ступенек Шапиро по δx_i, а также возможность определения положения ступенек Шапиро и их экстремумов исходя из ВАХ необлученного образца.

Zybtsev S.G., Nikonov S.A., Pokrovskii V.YA. // Phys. Rev. B. – 2020. – V.102. –P. 115425

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.081

ВРЕМЕННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОЙ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

Орлов А.П.[1,2], Фролов А.В.[1], Воропаев Д.М.[3], Синченко А.А.[1,4], Монсо П.[5]

[1] *Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия*
[2] *Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, г. Москва, Россия*
[3] *Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия*
[4] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*
[5] *Univ. Grenoble Alpes, Inst. Neel, CNRS, г. Гренобль, Франция*
andreyorlov@mail.ru

Мы исследовали временную зависимость релаксации неравновесной волны зарядовой плотности (ВЗП) относительно равновесного основного состояния в структурах, сделанных в виде длинных мостиков, ориентированных вдоль направления ВЗП, которые были изготовлены микротравлением из тонких кристаллов квазидвумерного редкоземельного трителлурида ($TbTe_3$).

Были выполнены транспортные измерения микронных мостиков $TbTe_3$ в диапазоне температур от 180 до 340К, выше и ниже Пайерлсовского перехода (T_{CDW}~336К). Исследованы эффекты коллективного движения (скольжения) ВЗП во временной области, при различных токах выдержки, I_{exp}, соответственно, ниже и выше порогового электрического поля, необходимого для скольжения ВЗП, E_t. Было замечено, что временная выдержка образца на токах I_{exp}, при которых ВЗП запиннинговано ($E<E_t$), при определённой температуре $T_{exp}<T_{CDW}$ приводит к росту E_t. Нагрев образца выше T_{CDW} с последующим охлаждением до температуры выдержки (T_{exp}) восстанавливает исходные значения порогового поля. При этом зависимость величины порога от времени $E_t(t)$ имеет релаксационный характер с аномально большими значениями постоянной времени. После выдержки образца на температурной зависимости $E_t(T)$, возникает максимум с вершиной при T_{exp} [1]. При нагреве образца зависимость $E_t(T)$ возвращается к классическому линейному виду. Дополнительно установлено, что эффект роста E_t проявляется значительно слабей, если временная выдержка проведена в режиме скольжения ВЗП ($E>E_t$), при больших токах I_{exp}. Проводимость образца в статическом состоянии ВЗП в процессе выдержки и после нагрева не изменяется.

Показано, что при охлаждении при электрическом поле меньше порога, E_t, необходимого для скольжения ВЗП, равновесное основное состояние ВЗП имеет в образце единственную фазу. В $TbTe_3$ основное состояние ВЗП, когда образец находится при заданной температуре ниже температуры перехода Пайерлса, эволюционирует к равновесному состоянию с почти однородной фазой в макроскопическом объеме. При охлаждении с приложенным электрическим полем выше порога (E_t) для скольжения ВЗП при данной температуре, основное состояние ВЗП находится в состоянии замороженного стекла, которое может дестабилизироваться только за счет уменьшения электрического поля ниже порогового значения (E_t). Следует отметить, что характерное время релаксации к равновесию экспоненциально растёт при понижении температуры. Это означает, что состояние равновесия никогда не может достигаться при низких температурах. Мы предварительно интерпретируем эти результаты взаимодействием ВЗП с хорошо упорядоченной несоизмеримой структурой Te-Te.

Работа поддержана Государственным заданием ИРЭ РАН.

Frolov A.V., Orlov A.P., Hadj-Azzem A., Lejay P., Sinchenko A.A. Monceau P. //Phys. Rev. B 101, 155144 (2020)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.082

ДРЕЙФ ГАЗА МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В ОДНОМЕРНОМ ПОЛЕ ДЕФЕКТОВ

Орлов В. А.[1,2], Иванов А.А.[1], Орлова И. Н.[3], Патрин Г. С.[1,2]

[1]*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия,* vaorlov@sfu-kras.ru,

[2]*Институт физики им. Л.В.Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия,*

[3]*Красноярский государственный педагогический университет им. В. П. Астафьева, Красноярск, Россия.*

Ферромагнитная нанолента является одним из перспективных объектов для устройств спинтроники. Такая нанолента может содержать в себе рой таких вихрей [1]. Вследствие малого размера ядра вихря и малой его массой, существенным является тепловое случайное блуждание вихрей подобное броуновскому. В тонких магнетиках, как правило, существуют дефекты, которые создают случайное или модулированное силовое поле, в котором и движется вихрь как частица. В нашей модели в роли центров закрепления выступают линейные протяженные дефекты, ориентированные перпендикулярно длинной оси ленты.

Для описания характера смещения вихрей под действием вынуждающей силы в случайном поле дефектов вычислим среднее число траекторий ядер $\rho(x,t)$, приводящих к благоприятному исходу - ядро оказалось в координате x в момент времени t. Рассмотрена модель 1 – хаотично распределенные одинаковые дефекты. В этом случае для функции получено выражение: $\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi\sqrt{\mu x \nu t}}}e^{-\left(\sqrt{\mu x}-\sqrt{\nu t}\right)^2}$. Наиболее вероятную скорость потока частиц (цуга) V легко вычислить, исследовав на экстремум это распределение. Так же рассчитано распределение для модели 2, в которой координаты дефектов распределены хаотично, а высоты барьеров равномерно в конечном интервале $W_1 ... W_2$ и модели 3 с нормальным распределением энергий. Изменение со временем и координатой $\rho(x,t)$ в этих случаях происходит подобно распределению модели 1. Отличие имеется в скорости распространения цуга дисперсии координат.

В области низких температур при сравнимых дисперсиях моделей 2 и 3 наибольшую скорость мы имеем при полном отсутствии хаоса в параметрах закрепляющих центров. С ростом хаоса в высотах барьеров центров закрепления при низких температурах значительную роль начинают играть пусть и редко выпадающие, но несравненно более жесткие дефекты, закрепившись на которых, газ квазичастиц замедляет расширение своей области локализации. Это приводит к уменьшению коэффициентов диффузии газа вихрей.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ темы FSRZ-2020-0011).

1. Fert A., Reyren N., Cros V., Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications // Nature Reviews, Materials. -2017. - V. 2, - P. 17031.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.083

МИКРО- И НАНОТВЕРДОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ GaTe

Орлов В.И.[1], Борисенко Е.Б.[1], Головин Ю.И.[2], Тюрин А.И.[2], Колесников Н.Н.[1],

[1]*Институт физики твердого тела Российской академии наук,*
142432 Черноголовка, Россия, orlov@issp.ac.ru
[2]*Тамбовский государственный университет иммени Г.Р. Державина,*
Тамбов, Россия, yugolovin@yandex.ru

Кристаллы GaTe являются типичными представителями слоистых полупроводниковых соединений AIIIBVI, которые легко скалываются по плоскостям спайности, образуя тонкие плоскопараллельные пластины толщиной от 100 нм до нескольких мм. В плоскости слоя химические связи являются ковалентными, а межплоскостные связи слабые и по прочности приближаются к ван-дер-ваальсовым. Существование слабой связи между слоями и отсутствие оборванных связей практически исключают возможность образования поверхностных уровней, концентрация которых оказывается на несколько порядков меньше, чем в обычных полупроводниках, что делает возможным простым скалыванием слоев изготовление оптически однородных образцов с естественной зеркальной поверхностью.

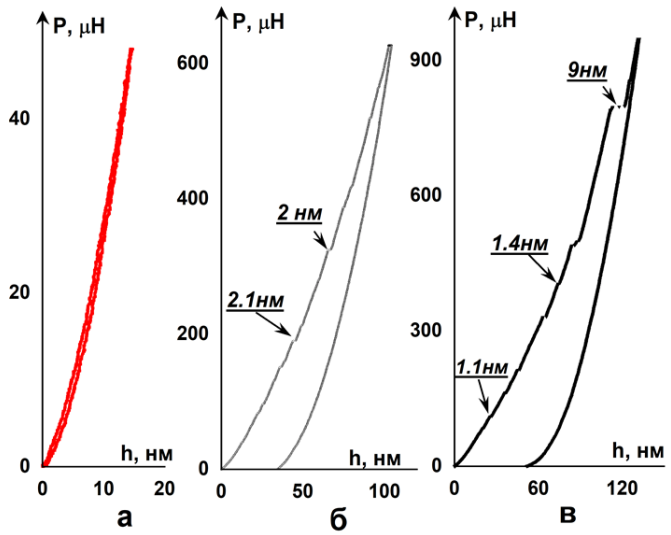


Рис.· 1.· Зависимость· *h*· от· *P*· при· различной· величине·максимальной·нагрузки.¶

Изучение механических свойств слоистых кристаллах AIII BIV является важным. Однако таких экспериментальных данных недостаточно особенно для кристаллов GaTe. Большинство исследований таких кристаллов является качественным. В настоящей работе исследованы микро- и нанотвердость монокристаллов GaTe. на плоскости скола (-201). На рис.1 показаны типичные кривые нагружения: нагрузка *P* – глубина погружения индентора *h* при различной величине максимальной нагрузки P_{max}. При P_{max} < 50 □Н происходит полное восстановление отпечатка Рис.1(***а***). Лишь при нагрузках выше 50 □Н фиксируется остаточный отпечаток. На кривой нагружения наблюдаются скачки Δh деформации (на Рис.1 ***б*** и ***в*** отмечены стрелками). С увеличением нагрузки величина скачков Δh как правило увеличивается от 0.5 нм до ~10 нм и больше (расстояние между слоями ~0.5 нм).

Величина нанотвердости – H = 2.2 ± 0.2 ГПа, что значительно выше величины микротвердости ~ 350 МПа. Значение модуля Юнга - E = 25 ± 0,5 ГПа. Величина модуля Юнга практически не зависела от размерного фактора и хорошо согласуется с литературными данными. Вид отпечатка и характер разрушения вокруг него свидетельствует о чисто хрупком разрушении слоев.

Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.084

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ИНТЕРФЕЙСЫ ГЕТЕРОСТРУКТУР СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК/ДИЭЛЕКТРИК

Павлов Д.П.[1], Чибирев А.О.[1], Камашев А.А.[1], Мухортов В.М.[2], Гарифьянов Н.Н.[1], Мамин Р.Ф.[1]

[1]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия,* dmitry.p.pavlov@gmail.com
[2]*ФИЦ Южный научный центр РАН, г. Ростов-на-Дону, Россия*

Впервые электронный газ высокой подвижности на интерфейсе между $LaAlO_3$ и $SrTiO_3$ был обнаружен Охтомо и Хвангом в 2004 году [1]. Было показано, что эта гетероструктура обладает ферромагнитными свойствами [2] и переходит в сверхпроводящее состояние при температурах ниже 300 мК [3]. Мы исследуем гетероструктуры на основе сегнетоэлектрических и диэлектриков оксидов со структурой типа $BaTiO_3/LaMnO_3$. Нами были получены образцы гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, и на этих образцах экспериментально измерены температурные зависимости сопротивления образцов без поля, а также при и после неоднократном приложении магнитного поля.

В гетероструктурах $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, которые мы исследовали, электрическое сопротивление значительно уменьшается с понижением температуры при температурах ниже определенной температуры в районе 160-230 K. Таким образом, ниже такой температуры максимума в температурной зависимости сопротивление увеличивается с повышением температуры, что указывает на квазиметаллический характер поведения сопротивления интерфейса этих гетероструктур. А выше температуры максимума сопротивление уменьшается с повышением температуры. При этом наблюдается явно активационный закон и это указывает на полупроводниковый характер поведения сопротивления. Мы полагаем, что в этом случае основной ток идет через толщу подложки $LaMnO_3$, и, по сути, мы измеряем сопротивление подложки. Температура максимума температурной зависимости сопротивления меняется при многократном приложении внешнего магнитного поля, и она увеличивается от 160 K до 230 K при последовательном процессе термоциклирования во внешнем магнитном поле. При снятии поля вновь приобретенные свойства остаются. Сильное влияние внешнего магнитного поля на сопротивление гетероструктуры свидетельствует о вероятности существования магнитного порядка в области интерфейса с повышенной концентрацией носителей заряда.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-12-00179.

5. A. Ohtomo, H. Ywang, *Nature* **427**, 6973 (2004).
6. S. Thiel, G. Hammerl, A. Schmehl et al., *Science* **313**, 5759 (2006).
7. N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, et al., *Science* **317**, 1196 (2007).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.085

FINITE FREQUENCY BACKSCATTERING CURRENT NOISE AT A HELICAL EDGE

B. V. Pashinsky[1,2,3], M. Goldstein[4], I. S. Burmistrov[3,5]

[1]*Skolkovo Institute of Science and Technology, 143026 Moscow, Russia,*
boris.pashinsky@gmail.com
[2]*Moscow Institute for Physics and Technology, 141700 Moscow, Russia,*
[3]*L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, acad. Semenova av. 1-a, 142432 Chernogolovka, Russia*
[4]*Raymond and Beverly Sackler School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University, Tel Aviv 6997801, Israel*
[5]*Laboratory for Condensed Matter Physics, National Research University Higher School of Economics, 101000 Moscow, Russia*

Magnetic impurities with sufficient anisotropy could account for the observed strong deviation of the edge conductance of 2D topological insulators from the anticipated quantized value. In this work we consider such a helical edge coupled to dilute impurities with an arbitrary spin S and a general form of the exchange matrix. We calculate the backscattering current noise at finite frequencies as a function of the temperature and applied voltage bias. We find that, in addition to the Lorentzian resonance at zero frequency, the backscattering current noise features Fano-type resonances at nonzero frequencies. The widths of the resonances are controlled by the spectrum of corresponding Korringa rates. At a fixed frequency the backscattering current noise has nonmonotonic behavior as a function of the bias voltage. [1]

The research was partially supported by the Russian Ministry of Science and Higher Education, the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 20-52-12013) - Deutsche Forschungsgemeinschaft (Grant No. EV 30/14-1) cooperation, the Alexander von Humboldt Foundation, the Israel Ministry of Science and Technology (Contract No. 3- 12419), the Israel Science Foundation (Grant No. 227-15), and the US-Israel Binational Science Foundation (Grant No. 2016224). Hospitality by Tel Aviv University, the Weizmann Institute of Science, Landau Institute for Theoretical Physics, and National Research University Higher School of Economics is gratefully acknowledged. M.G. acknowledges a travel grant by the BASIS Foundation (Russia).).

Pashinsky B. V., Goldstein M., Burmistrov I. S. Finite frequency backscattering current noise at a helical edge // Phys. Rev. B 2020 V. 102, P. 125309

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.086

АНАЛИЗ ЗАДАЧИ О ТУННЕЛИРОВАНИИ ПОЛЯРОНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КВАНТОВОГО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Попова А.С.[1], **Тиунова В.В.**[1], **Рубцов А.Н.** [1,2]

[1] *Российский квантовый центр, Сколково, г. Москва, Россия, a.chertkova@rqc.ru*

[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

Модель примеси, взаимодействующей с термостатом, является одной из фундаментальных задач физики конденсированного состояния вещества. Ранее, при решении задачи о квазичастице, образованной электроном проводимости и индуцированной им поляризацией в диэлектрическом кристалле, была введена модель полярона [1]. В настоящее время поляронные эффекты широко изучаются для примесей в конденсате Бозе-Эйнштейна [2,3]. Современный интерес к изучению поляронных эффектов в ультра-холодных средах обусловлен разнообразием настраиваемых режимов взаимодействия, которые ранее не встречались при исследовании твердых тел [4]. В тоже время, аналитические подходы, основанные на теории возмущений [5] и вариационных методах [6], дают противоречивые предсказания для сильного взаимодействия даже в одномерном случае.

Применение численных алгоритмов, таких как квантовые методы Монте-Карло, для изучения квантовых примесных моделей обычно позволяет рассматривать многочастичные явления в широком диапазоне сил взаимодействия [7]. Однако, при моделировании туннелирования полярона с помощью существующих вариантов этого алгоритма наблюдается экспоненциальное увеличение времени вычислений с числом мод бозонного поля. В рамках данной работы нами был предложен новый вариант квантового метода Монте-Карло, который был применен для задачи о туннелировании единичной примеси Фрелиха-Боголюбова [4] в двухъямном потенциале. Выполнив аналитическое продолжение корреляционных функций примеси, мы вычислили плотность состояний для различных режимов взаимодействия в пределе низких температур, а также оценили эффективную массу квазичастицы. С помощью предложенного квантового метода Монте-Карло, были найдены многочастичные эффекты резонансного увеличения времени туннелирования частицы (phonon-assisted tunneling) для слабой силы связи, а также автолокализация примеси при сильном взаимодействии с конденсатом Бозе-Эйнштейна [8]. Для промежуточной силы взаимодействия наблюдается непрерывный переход между двумя явлениями. Данные эффекты могут быть обнаружены в существующих экспериментах [3], если примесный атом будет находиться в потенциале двух близких гармонических ловушек. Полученные результаты могут иметь большое значение для понимания физики холодных атомов в оптических ловушках и квантовых точек.

Благодарности.

Landau L. D., Pekar S. I. Effective mass of a polaron //Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 1948. – Т. 18. – №. 5. – С. 419-423.

Cucchietti F. M., Timmermans E. Strong-coupling polarons in dilute gas Bose-Einstein condensates //Physical review letters. – 2006. – Т. 96. – №. 21. – С. 210401.

Jørgensen N. B. et al. Observation of attractive and repulsive polarons in a Bose-Einstein condensate //Physical review letters. – 2016. – Т. 117. – №. 5. – С. 055302.

Tempere J. et al. Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron //Physical Review B. – 2009. – Т. 80. – №. 18. – С. 184504.

Christensen R. S., Levinsen J., Bruun G. M. Quasiparticle properties of a mobile impurity in a Bose-Einstein condensate //Physical review letters. – 2015. – Т. 115. – №. 16. – С. 160401.

Grusdt F., Astrakharchik G. E., Demler E. Bose polarons in ultracold atoms in one dimension: beyond the Fröhlich paradigm //New Journal of Physics. – 2017. – Т. 19. – №. 10. – С. 103035.

Ardila L. A. P., Giorgini S. Impurity in a Bose-Einstein condensate: Study of the attractive and repulsive branch using quantum Monte Carlo methods //Physical Review A. – 2015. – Т. 92. – №. 3. – С. 033612.

Popova A. S., Tiunova V. V., Rubtsov A. N. Quantum Monte Carlo simulation of BEC-impurity tunneling //Physical Review B. – 2021. – Т. 103. – №. 15. – С. 155406.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.087

ЭМПИРИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ЧИСТЫХ ВЕЩЕСТВАХ, ВКЛЮЧАЯ АЛЛОТРОПИЧЕСКИЕ МОДИФИКАЦИИ

Прокофьев С.И.

Институт физики твердого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, prokof@issp.ac.ru

В рамках модели, рассматривающей границы зерен как однородный жидкоподобный слой в твердой матрице, получены эмпирические выражения, которые связывают температурные зависимости усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен в чистых веществах с температурой плавления, энтальпией плавления и молярным объемом чистых элементов в твердом состоянии при температуре плавления. [1,2] Недавно, была предложена методика, позволяющая применять эти уравнения для оценки температурных зависимостей усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен в аллотропических модификациях элементов. [3] Предложенные эмпирические соотношения могут быть полезны для количественной оценки усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен в элементах и их аллотропических модификациях при не слишком низкой (выше 0.6) гомологичной температуре. Оцененные ошибки определения параметров уравнений указывают, что ожидаемая точность эмпирических оценок поверхностного натяжения сопоставима с точностью их экспериментального определения. В данной работе приведены параметры температурных зависимостей усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен ряда элементов и их аллотропических модификаций.

Благодарности.

Данная работа сделана в рамках госзадания ИФТТ РАН.

Прокофьев, С.И. // Изв. РАН. Сер. Физ. – 2016. – Т. 80. – № 6. – С. 796-799.
Prokofjev, S.I. // J. Mater. Sci. – 2017. – V. 52. – № 8. – P. 4265-4277.
Prokofjev, S.I. // J. Mater. Sci. – 2019. – V. 54. – № 23. – P. 14554-14560.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.088

О ФОРМИРОВАНИИ РЕЛЬЕФА НА ПОВЕРХНОСТИ ТАНТАЛА В ПРОЦЕССЕ ЕГО СПЕКАНИЯ

Пушкарев Б.Е.[1], Никонова Р.М.[1], Ладьянов В.И.[1], Рыбин С.В.[2]

[1]*Научный центр металлургической физики и материаловедения УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия,*

[2] ОАО «Элеконд», Удмуртская Республика, г. Сарапул, e-mail: pbazhen@yandex.ru

Одним из основных материалов для изготовления электролитических оксидно-полупроводниковых конденсаторов с высоким удельным зарядом являются порошки тантала Та высокой степени очистки. Спекание порошка Та в вакууме при высоких температурах (1300–2000^{0}С) является неотъемлемой частью технологического процесса получения конденсаторов. За счёт формирования высокой пористости получаемых спеков удаётся получить требуемую высокую удельную площадь анодной обкладки. При этом структурные изменения, происходящие в процессе высокотемпературного нагрева порошков Та, могут оказывать существенное влияние на последующее формирование наносимого оксидного слоя пентаоксида тантала Ta_2O_5, являющегося в получаемых конденсаторах диэлектриком.

Объектом исследований были порошки Та до и после спекания при температурах 1250 (Та1), 1800 и 1920ºС (Та2). В результате проведённых исследований с применением метода растровой электронной микроскопии показано, что спекание Та2 при температурах 1800 и 1920ºС приводит к формированию крупных спёков, на поверхности которых фиксируется рельеф по типу «песчаного дна» (рис.). При этом по данным рентгеноструктурного анализа происходит увеличение областей когерентного рассеяния (ОКР) по сравнению с исходным порошком. В случае спекания Та1 при более низкой температуре - 1250ºС на поверхности порошков формирование указанного рельефа не обнаружено, а также не происходит укрупнение структурных компонентов порошка. Наблюдаемый рельеф «речного дна», вероятно, будет оказывать влияние на формирование диэлектрического слоя Ta_2O_5 и может привести к появлению каких-либо дефектов при последующих термических воздействиях, что негативно сказывается на его диэлектрические свойства.

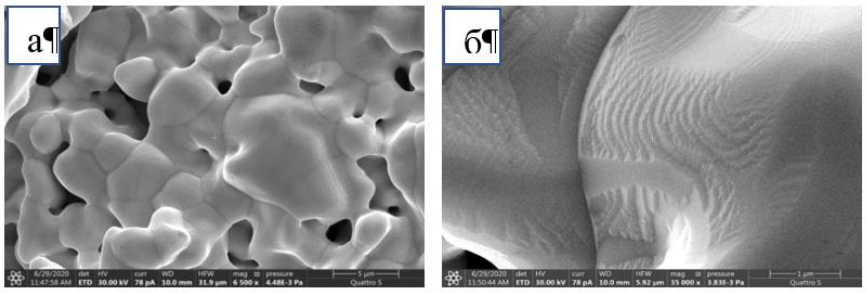


Рис. Общий вид и детализация поверхности образца, Тспекания – 1800ºС.

Рассмотрены две феноменологически модели формирования на поверхности спеков волнообразного рельефа. В рамках первой модели твердофазное спекание рассматривается как течение вязкой жидкости. В тонком поверхностном слое рельеф формируется в процессе переноса вещества. При высоких температурах спекания ламинарное течение вязкой жидкости может перейти в турбулентное, формируя на свободной поверхности рельеф, похожий на песчаное дно на мелководье. Вторая модель основана на возрастании величины ОКР. При высоких температурах начиная с поверхности идет укрупнение ОКР, которое, как правило, происходит за счет коррекции малоугловой разориентировки соседних областей. Кумулятивный эффект такой коррекции может привести к появлению рельефа на свободной поверхности.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.089

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Пчелинцев К.П., Ветрова Н.А., Шашурин В.Д.
Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана
г. Москва, Россия, pkp@bmstu.ru, vetrova@bmstu.ru, schashurin@bmstu.ru

В настоящее время в современных радиоэлектронных системах в качестве нелинейного элемента широко применяется резонансно-туннельный диод (РТД) [1,2]. В рамках решения задачи обеспечения требуемого уровня надежности РТД необходимо определить конструкторско-технологические параметры элемента, обеспечивающие заданный уровень эксплуатационных характеристик [3]. При этом ключевую роль имеет модель прогнозирования эксплуатационных характеристик диода с учетом деградационных изменений, протекающих с течением времени под воздействием внешних факторов. В качестве основных структурных блоков в данной модели можно выделить модель токопереноса и модели деградации.

Модель токопереноса позволяет осуществить прогнозирование электрических характеристик РТД в зависимости от топологии и химического состава полупроводниковой структуры в заданный момент времени. В свою очередь деградационные модели позволяют оценить изменения структуры в процессе эксплуатации, в том числе в условиях жесткого воздействия внешних факторов. Таким образом, в рамках разработки модели прогнозирования изменений эксплуатационных характеристик во времени необходимо выявить основные деградационные механизмы, определить энергию активации и коэффициенты диффузии соответствующих процессов, кроме того вычислить эмпирические поправочные коэффициенты комбинированных расчетно-экспериментальных моделей токопереноса. Достижимость высокого уровня точности и достоверности таких деградационных моделей вызывает сомнения.

Авторами предложено использование искусственной нейронной сети (ИНС) [4] для выявления и аппроксимации сложных, в том числе скрытых, функциональных зависимостей эксплуатационных характеристик РТД от конструкторско-технологических параметров с учетом времени и воздействия внешних факторов. Представлены результаты применения обученной ИНС прямого распространения в рамках разработки численной модели оценки эксплуатационных характеристик РТД. Предложенная модель позволяет избежать ввода дополнительных поправочных эмпирических коэффициентов, в случае использования экспериментальных данных для обучения. Так же использование обученной нейросетевой модели позволяет существенно снизить затрачиваемые вычислительные ресурсы, что делает ее использование привлекательным для итерационного решения оптимизационной задачи обеспечения требуемого уровня надежности РТД.

Wang J., Al-Khalidi A., Zhang C., Ofiare A.,L. Wang L., Wasige E., Figueiredo J.M.L. // 10th UK-Europe-China Workshop on Millimetre Waves and Terahertz Technologies (UCMMT) . – 2017. – pp. 1-4
Kasagi K., Suzuki S., Asada M // J. Appl. Phys. – 2019. – № 125. – pp. 151601.1-151601.7
Baba R., Stevens B.J., Mukai T., Hogg R.A. // IEEE Journal of quantum electronic. – 2018. – VOL. 54. – №. 2,
Cao W., Wang X., Ming Z., Gao J. // Neurocomputing. – 2018. – Vol. 275. – pp. 278-287

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.090

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА q = 4 НА РЕШЕТКЕ КАГОМЕ

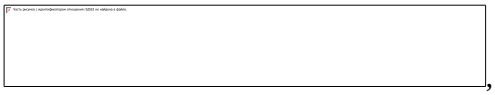
Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А.

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Махачкала, Россия, sheikh77@maul.ru

В настоящее время исследование фазовых переходов (ФП) и низкотемпературных свойств соединений, имеющих решетку кагоме привлекает большое внимание. Это связано с тем, что в таких соединениях, вследствие особой геометрии решетки могут возникать фрустрации. Интерес к таким системам обусловлен тем, что фрустрированные магнетики имеют широкие перспективы для практического применения [1,2].

В данной работе нами проводится исследование двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина q=4 на решетке кагоме с учетом антиферромагнитных обменных взаимодействий вторых ближайших соседей. Учет антиферромагнитных обменных взаимодействий вторых ближайших соседей в этой модели может привести к возникновению фрустраций.

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний q=4 с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:



,

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1>0$) и антиферромагнитного ($J_2<0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами S_i - S_j и S_i – S_k, r= $|J_2/J_1|$ - величина взаимодействия вторых ближайших соседей.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [3,4]. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга - Ландау метода МК [5], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что в интервалах $0.0 \le r \le 0.4$ и $0.6 \le r \le 1.0$ наблюдается ФП первого рода. Для значения r = 0.5 наблюдается вырождение основного состояния, и система становится фрустрированной.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 19-02-00153-а.

Kassan-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., Proshkin A.I. // J. Magn. Magn. Mater. – 2015. – V. 384. – P. – 247-254.
Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. // Phys. B: Condens. Matt. – 2015. – V. 476. – P. – 1-5.
Murtazaev A.K., Kurbanova D.R., Ramazanov M.K. // Physica A. – 2020. – V. 545. – P. – 123548-1-123548-5.
Masrour R., Jabar A. // Physica A. – 2018. – V. 491. – P. – 926-930.
Wang F., Landau D.P. // Phys. Rev. E. – 2001. – V. 64. – P. – 0561011–1-0561011–5.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.091

GENERATION OF BIREFRINGENT NANOGRATINGS IN THE BULK OF TRANSPARENT DIELECTRICS UNDER THE ACTION OF ULTRASHORT LASER PULSES OF VARIABLE DURATION

Рупасов А.Е.[1,2*], Данилов П.А.[1,2], Кудряшов С.И.[1,2], Золотько А.С.[1], Смаев М.П.[1,3], Ионин А.А.[1], Заколдаев Р.А[2]

Физический институт им. П.Н. Лебедева, 119991 Москва, Россия
Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Россия
Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 125047 Москва, Россия
rupasovan@lebedev.ru*

Femtosecond laser recording of birefringent subwavelength nanogratings in the bulk of dielectrics has been studied for almost two decades [1, 2], promising a variety of interesting applications in the field of polarizing macrooptics [3]. The formation of subwavelength nanogratings in a plane perpendicular to the optical axis of laser radiation remained unexplained for a long time, and only in recent years have the scattering processes been considered backward incident ultrashort laser pulses on the cumulative multipulse damage of the optical homogeneity of dielectrics and the interference of the incident and scattered radiation. At the same time, the very formation of subwavelength nanogratings as a result of nanoscale transport of chemical components of glass (mainly oxygen) and the corresponding anisotropic periodic modulation of the refractive index. On the other hand, recently, for various processes of micro- and nanomodification of matter in the bulk of dielectrics, ultrashort laser pulses of longer - subpicosecond and picosecond duration have become more widely used [4].

In this work, we carried out model experiments on recording birefringent microstructures under the action of focused ultrashort femto-picosecond laser pulses with several fixed pulse energy levels at a fixed depth in the bulk of fluorite and nanoporous glass.

The source of femtosecond laser pulses was a Satsuma laser system [5], the main one is the ytterbium fiber laser. Installation includes generator with stretcher, multi-pass amplifier, output compressor and acousto-optic modulator. The laser uses a pump diode with a wavelength of 850 nm. Management is carried out through the control panel or the control program on external computer. The experimental setup allows obtaining pulses duration 300 fs, frequency up to 500 kHz. At the output of the system, the energy in the pulse is up to 10 μJ for a wavelength of 1030 nm, and for 515 nm up to 3.5 μJ.

Samples are plates (cut of a single crystal, with a cubic lattice 111) calcium fluoride, 2 mm thick and 15 mm in diameter, and a porous glass plate 1.5 mm thick (pore size about 20 nm). The plate was attached to holder with tilt angle adjustment, the holder was mounted on a motorized three-axis platform Standa. The structures were recorded in the area of 100x100 μm. To achieve better structure homogeneity, the number of pulses per point should be exceed 10000. In such processing modes, recording speeds of 20 up to 100 μm /s.

The birefringence parameters of the modified region of the sample were analyzed using separate lines (Fig.1) using a polarimetric system based on an Olympus BX-61 optical microscope and a polarimetric analyzer Abrio IM 2.2

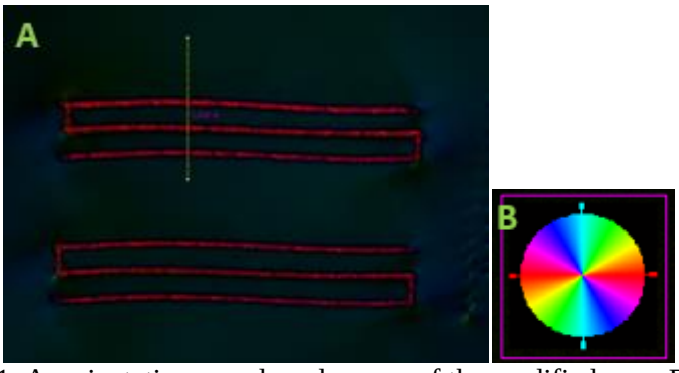


Figure 1. A- orientation pseudo-color map of the modified area; B- for Abrio paintings, color describes the direction of the slow axis.

In conclusion, in the mode of scanning at a fixed depth in the volume of a wide-gap dielectric (fluorite) plate with a high optical stability under the action of hard-focused laser pulses with a wavelength birefringent microstructures are recorded. The dependences of the phase shift of microstructures on the energy and radiation intensity for orthogonal polarizations have a threshold character and a linear form when presented in coordinates specified by the proposed in the work a new model of the formation of such birefringent microstructures. On the latter in the scale of an ultrashort laser pulse, interface plasmons are excited and interfere, and an interference small-scale standing wave of the electromagnetic field and ionization is fixed in the material in the form of arrays of transverse nanogratings of local material modification and its refractive index with the orientation of the strokes, perpendicular to the laser polarization.

Благодарности.
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 20-71-10103)

Shimotsuma, Y., Kazansky, P. G., Qiu, J., & Hirao, K. //Physical review letters. – 2003. – Т. 91. – №. 24. – С. 247405..
C. Hnatovsky, R. S. Taylor, P. P. Rajeev, E. Simova,V. R. Bhardwaj, D. M. Rayner, and P. B. Corkum // Appl. Phys. Lett. 87, 014104 (2005).
R. Drevinskas and P. G. Kazansky // APL Photonics 2(6), 066104 (2017).
X. Li, J. Xu, Z. Lin, J. Qi, P. Wang, W. Chu, Z. Fang, Z. Wang, Z. Chai, Y. Cheng // Applied Surface Science 485, 188 (2019).
Rupasov A. E., Danilov P. A., Smaev M. P., Kovalev M. S., Zolot'ko A. S., Ionin A. A., Kudryashov S. I. // Opt. Spektrosk. 2020, pp. 918-922.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.092

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЭКСИТОНЫ В ZnMnO.

Соколов В.И.[1], Груздев Н.Б.[1], Меньшенин В.В.[1], Вохминцев А.С.[2], Савченко С.С.[2], Вайнштейн И.А.[2], Емельченко Г.А.[3]

1. Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия, visokolov@imp.uran.ru
2. Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия.
3. Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия.

Примеси 3d-металлов в полупроводниках II-VI:3d создают широкие полосы с переносом заряда в спектрах оптического поглощения, ниже края которых наблюдаются донорные или акцепторные экситоны. Наиболее достоверно они регистрируются модуляционным методом электропоглощения. В оптическом спектре монокристаллов ZnMnO наблюдается широкая интенсивная полоса примесного поглощения, что существенно отличается от слабых пиков внутрицентрового поглощения, наблюдаемого для других полупроводинков II-VI:Mn. Эта полоса интерпретировалась как результат переходов с переносом заряда в зону проводимости $d^5 + \hbar\omega \rightarrow d^4 + e$. Недавно ниже края примесного поглощения ZnMnO были обнаружены узкие линии a, b, c, d при температурах 4.2 и 77.3 K, интерпретируемые, как локализованные экситоны [1,2]. В настоящей работе исследовано влияние температуры на локализованные экситоны в диапазоне 7-300 K.

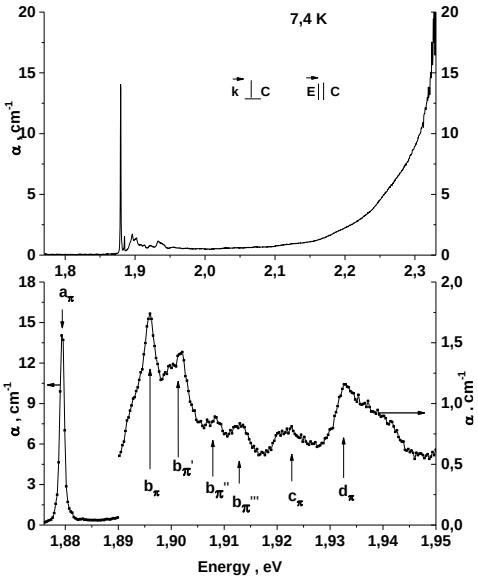


Рис. 1. Спектры оптического поглощения $Zn_{0,9991}Mn_{0,0009}O$

На рис. 1 представлены линии и край примесного поглощения для π-поляризации. Спектры регистрировались с лучшим разрешением, чем в [1,2] и поэтому выявлено больше слабых линий. С ростом температуры интенсивности линий ослабляются и практически исчезают при 140 K. Первые a_σ и a_π линии имеют лоренцевскую форму. Полуширина линии (FWHM) a_π возрастает от 1 meV (при 7,4 K) до 14 meV (при 110 K). Энергетические положения всех линий с ростом температуры практически не меняются. Край примесного поглощения при 7.4 K составляет 2,29 eV для σ- и 2,33 eV для π-поляризаций, а с ростом температуры смещается в сторону меньших энергий.

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки России (тема «Электрон» №АААА-А18-118020190098-5, тема «Квант» №АААА-А18-118020190095-4), при поддержке научного проекта Минобрнауки РФ FEUZ-2020-0059 и госзадания, тема №0032-2017-0001.

Соколов В.И., Груздев Н.Б., Важенин В.А., Фокин А.В., Дружинин А.В, // ФТТ. – 2019. – Т. 61. – вып. 5. – С. 817-821.
Соколов В.И., Груздев Н.Б., Важенин В.А., Фокин А.В., Королёв А.В., Меньшенин В.В. // ЖЭТФ. – 2020. – Т. 157. – вып. 5. – С. 814-823.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.093

NEW APPROACH TO THE LATTICE VIBRATION PROPERTIES AND MAGNETIC HEAT CAPACITY OF ANTIFERROMAGNETIC CHAIN TERNARY CHALCOGENIDES: EXAMPLE OF $RbFeSe_2$

A.G. Kiiamov[1], Z. Seidov[2], V. Tsurkan[3, 4], D. Croitori[4], H.-A. Krug von Nidda[3], A. Günther[3], F. Mayer[3], H.-C. Wille[5], I. Sergueev[5], O. Leupold[5], D.A. Tayurskii[1], and L.R. Tagirov[1,6]

[1] *Institute of Physics, Kazan Federal University, 420008 Kazan, Russia*
[2]*Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Sciences, AZ-1143 Baku*
[3]*EP V, EKM, Institute of Physics, University of Augsburg, D-86135 Augsburg*
[4]*Institute of Applied Physics, MD-20208 Chisinau*
[5]*Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, D-22607 Hamburg, Germany*
[6]*Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, Russia.*
ltagirov@mail.ru

The ternary iron chalcogenides $AFeX_2$ (A =K, Rb, Cs, Tl; X = S, Se) are quasi-one-dimensional antiferromagnets [1]. Chains of edge-sharing [FeX_4] tetrahedra form a quasi-one-dimensional spin-system. Specific heat measurements show a small λ-anomaly in $C(T)$ and are treated combining Debye- and Einstein-type contributions to the lattice vibration component of $C(T)$. The magnetic contribution to the specific heat obtained by subtracting of the lattice contribution results in an unrealistically low value of the entropy change ΔS at the Néel temperature T_N indicating a significant spin reduction and the existence of AFM fluctuations even far from T_N (see citations in Refs. [2-5]). We developed procedures for calculating the element-specific phonon density of states (PDOS) using the density functional theory (DFT) [4] for $AFeX_2$ chalcogenides, which shows complicated, strongly non-Debye and Einstein dispersion of phonons in these quasi-one-dimensional compounds.

To rectify the magnetic contribution to $C(T)$ and estimate the magnetic ΔS at the order-disorder transition in a quasi-1D spin-system we propose the following scenario:

- phonon spectrum and element-specific PDOS are calculated using modern *ab initio* DFT algorithms and software; there are no free parameters in the calculations, except calibration of the frequency scale;
- the calculated PDOS for iron is used to fit the results of experiments on ^{57}Fe nuclear inelastic scattering providing iron PDOS in output; the fit results in the frequency calibration coefficient (fcc);
- the calculated PDOS for iron is used to fit the results of the experimental temperature dependence of the ^{57}Fe Lamb-Moessbauer factor; the fit results in fcc;
- if available, the total calculated PDOS is used to fit the infrared absorption measured data; the fit results in fcc;
- with the judge of fcc, the $C(T)$ is calculated, subtracted from experiment, and ΔS is evaluated. The approach is verified by the application to the $RbFeSe_2$ compound [4,5] from which an intermediate spin state $S = 3/2$ has been anticipated to be most likely realized for the Fe^{3+} ions in $RbFeSe_2$.

This work was supported by the joint RFBR-DFG project No 19-52-12068 (RFBR) and No KR 2254/3-1 (DFG).

[1] M.R. Harrison, M.G. Francesconi, Coord. Chem. Rev. – 2011. – V.255. – P.451–458.
[2] Z. Seidov, *et al.*, Phys. Rev. B. – 2016. – V.94. – Art.134414.
[3] Z. Seidov, *et al.*, Bull. Rus. Acad. Sci.: Phys. – 2017. – V.81– P.885–887.
[4] A.G. Kiiamov, *et al.*, Phys. Rev. B. – 2018. – V.98. – Art.214411.
[5] A. Kiiamov, *et al.*, Appl. Sci. (MDPI). – 2020. – V.10. – Art. 7212.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.094

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ НАНОСКОПИЯ ОДИНОЧНЫХ ПАР КОЛЛОЙДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК.

Тарасевич А.О.[1,2,3], Наумов А.В.[1,2], Баев А.А.[4], Еремчев И.Ю.[1,2]
[1]*Московский педагогический государственный университет, г. Москва, Россия*
[2]*Институт спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк, Россия*
[3]*Высшая школа экономики, г. Москва, Россия*
[4]*Поволжский государственный технологический университет, г. Йошкар-Ола, Россия*
ao.tarasevich@gmail.com

В работе рассматриваются методы и результаты экспериментального исследования люминесцентных свойств образцов с одиночными парами коллоидных полупроводниковых квантовых точек типа ядро/оболочка. В исследуемых образцах расстояние между квантовыми точками в парах было намного меньше длины волны их люминесценции, тогда как расстояния между отдельными парами были значительно больше длины волны люминесценции. Также расстояние между квантовыми точками в парах существенно превосходило ферстеровский радиус, что говорит о низкой эффективности обмена энергией между точками по механизму Ферстера. Рассматриваемые пары можно считать независимыми «одиночными» объектами (димерами), внутри которых присутствует диполь-дипольное взаимодействие. Основное внимание в работе уделялось изучению возможного проявления диполь-дипольного взаимодействия в статистике фотонов люминесценции пар одиночных квантовых точек. Исследование пространственных свойств одиночных пар квантовых точек проводилось с использованием методов флуоресцентной микроскопии сверхвысокого разрешения. Статистика фотонов люминесценции димеров исследовалась с использованием техники коррелированного по времени счета одиночных фотонов в схеме Хэнбери Брауна и Твисса. Основным анализируемым параметром являлось значение нормированной кросскорреляционной функции второго порядка в области нулевых задержек ($g^{(2)}(0)$). Вывод о влиянии диполь-дипольного взаимодействия на статистику фотонов люминесценции делался на основе сравнения измеренного значения $g^{(2)}(0)$ со значением, рассчитанным аналитически для пары невзаимодействующих излучателей. В докладе будут обсуждаться вопросы корректного анализа $g^{(2)}(0)$ в случае наличия мерцания люминесценции одиночных квантовых точек в димере. В работе также оценен вклад мультиэкситонной люминесценции и шума в измеряемые значения $g^{(2)}(0)$.

Методы исследования наноструктурированных материалов развиваются в рамках темы НИР МПГУ “Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике” (проект АААА-А20-120061890084-9). Исследования диполь-дипольного взаимодействия между квантовыми точками в димерах проводилось при финансовой поддержке гранта РНФ №17-72-20266.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.095

КВАНТОВАЯ ЕМКОСТЬ ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА С ДВУМЯ ЗАТВОРАМИ

Федоров И.Б., Капустин А.А., Дорожкин С.И.

Институт физики твердого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, sshhookkeerr@gmail.com

Выполнены экспериментальные измерения и расчеты квантовых поправок к емкостям между затворами полевого транзистора и его каналом, находящимся между этими затворами. Подобные структуры в настоящее время широко используются при изучении свойств двухслойных электронных систем. Влияние конечной величины сжимаемости двумерного электронного газа (ДЭГ) на емкости исследовалось в экспериментах с магнитным полем, приводящим к квантованию Ландау энергетического спектра двумерных электронов и осцилляциям их термодинамической плотности состояний (ТПС) $D = \partial n_s/\partial\mu$ при изменении величины магнитного поля, где n_s – плотность электронов в ДЭГ, μ – химический потенциал ДЭГ. Установлено, что в случае, когда канал транзистора образован двумя слоями двумерных электронов, минимумы в емкости, наблюдающиеся в функции магнитного поля при больших значениях факторов заполнения уровней Ландау, соответствуют целочисленному заполнению в слое, ближайшем к затвору, который используется для измерений емкости (панель (a) на рис.1). Это наблюдение позволяет характеризовать свойства отдельных электронных слоев в двухслойных электронных системах.

Полученная нами формула для емкости C_i между затвором и каналом, образованным двойной квантовой ямой, имеет следующий вид :

$$\left(\frac{C_i}{S_i}\right)^{-1} = \frac{1}{e^2}\left[\lambda d_i + \left(\lambda d + \langle 1 + \frac{d}{d_j} + \frac{d_i}{d_j}\rangle D_j^{-1}\right)\left\{1 + \lambda d D_i + \langle 1 + \frac{d}{d_j}\rangle \frac{D_i}{D_j}\right\}^{-1}\right] \quad (1)$$

Здесь $\lambda = 4\pi e^2/\epsilon$, S_{FG} и S_{BG} – площади переднего и заднего затворов, соответственно, пара индексов (i, j) принимает значения (FG, BG) либо (BG, FG), d_i (d_j) – расстояние от затвора i (j) до ближайшей к нему квантовой ямы, d – расстояние между квантовыми ямами, $D_{FL} = \partial n_{FL}/\partial\mu_{FL}$ ($D_{BL} = \partial n_{BL}/\partial\mu_{BL}$) – величина ТПС в верхнем (нижнем) электронном слое, ϵ – диэлектрическая проницаемость материала гетероструктуры,.

Неожиданным результатом явилось предсказываемое теоретически (см. формулу (2)) и наблюдаемое экспериментально (панель (b), рис.1) совпадение нормированных магнетоемкостей, измеренных между различными затворами и однослойной электронной системой:

$$C_i^{norm} = \frac{C_i(H)}{C_i(H=0)} = \left(1 + \frac{1}{\lambda}\langle\frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j}\rangle D^{-1}(H=0)\right)\left\{1 + \frac{1}{\lambda}\langle\frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j}\rangle D^{-1}(H)\right\}^{-1} \quad (2)$$

Здесь $D = \partial n_s/\partial\mu$ – ТПС заполненного электронного слоя.

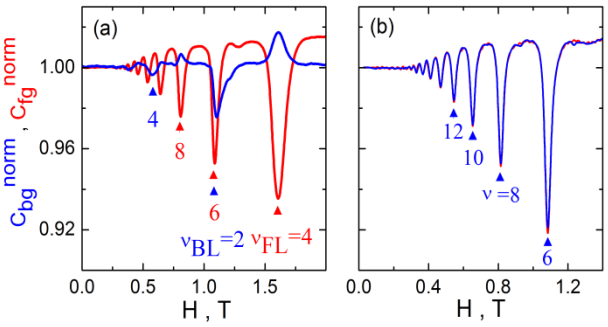


Рисунок1: Зависимости нормированных емкостей от магнитного поля для двух заполненных слоев (панель (a)) и для одного заполненного слоя в системе (панель (b)). Числами обозначены факторы заполнения уровней Ландау в соответствующих электронных слоях.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.096

СПЕКТРЫ ПРОПУСКАНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ ТГЦ ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ МАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ

Фомин Л.А.[1], Криштоп В.Г.[1,2], Жукова Е.Н.[2,5], Загорский Д.Л.[3], Долуденко И.М.[3], Чигарев С.Г.[4], Вилков Е.А.[4].

[1]ИПТМ РАН, ул. Академика. Осипьяна, д. 6., г. Черноголовка, Россия
[2]МФТИ, Институтский переулок, д.9., г. Долгопрудный, Россия
[3]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Ленинский пр.,59
[4]Фрязинский филиал ИРЭ РАН, пл. Введенского, 1, МО., г.Фрязино, Россия
[5]Институт общей физики РАН, ул. Вавилова, 38, Москва, Россия, fomin@iptm.ru

Металлические нанопроволоки (НП), получаемые методом матричного синтеза, вызывают особый интерес среди наноматериалов. Достоинством метода является его вариабильность, возможность получать в порах матрицы различные типы НП. Первые работы были посвящены осаждению НП из одного металла, затем были получены многокомпонентные НП-гомогенные (т.н. сплавы) и гетерогенных (т.н.слоевые). Недавно было предложено применение структур на основе НП для генерации ТГц-излучения. В теоретических работах [1, 2] была предсказана возможность создания лазера, работающего в диапазоне частот 3−40 THz в структурах с переходами между магнитными металлами, при протекании через них токов 10^5−10^7 А/см^2. Был также предсказан эффект выпрямления электрического тока (диодный эффект) в средах с неколлинеарной и некомпланарной магнитной структурой [3] в области резонансных частот для спин-флип переходов, лежащих в ТГц диапазоне, что открывает путь для создания детекторов ТГц излучения. В этой связи представляет интерес изучение спектральных характеристик гетерогенных НП в данном диапазоне частот. В данной работе были изучены спектры излучения и пропускания массивов гетерогенных НП из двух ферромагнитных материалов- Ni/Co, FeNi/Co и Ni/Fe на ИК Фурье-спектрометре Bruker «Vertex80v» в воздушной среде в диапазоне 15 - 250 ТГц. Найдено, что в интервале 15 - 20 ТГц наблюдается частокол пиков, связанных с НП в спектрах отражения и малая интенсивность сигнала в спектрах пропускания, при увеличении частоты 20 - 35 ТГц спектры пропускания для НП из разных материалов близки и похожи на спектр мембраны, а спектры отражения имеют большие пики. В диапазоне 55 - 150 ТГц коэффициент пропускания мембраны, в которой находится массив НП составляет около 90%, а в присутствии НП он уменьшается (например, до 20% для проволок Ni/Co). Появляются дополнительные пики на частотах 56 и 60 ТГц для НП из Ni/Co, 73 и 113 ТГц для FeNi/Co НП и 57, 72 и 114 ТГц для Ni/Fe НП. При частотах, 20 - 35 ТГц влияние атмосферы настолько сильно что сигнал от НП невозможно выделить. Таким образом, гетерогенные НП сильно реагируют на излучение в диапазоне 15 - 20 ТГц, что предполагает возможность изготовления на их основе детектор ТГц излучения. В дальнейшем планируется исследовать диапазон частот 1 - 15 ТГц, а также частично стравить мембрану и провести спектральные измерения в вакууме, чтобы исключить поглощение ТГц излучения полимером и атмосферой.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Госзадания № 075-00355-21-00 и в рамках Госзадания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при частичной поддержке гранта РФФИ

Кадигробов А., Шехтер Р.И., Джонсон М. // ФНТ. 2005. Т. 31. В. 3-4. С. 463–470.
Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е., Чигарёв С.Г.и др // Письма в ЖТФ. 2011.С.16–22
Fraerman A.A., Udalov O.G. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77 P. 094401

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.097

ПИК-ЭФФЕКТ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ RTE3: ВРЕМЕННАЯ, ТЕМПЕРАТУРНАЯ, И ТОКОВАЯ ЭВОЛЮЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ

Фролов А.В.[1], Орлов А.П.[1,2], Воропаев Д.М.[3], Синченко А.А.[1,4], Монсо П.[5]

[1] *Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия,* fralek@mail.ru
[2] *Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, г. Москва, Россия*
[3] *Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия*
[4] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*
[5] *Univ. Grenoble Alpes, Inst. Neel, CNRS, г. Гренобль, Франция*

Трителлуриды редкоземельных элементов (RTe_3, R: La, Gd, Tb, Dy, Er, Tm, …) – единственный на настоящий момент класс квазидвумерных соединений, в которых надёжно наблюдается перенос заряда волной зарядовой плотности – т.н. скольжение ВЗП. Данный эффект отчетливо проявляется в мостиковых структурах, ориентированных в направлении существования ВЗП: на дифференциальных вольт-амперных характеристиках наблюдается возрастание проводимости при достижении определённого порогового значения электрического поля, E_t. Пороговое поле определяется пиннингом – взаимодействием ВЗП с неоднородностями кристаллической решётки. В квазиодномерных нитевидных соединениях величина E_t обычно не зависит от времени и определяется качеством кристалла и его электронными свойствами. Обнаружено, что в соединениях RTe_3 при выдержке образца при определённой температуре ниже пайерлсовского перехода величина E_t со временем возрастает. В работе исследована временная и температурная эволюция порогового поля Et в ряде квазидвумерных соединений семейства RTe3 в широком диапазоне температур. Получены следующие результаты:

1) Временная зависимость порогового поля при постоянной температуре имеет асимптотический вид.
2) При более низких температурах наблюдается более медленный рост порогового поля, с меньшей амплитудой.
3) После выдержки образца при температуре T_0 на температурной зависимости порогового поля возникает пик с максимумом в T_0, что напоминает пик-эффект в сверхпроводниках, проявляющийся на зависимостях критического тока от магнитного поля или от температуры.
4) Кратковременный нагрев образца после выдержки при температуре T_0, приводит к тому, что значение порогового поля в T_0 возвращается к исходному, а зависимость порога от времени приобретает линейный вид, пик исчезает.
5) При пропускании через образец токов выше порогового, I_t, рост порогового поля сильно замедляется, а также, если образец уже выдерживался при данной температуре, может наблюдаться частичное уменьшение величины порогового поля в сторону исходного.

Обнаруженные эффекты предположительно связаны с тем, что после охлаждения образца к определённой температуре мы наблюдаем неравновесное состояние ВЗП. Рост порога связан с медленной релаксацией кристалла к равновесному состоянию с высоким значением порогового поля.

Работа поддержана Государственным заданием ИРЭ РАН.

Frolov A.V., Orlov A.P., Hadj-Azzem A., Lejay P., Sinchenko A.A., Monceau P. //Physical Review B. – 2020. – Т. 101. – №. 15. – С. 155144.
Frolov A. V., Orlov A. P., Sinchenko A. A., Monceau P. //JETP Letters. – 2019. – Т. 109. – №. 3. – С. 203-206.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.098

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧНОГО КОЛИЧЕСТВА ПЯТИСЛОЙНЫХ БЛОКОВ В ПЛЁНКАХ BI2SE3 С ПОМОЩЬЮ ОПТИЧЕСКОГО МИКРОСКОПА

Фролов А.В.[1], Орлов А.П.[1,2], Темирязев А.Г.[3]

[1] *Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия,* fralek@mail.ru

[2] *Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, г. Москва, Россия*

[3] *Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Фрязинский филиал, Фрязино, Россия*

Разработана методика изготовления атомно тонких монокристаллических плёнок топологического изолятора Bi_2Se_3 большой площади и определения их толщины с помощью оптического микроскопа. Исследованные в работе плёнки были получены на прозрачной подложке с помощью модификации метода микромеханического расщепления, с предварительной подклейкой монокристаллов на слой эпоксидной смолы [1]. С помощью оптического микроскопа определялась прозрачность плёнок в видимом диапазоне.

В результате анализа более чем 200 плёнок было установлено, что можно точно сопоставить прозрачность и количество пятислойных блоков Se-Bi-Se-Bi-Se для плёнок, состоящих из менее чем 20 пятислойников (1 пятислойник ≈ 1 нм). Зависимость коэффициента пропускания плёнки T от числа слоёв N хорошо интерполируется формулой $T = 100\%*(1+aN)^{-2}$, где a – параметр, определяющий оптическую проводимость одного пятислойного блока Bi_2Se_3. Для высоколегированных плёнок, исследуемых в данной работе, a = 0.131.

Полученный результат можно использовать для изготовления плёночных структур Bi_2Se_3 с заданной толщиной (количеством пятислойников): холловские мостики, нанопроволоки требуемого сечения, и.т.п. Также по временной эволюции прозрачности плёнок можно оценить степень окисления поверхности из-за взаимодействия с атмосферой. Установлено, что прозрачность плёнок Bi_2Se_3 медленно возрастает от времени. Возрастание наблюдается для всех исследуемых плёнок и имеет асимптотический вид, причём скорость, с которой деградирует поверхность плёнок, близка для плёнок разной толщины. Время окисления одного атомного слоя Bi_2Se_3 составляет ~ 13 дней. Полученные результаты для плёнок Bi2Se3 находятся в согласии с другими работами, в которых процесс окисления поверхности исследовался альтернативными методами [2],[3].

Таким образом, оптический метод позволяет как точно определять толщину монокристаллических плёнок Bi_2Se_3 по их прозрачности, так и оценивать степень деградации их поверхности. Знание этих параметров особенно актуально для плёнок трёхмерных топологических изоляторов, к коим относится Bi_2Se_3, где свойства поверхности существенно влияют на низкотемпературный транспорт.

Работа поддержана Государственным заданием ИРЭ РАН.

Frolov A. V. et al. //JETP Letters. – 2018. – Vol. 107. – №. 8. – P. 488-492.

Yashina L. V., Sánchez-Barriga J., Scholz M.R., Volykhov A.A., Sirotina A.P., Neudachina V.S., Tamm M.E., Varykhalov A., Marchenko D., Springholz G., Bauer G. //Acs Nano. – 2013. – Т. 7. – №. 6. – С. 5181-5191.

Green A. J., Dey S., An Y. Q., O'Brien B., O'Mullane S., Thiel B., Diebold A. C. //Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. – 2016. – Т. 34. – №. 6. – С. 061403.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.099

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ МАРГАНЦЕВОГО ФЕРРИТА ПРИ ДОПИРОВАНИИ ЦИНКОМ

Фунтов К.О., Старчиков С.С., Любутин И.С.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва 119333, Россия, funtov.ko@gmail.com

Наночастицы марганцево-цинковых ферритов (MZF) крайне интересны для изучения благодаря их уникальным физическим свойствам, таким как высокая магнитная проницаемость, высокое сопротивление и намагниченность насыщения, а также высокая химическая стабильность. Благодаря этим особенностям, их можно использовать в устройствах хранения данных, электромагнитных устройствах и в качестве поглотителей микроволнового излучения. Наночастицы MZF также широко используются в биомедицине: гипертермия, МРТ, биосенсоры и в адресной доставке лекарств.

Физические свойства наночастиц MZF сильно зависят от размера, формы, покрытия, метода синтеза и стехиометрического состава. Вариации соотношения катионов металлов Mn: Zn: Fe приводят к появлению новых магнитных, структурных и электронных свойств наночастиц MZF из-за различного распределения ионов по структурным позициям.

В данной работе были синтезированы и исследованы методами TEM, XRD, SEM, элементного анализа и мессбауэровской спектроскопии серия наночастиц допированных цинком марганцевых ферритов Mn1-xZnxFe2O4, x = {0.0 - 1.0}.

Мессбауэровская спектроскопия показала, что при комнатной температуре спектры состоят из парамагнитных дублетов. При низких температурах спектры представляют собой суперпозицию из нескольких компонент, в том числе появляются магнитные компоненты от ионов железа, находящихся в магнитно упорядоченном состоянии. В процессе работы были оценены размеры частиц, степень монодисперсности, магнитные и суперпарамагнитные свойства, валентные состояния ионов железа, а также зависимость свойств от концентрации цинка в образцах.

Согласно данным магнитометрии, Мессбаэуровской и XPS спектроскопии рост содержания цинка в наночастицах приводит к перераспределению магнитных атомов Mn и Fe по тетраэдрическим и октаэдрическим узлам. Это перераспределение является определяющим для магнитных свойств материала: с помощью легирования цинком открываются возможности по точной настройке наночастиц на заданные параметры на этапе синтеза.

Благодарности.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части экспериментов по рентгеновской дифракции наночастиц.

Авторы выражают благодарность Prof. Chung-Rong Lin (Department of Applied Physics, National Pingtung University) за предоставленные образцы.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.100

СВОЙСТВА 1D ОБЛАСТЕЙ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $ErMn_2O_5$, ПРОЯВЛЯЕМЫХ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ТЕПЛОЕМКОСТИ, НАМАГНИЧЕННОСТИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Ханнанов Б.Х., Лушников С.Г., Головенчиц Е.И., Санина В.А.

Физико-Технический Институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург, Россия, khannanov@mail.ioffe.ru

$ErMn_2O_5$ относится к мультиферроикам II-го рода, в котором магнитное упорядочение с T_N= 42 K индуцирует сегнетоэлектрическое упорядочение с T_C = 37 K. Он содержит одинаковое количество ионов Mn^{3+} и Mn^{4+}, расположенных в слоях перпендикулярных оси с кристалла и при комнатной температуре имеет симметрию Pbam. Конечная вероятность туннелирования электронов между ионами Mn^{3+} и Mn^{4+} с ферромагнитными спинами (двойной обмен) приводит к появлению наноскопических областей фазового расслоения, занимающих малый объем кристалла. Равновесное состояние областей фазового расслоения формируется при балансе сильных взаимодействий: двойного обмена (с энергией E≈0.3 eV), эффекта Яна-Теллера (E≈0.8 eV) и Кулоновского отталкивания (E≈1eV), что обеспечивает существование областей фазового расслоения до температур, выше комнатной. Эти области являются мультиферроичными, т.е. обладают взаимосвязанным магнитным и электрическим полярным упорядочениями. При этом они представляют собой ферромагнитные полупроводниковые гетероструктуры, в слоях которых содержатся пары ионов Mn^{3+}-Mn^{4+} и перезаряжающие их электроны в различном соотношении. Ионы Er^{3+} (основное состояние $^4I_{15/2}$, S=3/2, L=6) обладает большим магнитным моментом (J=9.6 μ_B), в который основной вклад вносит орбитальный момент, сильно связанный с решеткой и жестко ориентирующий момент ионов Er^{3+} вдоль оси с. Обменное взаимодействие Er-Mn ориентирует и магнитные моменты пар ионов Mn^{3+}-Mn^{4+} в слоях гетероструктуры вдоль оси с.

Измерения набора ферромагнитных резонансов от слоев гетероструктуры, а также температурных зависимостей намагниченности и электрической поляризации вдоль различных осей кристалла коррелируют между собой и подтверждают наличие полупроводниковых гетероструктур. Измерения температурной зависимости теплоемкости обнаруживают аномалии при температурах магнитного и сегнетоэлектрического переходов, а также при температурах исчезновения намагниченностей и электрических поляризаций областей фазового расслоения вдоль различных осей кристалла. Такая корреляция температур указанных выше фазовых превращений, полученная различными методами, подтверждает предлагаемую картину изменений магнитных и полярных свойств в мультиферроике $ErMn_2O_5$.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.101

ОБЕСПЕЧЕНИЕ НАДЕЖНОСТИ СУБАГРМОНИЧЕСКОГО СМЕСИТЕЛЯ СВЧ РАДИСИГНАЛОВ НА БАЗЕ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА ПОСРЕДСТВОМ КОНСТРУКТОРСКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Черкасов К.В.

Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия, kvche@mail.ru

Нелинейные преобразователи частоты (ПЧ) радиосигналов являются ключевыми элементами радиотехнических систем, поскольку с их помощью выполняются основные радиотехнические преобразования. Одним из способов улучшения электрических характеристик ПЧ является использование наноэлектронных приборов, к которым относятся резонансно-туннельные диоды (РТД) на основе AlGaAs/GaAs гетероструктур, использование которых в качестве нелинейного элемента (НЭ) позволяет расширить рабочий диапазон частот до ТГц [1] и повысить помехоустойчивость ПЧ. При проектировании ПЧ радиосигналов на базе РТД помимо обеспечения заданных электрических характеристик особенно актуальна задача обеспечения надежности в заданных условиях эксплуатации. Одним из путей ее решения является изложенная в [2] методология проектирования микро- и наноприборов, предполагающая введение этапа конструкторско-технологической оптимизации (К-ТО), позволяющего определить поправки на номинальные значения параметров конструкции прибора и его электрических характеристик, максимизирующие заданную целевую функцию, при этом оставляя неизменными допуски на электрические характеристики и параметры конструкции оптимизируемого прибора.

В данном исследовании рассматривается субгармонический смеситель частоты (СГСм) СВЧ радиосигналов на второй гармонике гетеродина на базе РТД. Сравнение электрических характеристик с аналогом на базе диода с барьером Шоттки (ДБШ) показало, что применение РТД в качестве НЭ СГСм позволяет расширить динамический диапазон смесителя по 1дБ-компрессии в 3,55 раза (на 7 дБ) и повысить помехоустойчивость смесителя ценой снижения коэффициента передачи промежуточной частоты на 2,13 дБ (20,91%). Для того, чтобы компенсировать последний факт и повысить надежность исследуемого СГСм в условиях воздействия температурного фактора, проведена К-ТО электрических характеристик СГСм посредством разработанного автором программного комплекса, включающего в себя модель надежности ПЧ радиосигналов на базе РТД, позволяющую оценивать надежность по постепенным отказам в заданных условиях эксплуатации расчетными методами с учетом влияния технологических разбросов параметров конструкции ПЧ на разброс его электрических характеристик. В результате К-ТО получено сочетание параметров конструкции СГСм и РТД, позволяющее повысить гамма-процентную наработку СГСм при γ=0,99 в 1,75 раза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-37-90125/19.

Mizuta H., Tanoue T. The Physics and Applications of Resonant Tunnelling Diodes. N. Y.: Cambridge university press, 2006. P. 133

Meshkov S.A. // J. of Instr. Eng. – 2019. – V. 62. – P. 921-928.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.102

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В МАЛЫХ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦАХ

Шапошникова Т.С., Мамин Р.Ф.

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия, t_shap@kfti.knc.ru

Магнитоэлектрический эффект вызывает неизменный интерес в связи с широкими возможностями его применения [1, 2]. В последние годы были синтезированы новые материалы, обладающие более привлекательными с практической точки зрения характеристиками: более высокими температурами существования эффекта, большими значениями намагниченности и поляризации. К мультиферроикам, в которых наблюдается магнитоэлектрический эффект, относятся борациты, манганиты (в том числе редкоземельные манганиты), магниты с решеткой кагоме, феррит висмута, гексаферриты, а также композиционные материалы и гетероструктуры [3].

Зарядовое и фазовое расслоение в ряде материалов приводит к образованию малых ограниченных областей с магнитным порядком. Магнитное упорядочение в этих областях может быть неоднородным, что, в некоторых случаях, может приводить к магнитоэлектрическому отклику. В настоящей работе мы рассматриваем возможность возникновения электрической поляризации в малых магнитных частицах шарообразной формы.

Первоначально в рамках феноменологического подхода нами было получено неоднородное вихревое распределение намагниченности и связанной с ней неоднородной электрической поляризации в таких малых магнитных частицах. Микроскопический механизм такой связи намагниченности с поляризацией обусловлен взаимодействием Дзялошинского-Мории [4, 5]. Конкретный вид выражений для намагниченности и поляризации определяется геометрической формой нанообластей. Определена область существования таких состояний.

Spaldin N.A., Ramesh R. // Nat. Mater. – 2019. – V. 18. - № 3. – P. 203-212.

Fiebig M., Lottermoser T., Meier D., Trassin M. // Nat. Rev. Mater. – 2016. – V. 1. - № 8. – P. 16046.

Scott J.F. // NPG Asia Mater. – 2013. – V. 5. – e72. – P. 1-7.

Дзялошинский И.Е. // ЖЭТФ. – 1960. – Т. 37. - № 3. – С. 881.

Morya T. // Phys. Rev. – 1960. – V. 120. – № 1. – P. 91-98.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.103

НАРУШЕНИЕ СООТНОШЕНИЯ 1:3 ДЛЯ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ ЛЕГКИХ И ТЯЖЕЛЫХ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ GaAs/AlGaAs

Шарипова М.М., Батаев М.Н., Чукеев М.А., Белов П.А., Храмцов Е.С., Игнатьев И.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия, margarita.shgr@gmail.com

В последнее время уделяется повышенное внимание исследованиям взаимодействия экситонов со светом в полупроводниковых наноструктурах. Из литературы известно, что сила осциллятора межзонного оптического перехода в квантовых ямах (КЯ) на основе GaAs между состояниями свободных электронов и легких дырок в три раза меньше, чем между состояниями свободных электронов и тяжелых дырок [1]. Однако соотношение сил осцилляторов (или скоростей радиационного затухания) для экситонных переходов тяжелых дырок (Xhh) и легких дырок (Xlh) может отличаться от этого значения, поскольку оно также зависит от перекрытия волновых функций экситонов и световой волны.

В данной работе представлена серия экспериментальных и теоретических исследований размерно-квантованных экситонных состояний и свето-экситонного взаимодействия в гетероструктурах с квантовыми ямами различной ширины и различными высотами барьеров. Для каждой структуры измерены спектры отражения в области экситонных переходов в квантовых ямах. Пример спектра гетероструктуры с двумя квантовыми ямами приведен на рисунке. Информация об энергии экситонного перехода, радиационной и нерадиационной скорости затухания получена путем моделирования наблюдаемых экситонных резонансов в рамках стандартной теории [1].

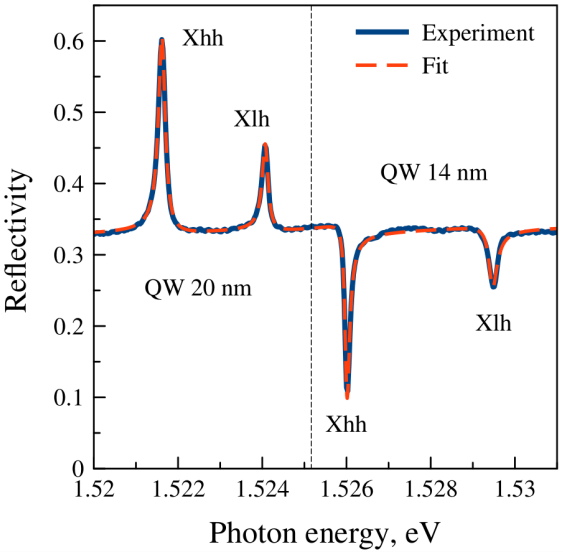


Рис. 1: Спектр отражения от образца T798 с квантовыми ямами GaAs/AlGaAs (3% Al) шириной 20 и 14 нм (синяя кривая). Красная пунктирная кривая – подгонка.

Для резонансов, показанных на рисунке, получены следующие отношения скоростей радиационного распада:

Γ(Xhh) / Γ(Xlh) ≈ 2.4 для КЯ 20 нм,

Γ(Xhh) / Γ(Xlh) ≈ 2.0 для КЯ 14 нм.

Аналогичные соотношения, существенно меньшие 3:1, получены для других гетеро-структур с КЯ шириной вплоть до 50 нм.

Методом, описанном в работе [2], выполнено микроскопическое моделиро-вание экситонных состояний в изучаемых структурах и вычислены экситонные энергии и радиационные константы. В частности, для квантовых ям шириной 20 нм и 14 нм получено теоретическое соотношение: Γ(Xhh) / Γ(Xlh) = 2.46.

Установлено, что основная причина отклонения этого отношения от 3:1 связана с различием волновых функций легких и тяжелых экситонов.

Благодарности.

Мы благодарим СПбГУ (грант № 73031758) и РФФИ (гранты № 19-52-12059, № 19-02-00576а) за финансовую поддержку.

E. L. Ivchenko, Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures (Harrow: Alpha Science Int., 2005).

P. A. Belov, Phys. E. 112 (2019) 96.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.104

ВЛИЯНИЕ ПРОСЛОЙКИ PT НА ДИНАМИКУ ДОМЕНОВ В УЛЬТРАТОНКИХ СЛОЯХ CO с перпендикулярной анизотропией

Шашков И.В., Кабанов Ю.П., Горнаков В.С.

Институт физики твердого тела Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия, shav@issp.ac.ru

Исследование перемагничивания квазидвумерных многослойных пленок $[Co/Pt]_n$ с перпендикулярной анизотропией остается важной задачей на протяжении последних нескольких десятилетий. Во-первых, изучение таких структур проливает свет на фундаментальные механизмы зарождения и движения доменов в ультратонких пленках. Во-вторых, такие пленки имеют большой потенциал в магнитной записи информации. Из литературы известно, что взаимодействие между слоями Co в первую очередь осуществляется за счет РККИ-взаимодействия и магнитостатики [1]. В результате этих взаимодействий слои могут упорядочиваться по отношению друг к другу как ферромагнитно, так и антиферромагнитно в зависимости от толщины немагнитной прослойки. Кроме того, намагниченности слоев могут быть жестко связаны и изменятся только вместе, а могут независимо [2]. В настоящей работе мы изучали динамические свойства доменных границ в различных слоях в зависимости от толщины немагнитной прослойки Pt.

Мы детально исследовали движение и зарождение доменных границ в Pt/Co(0.6нм)/Pt(0-10нм)/Co(0.6нм)/Pt выращенных магнетронным напылением на кремниевую подложку при комнатной температуре. Коэрцитивность и намагниченность насыщения пленок были измерены с помощью вибромагнитометра. Регистрация зарождения и движения ДГ производилась с помощью магнитооптического эффекта Керра при этом магнитное поле прикладывалось перпендикулярно плоскости пленки в виде прямоугольных импульсов миллисекундной длительности. Мы обнаружили, что до толщины Pt 5.5 нм слои жестко ферромагнитно связаны и перемагничиваются за счет зарождения и роста цилиндрических доменов в обоих слоях. При больших толщинах Pt домены в слоях зарождаются и движутся независимо друг от друга, при этом коэрцитивность у слоев одинаковая, а подвижность границ разная. В качестве примера на рис. 1 приведены зависимости скоростей доменных границ от внешнего поля для случаев, когда перемагничивание слоев независимое и совместное. При величинах внешнего поля близких к коэрцитивной силе домены новой фазы возникают на небольшом количестве центров зарождения и перемагничивание происходит за счет движения границ. При увеличении амплитуды внешнего поля быстро растет число центров зарождения. Механизмы наблюдаемых отличий скоростей нами детально обсуждаются.

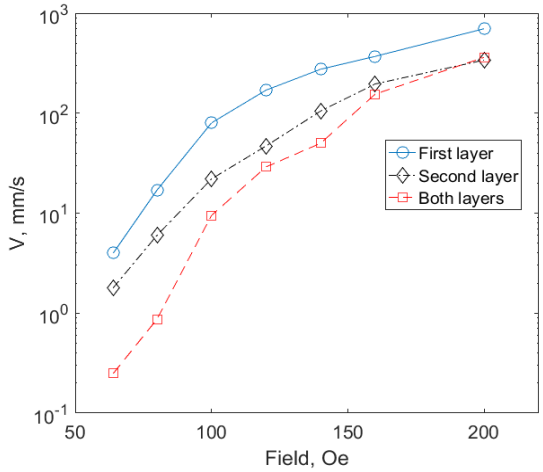


Рис. 1 Зависимость скорости границ от величины внешнего поля

5. M. Robinson, Y. Au, J.W. Knepper et al. // Phys. Rev. B - 2006 – V. 73 – 224422.
6. R.D. Shull, Y. L. Iunin, Y. P. Kabanov, V.I. Nikitenko, O.V. Skryabina, C.L. Chien \\ J. Appl. Phys. – 2013 – V.113 – p. 17C101.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.105

ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ: СБОРКА И КОНТАКТЫ

Шевчун А.Ф., Прокудина М.Г., Короткова М.А., Тихонов Е.С.

Институт Физики Твердого Тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, shevchun@mail.ru

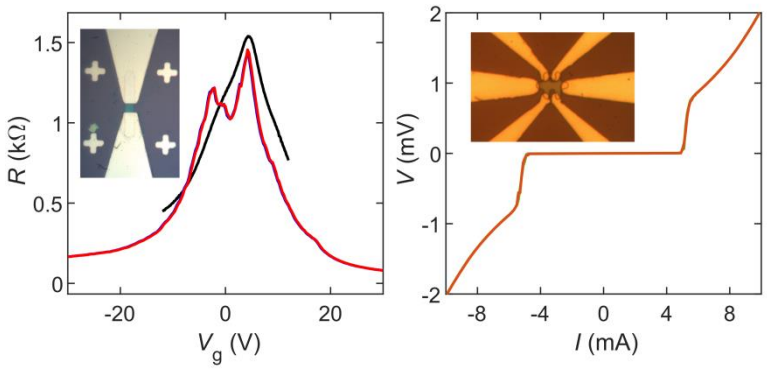
Возможность собрать новые материалы из монослоев различных кристаллов, укладывая их друг на друга слой за слоем – это действительно новое направление в физике конденсированного состояния.

Мы хотели бы подробно рассказать о своем опыте в сборке Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур. Сборка осуществляется по стандартной технологии с использованием полимеров PDMS и PPC.

После сборки гетероструктуры в интересующей нас области были изготовлены мезы с помощью оптической литографии и плазменного травления. Контактные площадки были изготовлены методом термического напыления.

Будут обсуждены возникающие при этой процедуре проблемы. Для получения электрического контакта с гетероструктурой мы использовали несколько подходов. Среди них можно выделить: трансфер структуры на предварительно изготовленные контакты; травление мезы в изотропной O_2 плазме; травление мезы в направленной плазме CHF_3 и O_2.

Результаты успешных подходов можно увидеть ниже. Так, на рисунке слева представлено сопротивление инкапсулированного графена, травление которого проходило в изотропной O_2 плазме. Справа представлена вольт-амперная характеристика сверхпроводящего $NbSe_2$, меза в котором получена в направленной плазме CHF_3 и O_2.



Поиск рабочих технологий в этой новой области продолжается.

Работа профинансирована в рамках выполнения гранта РНФ 18-72-10135.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.106

NON-INVASIVE METHOD OF MEASURING KINETIC INDUCTANCE IN SUPERCONDUCTORS

Baeva E.M., Zolotov P.I., Kardakova A.I., Goltsman G.N.

National Research University Higher School of Economics, 20 Myasnitskaya St, Moscow, 101000, Russia
Moscow State Pedagogical University, 29 Malaya Pirogovskaya St, Moscow, 119435, Russia,

The phenomenon of kinetic inductance L_K in superconductors was discovered a long time ago. Despite this fact, it attracts a lot of interest for micro-and nano-cryogenic devices. On the one hand, measuring L_K allows to define microscopical parameters of materials, such as penetration depth and depairing current [1-2]. On the other hand, in recent years it has become clear that elements with very high kinetic inductance per square (superinductors) are in great demand for superconducting qubits and single-photon detectors [3-4]. The kinetic inductance may be measured in a non-destructive manner using the two-coil mutual-inductance technique [1]. However, this technique requires the sample to cover the space between two coils and cannot be applied for nano-cryogenic devices. Alternative path to measure L_K is applying a high-frequency signal to the sample, that can be damaging for superconducting properties. The technique also accompanied by complex experimental setup with matching the sample and the measurement circuit at high-frequency [2].
Here we introduce a non-invasive method to measure the kinetic inductance of micro- nano-cryogenic devices. To measure the L_K we use a resonance-tank circuit calibrated by Johnson-Nyquist noise. The equilibrium Johnson-Nyquist noise of the sample is amplified by low-temperature and room-temperature amplifiers, and the spectrum is measured by a spectrum analyzer. At a temperature higher than the critical temperature of the sample, the frequency of the resonance is defined by the parameters of the circuit. Meanwhile, in a superconducting state, the resonance is shifted due to the L_K of the sample. We believe that our method can be applied to many superconducting devices where standard methods cannot be utilized.

Acknowledgments. Research is supported by RFBR 19-32-60076.

1. A. Kamlapure, M. Mondal, M. Chand, A. Mishra, J. Jesudasan, V. Bagwe, L. Benfatto, V. Tripathi, and P. Raychaudhuri // Appl. Phys. Lett. – 2020 –V. 96, – P. 072509.
2. S. Frasca, B. Korzh, M. Colangelo, D. Zhu, A. E. Lita, J. P. Allmaras, E. E. Wollman, V. B. Verma, A. E. Dane, E. Ramirez, A. D. Beyer, S. W. Nam, A. G. Kozorezov, M. D. Shaw, and K. K. Berggren // Phys. Rev. B – 2019, –V. 100, – P.054520
3. David Niepce, Jonathan Burnett, and Jonas Bylander // Phys. Rev. Applied – 2019 –V. 11, – P. 044014
4. A. J. Kerman// Phys. Rev. Lett. – 2010 –V. 104, – P. 027002

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.108

ЯДЕРНО-РЕЗОНАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СВЕРХПРОВОДНИКА Mo_8Ga_{41}.

А.В. Гунбин[1], А.А. Гиппиус[1,2], А.В. Ткачёв[1], С.В. Журенко[1,2], Д.И. Мазитова[3]

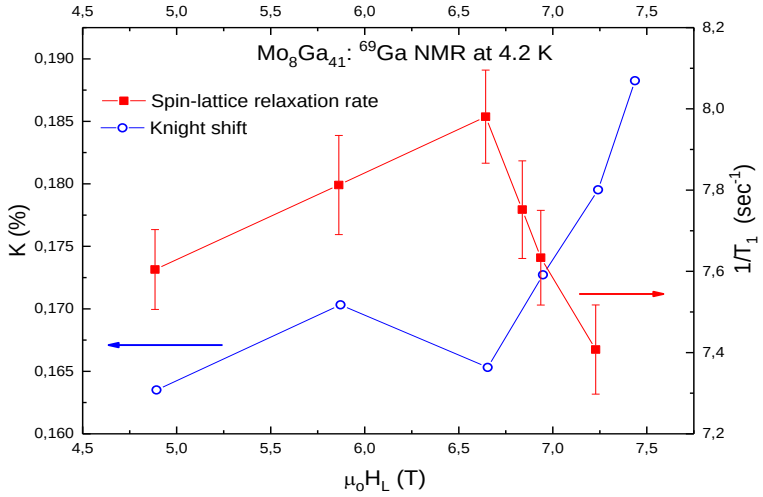
[1] *ФИАН им. П.Н. Лебедева, Москва, gunbinav@lebedev.ru*

[2]*МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, gippius@mail.ru*

[3]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

Интерметаллическое соединение Mo_8Ga_{41} является сверхпроводником, с относительно большой критической температурой в диапазоне 9.7 К – 9.8 К. Критические поля Mo_8Ga_{41} составляют $H_{c1}(0)$ = 131 Э и $H_{c2}(0)$ = 83 кЭ [1]. Особенностью данного соединения является значительное отклонение от теории БКШ в низкотемпературной области.

Кристаллическая решетка Mo_8Ga_{41} формируется из многогранников Mo-Ga_{10} соединенных с кубоктаэдром Ga-Ga_{12}. В такой структуре выделяется 9 неэквивалентных позиций галлия, где первая позиция Ga1 обладает симметричным окружением, без внедрений атомов молибдена. Соединение Mo_8Ga_{41} содержит ядра ^{69,71}Ga, привлекательных для исследования методом ЯМР- и ЯКР-спектроскопии. В ходе комплексного исследования этими методами удалось обнаружить все 9 позиций галлия. С целью изучения влияния магнитного поля на микроскопические характеристики Mo_8Ga_{41} были проведены измерения линии центрального перехода (-½ ↔ ½) ^{69}Ga при T = 4.2 К при различных частотах от 50 до 76 МГц, что соответствует различным Ларморовским полям. Для позиции Ga1 построена полевая зависимость Найтовского сдвига $K = (H_{res} - H_L)/H_L$. В соответствии с полученными результатами, в магнитном поле $H_0 \sim 6.65$ Тл наблюдается резкий излом на зависимости $K(T)$ с последующим быстрым ростом величины сдвига. Наблюдаемый эффект демонстрирует переход Mo_8Ga_{41} в нормальное состояние, что согласуется с литературной зависимостью H_{c2} от температуры [2]. Наблюдаемый эффект также коррелирует с нетривиальной полевой зависимостью спин-решеточной релаксации ^{69}Ga для узкой линии ЯМР Ga1, имеющей резкий излом в окрестности 6.65 Тл, напоминающий пик Гебеля-Сликтера вблизи T_c [3].



1. V.Yu. Verchenko et al., Phys. Rev. B **93**, 064501 (2016).
2. V.Yu. Verchenko et al., Phys. Rev. B **96**, 134504 (2017).
3. Hebel L.C., Slichter C.P., Phys. Rev. **113**, 1504 (1959).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.109

Сверхпроводящий высокополевой магнитно-резонансный томограф с безжидкостным охлаждением

Демихов Е. И., Лысенко В. В., Рыбаков А. С., Багдинова А. Н.,
Физический Институт им. П.Н. Лебедева

В последнее время произошёл значительный скачок в развитии современной физики, которая в состоянии извлекать и интерпретировать информацию о различных средах, включая методы воздействия с целью изменения их свойств. На основе этих подходов разрабатываются способы персонифицированной диагностики и терапии в медицине. Актуальным является развитие методов ядерной и квантовой медицины, что позволяет не только поставить диагноз на ранней стадии, но и предложить оптимизированную методику лечения на основе цифровых технологий. Высокопольная магнитно-резонансная томография (с магнитным полем выше 1.5 Тесла) является к настоящему моменту наиболее информативным методом медицинской диагностики и позволяет решать практически все задачи, возникающие при обследованиях. Наиболее распространенные томографы с полем 1.5 Тл позволяют обнаруживать патологии разметом до 0,6 мм, а с использованием контрастов на основе наночастиц до 0,4 мм. Несмотря на важность томографов для клинической практики подобные приборы в нашей стране до возникновения этого проекта не производились и не разрабатывались. В работе описаны новые технологии применения сверхпроводящих магнитно-резонансных томографов на основе безгелиевого принципа охлаждения и инновационных железистых контрастов. Задача создания подобных магнитных полей вызвала потребность в использовании явления сверхпроводимости для получения с одной стороны полей, существующих в больших объемах пространства, но при этом создаваемых максимально компактными устройствами. Решение этой задачи было бы невозможно без использования новых принципов охлаждения сверхпроводящих магнитов. А именно, были разработаны физические принципы безгелиевого (безжидкостного) охлаждения сверхпроводящего магнита, что позволило, кроме решения научных задач, создать экономичный и экологичный прибор, который производит революцию в технике и медицинской практике. Следующий принципиальный успех достигнут в создании сверхнизкоомных сверхпроводящих контактов NbTi. Точность работы МРТ связана с постоянством величины магнитного поля. С другой стороны, в магните существуют контакты между сверхпроводниками. Если сопротивление контактов велико, то происходит диссипация энергии и уменьшение величины магнитного поля. Для того, чтобы предотвратить это явление, необходимы контакты с практически нулевым сопротивлением. Эта задача также была успешно решена и получены контакты величиной 10^{-14} ом, что позволило достичь высокостабильной работы магнита. Кроме этого, были решены важные научные задачи: созданы физические принципы расчетов и изучение свойств активных экранов, разработаны принципы расчета приемных и передающих высокочастотных катушек, изучены свойства железистых наноконтрастов и средств их доставки при помощи ЯМР, ЭПР, МРТ, Мёссбауэровских методик, продемонстрирована эффективность железистых наноконтрастов на примере МРТ головного мозга крыс. Особое место занимает разработка системы обработки данных и ЯМР визуализация органов на основе собственного программного обеспечения. Созданные МРТ позволяют не только проводить клиническую диагностику, но и использоваться в научных исследованиях широкого профиля.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.110

ЭФФЕКТ ФОТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$

Леонтьев А.В.[1], Камашев А.А.[1], Павлов Д.П.[1], Мухортов В.М.[2], Мамин Р.Ф.[1]

[1]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия,* kamandi@mail.ru
[2]*ФИЦ Южный научный центр РАН, г. Ростов-на-Дону, Россия*

Охтомо и Хванг обнаружили в 2004 году электронный газ высокой подвижности на интерфейсе между $LaAlO_3$ и $SrTiO_3$ [1]. В нашей группе мы исследовали гетероструктуры на основе сегнетоэлектрических и диэлектриков оксидов со структурой типа $BaTiO_3/LaMnO_3$. Нами были получены образцы гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, и на этих образцах экспериментально измерено поведение сопротивления при включении и выключении освещения.

В образцах гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$, которые мы исследовали, электрическое сопротивление значительно уменьшается с температурой при температурах ниже максимума около 230 K, демонстрируя высокую проводимость. При исследовании гетероструктур $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3/LaMnO_3$ был обнаружен своеобразный эффект отрицательной фотопроводимости (эффект фотосопротивления) гетероструктуры во время однородного освещения гетероструктуры со стороны сегнетоэлектрической пленки светом различного спектрального состава. Эффект состоит в том, что при освещении сегнетоэлектрической пленки сопротивление гетероструктуры, измеренное вдоль интерфейса, увеличивается. Величина эффекта зависит от спектрального состава света, наибольший эффект наблюдается при освещении зеленым светом. Характерное время переходной динамики изменения составляет 4-12 секунд. Картина изменения сопротивления практически не менялась при повторных циклах. В части цикла, когда применялось совместное воздействие зеленого и инфракрасного света, эффекты от воздействия складывались, и наблюдался кумулятивный эффект, без уменьшения эффекта воздействия каждого из пучков.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-12-00179.

A. Ohtomo, H. Ywang, *Nature* **427**, 6973 (2004).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.111

О ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ФЕРРОПНИКТИДОВ

А.Е. Каракозов, М.В. Магницкая

Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк, Россия
chkara@rambler.ru

Коррелированные железосодержащие сверхпроводники со спин-флуктуационным (СФ) взаимодействием электронных (e) и дырочных (h) зон (далее ферропниктиды, ФП) характеризуются универсальной фазовой диаграммой (ФД). Область оптимального (с максимальной T_c) допирования x_{opt} примерно совпадает с областью антиферромагнитного (АФМ) перехода и наиболее сильных межзонных АФМ флуктуаций, взаимодействие с которыми в нефононной теории сверхпроводимости считается доминирующим. Плотность состояний $\gamma_n(x)$ и связанное с ней внутризонное (фононное) спаривание также достигает максимума при x_{opt}, поэтому роль фононного и нефононного механизмов в увеличении T_c остается неясной. Построение более полной ФД структуры сверхпроводящего (СП) состояния ФП затрудняется большим разбросом данных вследствие того, что в ФП щели 4–5 взаимодействующих СП конденсатов заполняют сравнительно небольшой интервал энергий, сопоставимый с погрешностью большинства экспериментальных методик. По нашему мнению, для построения такой ФД пригодны только две достоверно установленные универсальные для ФП характеристики: трансформация электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ – увеличение при промежуточных температурах и соответствующее сохранению энтропии уменьшение $c_s(x, t)$ вблизи T_c по мере удаления от АФМ перехода [1] и сильное отклонение зависимости доминирующей СП щели $\Delta_L(x_{opt},t)$ от модели БКШ в оптимально допированных ФП [2]. Нами показано, что отмеченные универсальные свойства имеют место в модели двух h-зон, взаимодействующих с e-зоной ***с наименьшей плотностью состояний*** $\boldsymbol{\gamma_e}$ посредством СФ взаимодействия $\lambda_{eh}(x)$ [1]. В этом случае корреляционные эффекты (обратно пропорциональные отношению плотностей состояний взаимодействующих зон: $\lambda_{eh}(x)/\lambda_{he}(x) \sim \gamma_h(x)/\gamma_e(x)$) максимальны в e-зоне, вследствие чего сверхпроводимость в h-зонах в основном связана с внутризонным спариванием и изменением $\lambda_h(x) \sim \gamma_h(x)$, а «наведенная» сверхпроводимость в e-зоне – с $\lambda_{eh}(x)$. Поведение $c_s(x, t)$ объясняется сближением e-щели $\Delta_e(x,t)$ с доминирующей (L) h-щелью $\Delta_{Lh}(x,t)$ из-за усиления $\lambda_{eLh}(x)$ вблизи АФМ перехода. Зависимости $\Delta_L(x_{opt},t) \gg \Delta_S(x_{opt},t)$ со слабым прямым межзонным взаимодействием λ_{SL} и сильным λ_{LS} (т.е. с $\gamma_S \gg \gamma_L$) [2] не могут быть объяснены в двухзонной модели, так как соотношения щелей и плотностей состояний в зонах L и S противоречат друг другу. В рассматриваемой нами модели «$\Delta_L(x_{opt},t)$» представляет собой кластер из «слипшихся» щелей $\Delta_{Lh}(x_{opt},t)$ и $\Delta_e(x_{opt},t) \gg \Delta_{Sh}(x_{opt},t)$. При этом прямое взаимодействие e- и Sh-зон с $\gamma_{Sh} \gg \gamma_e$ полностью соответствует необходимому условию $\lambda_{eSh} \gg \lambda_{She}$. Таким образом, наблюдаемая в ФП аномальная зависимость $\Delta_L(x_{opt},t)$ и $\Delta_{Sh}(x_{opt},t)$ объясняется не прямым, а «косвенным» взаимодействием двух дырочных зон посредством СФ взаимодействия с электронной зоной. Приведенные результаты показывают, что полученная нами на основании анализа экспериментальных данных модель СП состояния семейства $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ с доминирующим внутризонным спариванием [1] и кратко описанная выше, возможно, применима и для всех ферропниктидов.

Работа поддержана РФФИ (грант 19-02-00509-а).

1. Karakozov A.E. et al. // Phys. Rev. B. – 2019. – V. 99. – № 5. – P. 054504.1-054504.10.
2. Kuzmichev S.A. et al. // J. Supercond. Nov. Magn. – 2016. – V. 29. – № 4. – P. 1111-1116.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.112

ФОРМИРОВАНИЕ ЗАРЯДОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ И ИХ РЕЛАКСАЦИЯ В НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПРОВОДНИКАХ НА ПРИМЕРЕ YBCO

Д.К. Палчаев[1], С.Х. Гаджимагомедов[1], А.Э. Рабаданова[1], Ж.Х. Мурлиева[1,2], М.Х. Рабаданов[1]

[1]*Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Россия*
[2]*Дагестанский государственный университет народного хозяйства, г. Махачкала, Россия,*
dairpalchaev@mail.ru

Исследования посвящены рассмотрению природы возникновения зарядовых возбуждений (ЗВ) в блоке проводимости YBCO и их релаксации после возбуждения внешним полем. Вопрос возникновения ЗВ в сверхпроводящей фазе рассматривается в рамках слетэровских представлений. Согласно этим представлениям, конденсированная среда представляет собой систему сильно взаимодействующих поляризованных атомов. Силы взаимодействия в такой среде подобны лондоновским, значения которых возрастают по мере уменьшения расстояния между атомами. Возрастание этих сил сопровождается процессами возникновения ЗВ на атомах и изменением параметров ячейки. Согласно принципу детального зарядового равновесия, этим обеспечивается электронейтральность среды, т.е. диэлектрическое экранирование (ДЭ).

Исходными данными к такому рассмотрению служат факты отклонения локальной электронейтральности системы атомов, в пределах элементарной ячейки YBCO, при чисто ионных связях для любой кислородной стехиометрии. Согласно авторам работ [1,2] локальная зарядовая неоднородность в различных фазах YBCO неизбежно приводит к искажению их идеализированных решеток для компенсации этой неоднородности. Однако нет ответа на вопрос о возникновении обобществленных ЗВ, дополнительно нивелирующих ДЭ в этих системах, которые откликались бы на внешние воздействия, подобно фермиевским электронам в металлах. В этой связи, рассматривается роль лабильного кислорода в формировании элементарных ЗВ (ЭЗВ).

Поскольку YBCO не является классическим проводником, но в то же время, он обладает высокой проводимостью и даже сверхпроводимостью, представляет интерес, какими процессами реализуется восстановление зарядовых равновесий в электрических полях – дрейфовыми или диффузионными. Теоретический расчет температурной зависимости электросопротивления ρ (T), основанный на понятиях дрейфа заряда в металлах, проводится по формуле Друде - Блоха:

$$\rho_{\text{D-B}}(T) = m/ne^2\tau(T)_{\text{D-B}}. \qquad (1)$$

Согласно диффузионной концепции Максвелла:

$$\rho_M(T) = \tau_M(T)/\varepsilon_0, \qquad (2)$$

где n, e и m – концентрация, заряд и масса электронов; ε_0 – электрическая постоянная. Установлено, что противоречия понятий времен релаксации $\tau_{\text{D-B}}$ и τ_M, которые обратно и прямо пропорциональны ρ, соответственно, снимается, если учесть ангармонизм колебаний атомов.

Работа выполнена при поддержке государственного задания FZNZ – 2020–0002

1. *Ruixing Liang, Bonn D. A., and Hardy W. N.*// Physical Review B. 2006. **73**, 180505 (1-4)
2. Boˇzin E S, Huq A, Bing Shen, Claus H, *at all.*// Physical Review B. 2016. **93** 054523

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.113

FLUX-FLOW HALL EFFECT IN HIGHLY LAYERED ELECTRON-DOPED SUPERCONDUCTOR $ND_{2-X}CE_XCUO_{4+\delta}$

O.E. Petukhova[1], M.R. Popov[1], A.S. Klepikova[1], N.G. Shelushinina[1], A.A. Ivanov[2], T.B. Charikova[1]

[1]M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia, oep@yandex.ru
[2]National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia

In type II superconductors, which include high-temperature superconductors (HTSC), the parameters important for practical use can be determined by the study of the behavior of a superconductor in a mixed state. The dynamics of a vortex superconducting system is a consequence of the interaction of Abrikosov and Josephson vortices with HTSC inhomogeneities.

We analyzed and compared the transfer of charge carriers and the movement of the vortices in the electronic high-temperature $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$ in underdoped and optimally doped (x = 0.135, 0.145, 0.15) areas in CuO_2 conductive planes and between them.

The pulsed laser deposition technique was used to synthesize three types epitaxial monocrystalline films $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}/SrTiO_3$ with optimal oxygen content δ=0:

- orientation (001) - the *c*-axis is perpendicular substrate $SrTiO_3$;
- orientation (1$\bar{1}$0) - the *c*-axis is located in the plane of the substrate and is directed along the long side of the substrate;
- orientation (1$\bar{1}$0) - the *c*-axis is located in the plane of the substrate and is directed along the short side of the substrate.

For these samples, the temperature and field dependences of the resistivity and Hall resistance were measured. The external magnetic field $\boldsymbol{B}$ was directed perpendicular to the plane of the $SrTiO_3$ substrate. The current $\boldsymbol{j}$ was directed along the long side of the substrate. It has been found logarithmically corrected T^2 law (electron-electron scattering in 2D-systems) for the in-plane resistivity and incoherent tunneling at low temperature and thermal activation across the barriers determine the *c*-axis transport. In the normal state, the lateral Hall resistivity is magnetic field independent however, it has definite nonzero value in the mixed state.

At low temperatures incoherent charge transfer conditions, activation motion vortices between the conductive planes was found due to intrinsic pinning.

A change in sign of the Hall resistivity $\rho_{xy}^{ab}(B)$ with increasing magnetic field in a mixed state for $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$ films with optimal doping x=0.15 was found, reflecting the transformation of the Fermi surface.

The lateral Hall resistivity $\rho_{xy}^{c}(B)$ in strong 2D superconductor in the mixed state are associated with the dynamic of lateral motion of Josephson ($\boldsymbol{B} \parallel ab$-plane) vortices in a flux-flow regime in crossed electric and magnetic fields.

The work was carried out within the framework of the state assignment on the subject "Electron" No. AAAA-A18-118020190098-5 with the support of the RFBR and Sverdlovsk Region Russian Federation (grant No. 20-42-660004) and of the Ministry of Science and Higher Education, Grant No. 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.114

СТРУКТУРА КЕРАМИК YBCO В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РЕЖИМОВ СПЕКАНИЯ

Рабаданова А.Э., Палчаев Д. К., Мурлиева Ж.Х., Эмиров Р.М.

Дагестанский государственный университет,
г. Махачкала, Россия, rabadanova.aida@mail.ru

Керамические материалы состава $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) получены методом [1] твердофазного спекания. Порошки Y_2O_3, $BaCO_3$ и CuO смешивали с добавлением этилового спирта и прессовали при давлениях ~ 100 МПа. Спекались образцы в 5 этапов при температурах: 900ºC, 910ºC, 920ºC, 927ºC и 930ºC в течение 10, 10, 20, 25 и 25 часов, соответственно. После каждого этапа спекания образцы перемалывались и повторно прессовались, для повышения однородности и плотности. Скорости подъема $\upsilon_{под}$ до соответствующих температур и охлаждения $\upsilon_{охл}$ от них, в среднем, составляли ~ 5 ºC/мин и ~ 2 ºC/мин, соответственно. С ростом температуры спекания на 30ºC (рис. 1) плотность (γ) увеличилась примерно в 2 раза, а ее максимальное значение (~ 5 г/см^3) соответствует температуре 927ºC.

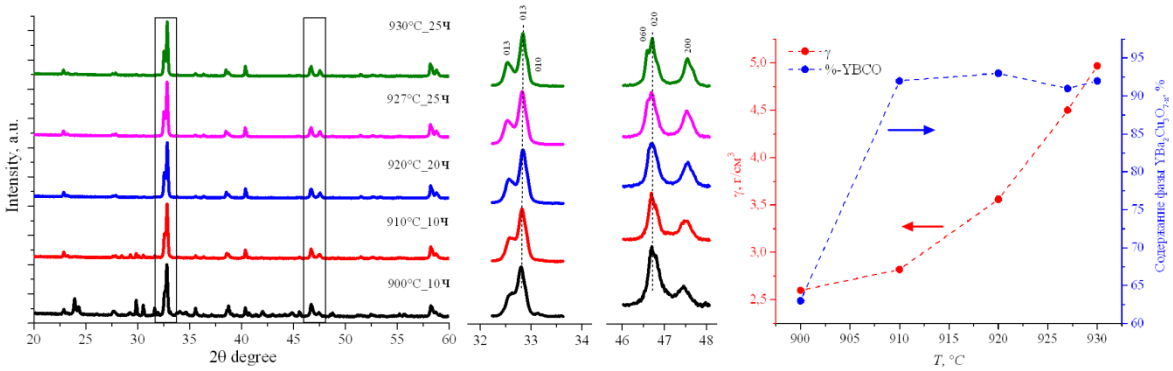


Рис. 1. Дифрактограммы, зависимости плотности γ и содержание фазы YBCO образцов после спекания при различных температурах

Изготовленные образцы преимущественно обладают (рис.1) орторомбической сверхпроводящей фазой с высоким содержанием кислорода (не менее 6.9), наряду с которой, побочными фазами являются Y_2BaCuO_5 и CuO. При этом содержание сверхпроводящей фазы YBCO с повышением температуры также увеличивается, максимальное изменение (~ 30%) наблюдается с ростом температуры от 900ºC до 910ºC и достигает до ~ 92%, а дальнейший ее повышение сильно не изменяет содержание фазы.

Так как сверхпроводникам, в частности для YBCO, характерна рыхлая упаковка и, соответственно, отрицательный коэффициент теплового расширения вблизи T_c [2], то особый интерес будут представлять прецизионные температурные дифракционные исследования до и вблизи сверхпроводящего перехода. Для таких исследований необходимы однофазные высокоплотные образцы состава YBCO.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90170 и частично Гос. заданием FZNZ-2020-0002.

Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х., Гаджимагомедов С.Х., Гамзатов А.Г., Мурлиев А.К. // Перспективные материалы. – 2009. – № 3. – С. 57-64.
Titova S, Lukoyanov A., Pryanichnikov S., Cherepanova L., Titov A. // J. of Alloys and

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.115 891-897.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА *q* = 4 НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ.

Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Мазагаева М.К.

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Махачкала, Россия, mazagaeva86@mail.ru

В настоящее время возрастает интерес к исследованию фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств магнетиков [1–3]. Модель Поттса является одной из решеточных моделей, используемых для описания физических свойств таких магнетиков. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина q = 4 на гексагональной решетке интересна тем, что при учете обменных взаимодействий первых ближайших соседей наблюдается ФП первого рода, а учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к появлению фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. Эффекты фрустрации играют важную роль в магнитных системах. В связи с этим, в настоящей работе нами проводится исследование двумерной модели Поттса с числом состояния спина q=4 на гексагональной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями. Гамильтониан модели Поттса с числом состояний q=4 с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos\theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos\theta_{i,k} ,$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1>0$) и антиферромагнитного ($J_2<0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами S_i - S_j и S_i – S_k, r= $|J_2/J_1|$ - величина взаимодействия вторых ближайших соседей. В данной работе рассматривается интервал значений $0.0 \le r \le 1.0$. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга - Ландау метода МК [4,5], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что в интервалах $0.0 \le r \le 0.2$ и $0.7 \le r \le 1.0$ наблюдается ФП первого рода. В интервале $0.3 \le r \le 0.6$ наблюдается вырождение основного состояния, и система становится фрустрированной.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 19-02-00153-а.

Diep H.T. Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore 2004. – P. 624.

Baxter R.J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics.Academic, N.Y. 1982, Mir, Moscow 1985.

Wu F.Y. Exactly Solved Models: A ourney in Statistical Mechanics. World Scientific, New Jersey 2008.

Murtazaev A.K., Kurbanova D.R., Ramazanov M.K. // Physica A. – 2020. – V. 545. – P. – 123548-1-123548-5.

Wang F., Landau D.P. // Phys. Rev. E. – 2001. – V. 64. – P. – 0561011–1-0561011–5.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.116

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТОЯНИЯ ГЕТЕРОСИСТЕМЫ Ge_xSi_{1-x}/Si(001) С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ Ge В ПЛЕНКЕ

[1*]Хохлова Т.Н., [2]Пчеляков О.П., [2]Дерябин А.С., [2]Колесников А.В.

[1]Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева, г. Красноярск, Россия
[2]Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СОРАН, г. Новосибирск, Россия, *tanya.xo.xo03@gmail.ru*

Основой современной микро-, опто- и наноэлектроники является кремниевая технология. В настоящее время реализация данной технологии для получения полупроводниковых приборов на основе качественных гетероструктур GeSi/Si является одной из самых перспективных и востребованных на рынке современных технологий.

В данной работе представлены исследования гетероэпитаксиальных слоев твердого раствора (ТР) Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с различным содержанием Ge в зависимости от несоответствия параметров решетки гетеросистемы (ГС). С помощью метода низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и применением низкотемпературного буферного слоя кремния (LT-Si) были получены ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с различной долей *x*.

В результате изучения рельефа поверхности ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) был сделан ряд предположений о зарождении и распространение пронизывающих дислокаций (ПД) в пленке. Следует вывод о том, что основным источником дислокаций несоответствия (ДН) становятся точечные дефекты. Это осуществляется в присутствии поля напряжений растущего псевдоморфного слоя ТР, что способствует упорядочению первичной сетки ДН и, в конечном счете, приводит к снижению плотности ПД. Данная работа подтверждает, что при осуществлении пластической релаксации напряженной пленки ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) возникают зарождения ДН, относящиеся к внутренним дислокациям. Такие ДН связаны, в основном, с загрязнениями подложки Si[1,2].

Следует вывод, что наблюдаемый рельеф поверхности является следствием действия фундаментальных механизмов, к которым относится упругая релаксация напряжения, возникшая за счет появления шероховатостей на поверхности напряженной пленки. Так же к фундаментальным механизмам относится образование ступеней из-за пересечения поверхности ПД в процессе пластической релаксации напряженной ГС. Это подтверждает тот факт, что при росте и релаксации гетероэпитаксиальных слоев Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с x~(0,2-0,3) основной вклад в зарождение ДН вносит поверхность растущего слоя [2]. Полученные результаты соответствуют предположениям о том, что именно возникновение наблюдаемого рельефа на поверхности пленки является причиной появления концентраторов напряжений, которые являются источниками ДН. Тем самым ограничивается рост пленок GeSi, релаксирующих с приемлемой плотностью ПД, где величина доли Ge не превышает 0,3 [1,2].

Блоховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Гутаковский А.К., Ревенко М.А., Соколов Л.В. // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40. – № 3.
Блоховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Гутаковский А.К., Пчеляков О.П., Соколов Л.В.. // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – №. 1.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.117

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА ТЕМПЕРАТУРУ НЕЕЛЯ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ $MnBi_2Te_4$

Абдуллаев Н.А. [1,2], Алигулиева Х.В. [1,3], Зверев В.Н.[4], Алиев З.С.[1], Амирасланов И.Р.[1,2], М.Б. Бабанлы[2,5], Н.Т. Мамедов[1]

[1]Институт физики НАН, г.Баку, Азербайджан,
[2]Бакинский Государственный Университет,г. Баку, Азербайджан,
[2]Сумгаитский Государственный Университет,г. Сумгаит, Азербайджан,
[4]Институт физики твёрдого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,
[5]Институт катализа и неорг. химии НАН, г.Баку, Азербайджан
e-mail: abnadir@maul.ru

Недавно открыто целое семейство новых магнитных топологических изоляторов семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_n$ ($n\geq0$). Установлено, что первый член этого семейства – монокристаллы $MnBi_2Te_4$ являются антиферромагнитными топологическими изоляторами с температурой Нееля T_N=25.4K [1]. Выяснилось, что температура Нееля может варьроваться от образца к образцу в пределах 23.5-25.4K в зависимости от кристаллического совершенства образцов. Как известно, степень совершенства образцов можно определять из рентгеновских дифрактограмм по полуширине и угловому расположению рефлексов, а также по соотношению интенсивностей различных рефлексов по угловому расположению (Рис.1).

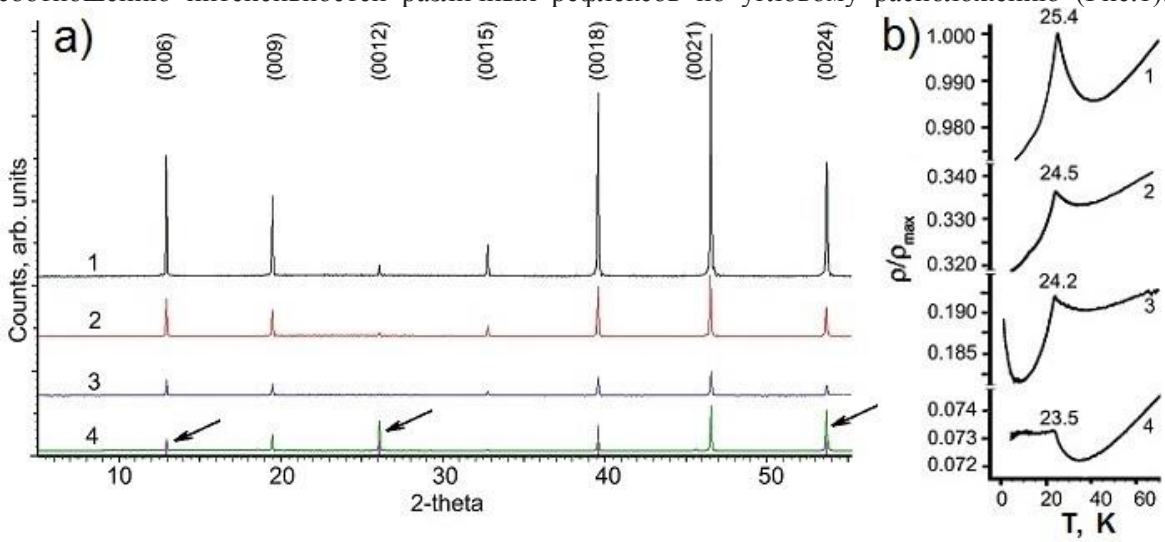


Рис. 1. a) рентгеновские дифрактограммы от плоскостей (0001) для различных 4-х образцов кристаллов $MnBi_2Te_4$; b) зависимости нормированных удельных сопротивлений этих же образцов от температуры (нормировка относительно максимума сопр. образца 1).

Для образца 4 соотношения интенсив. ряда рефлексов (указано стрелками на Рис.1a) значительно отличается, что указывает на большую дефектность образца. Результаты исследований темп. завис. уд. сопр. этих же образцов от температуры (Рис. 1b) соответствуют данным рентг. дифракции. По мере увеличения номера образцов наблюдается размытие пика и смещение крит. температуры в сторону меньших температур, а также уменьшение сопротивления вследствие увеличения концентрации электронов из-за донорных уровней, создаваемых дефектами.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФРН при Президенте Азерб. Респ. (гр. № EİF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02 и EİF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1).

M.M. Otrokov, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, M.B. Babanly, N.T. Mamedov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, E.V. Chulkov et al. // Nature. – 2019. V. 576. – P. 416–422.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.118

METHOD OF HIGH POWER LASER DIODE ACTIVE ZONE TEMPERATURE

MEASUREMENT

Aparnikov A.N., Buryi E.V., Orlov N.E., Shashurin V.D.
Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia, kolyaorlov@gmail.com

Laser diode bars (LDB), integrated linear arrays of laser diodes, are widely spread semiconductor laser components used for pumping solid-state lasers, in medicine, material treatment and scientific research. Key parameters of LDB are temperature dependent: optical power, optical spectrum, wall plug efficiency, optical beam form etc. LDB lifetime also suffers from high temperatures according to Arrhenius law because of several degradation mechanisms. Traditionally temperature of LDB is controlled by thermistor or thermocouple mounted on heatsink. That approach has large response time and requires precise mounting of sensor and additional electrical wires. There are also several alternative methods of temperature measurement of LDB: spectrum measurement, power measurement [1, 2]. They are able to measure fast temperature changes but require additional optical equipment. New method of measurement of LDB temperature based on temperature dependence of voltage drop on LDB was proposed. Measurements can be done without any additional equipment using only built-in voltage measurement circuits of current driver. Main aim of that research was to evaluate temperature dependence of several parameters of near infrared range (NIR) LDB operating in quasi-continuous wavelength (QCW) regime and to compare different independent methods of temperature measurement of LDB. Additionally, dynamic measurements were done – temperature of LDB was measured during pulse of injection current. Experimental research has demonstrated low difference between results of independent methods of temperature measurement of LDB both in static and dynamic measurements.

1. Liu, X., Zhao, W., Xiong, L., Liu, H. Packaging of High Power Semiconductor Lasers, Springer-Verlag, New York, 2015. – 402 p.
2. Peter W. Epperlein. Semiconductor Laser Engineering, Reliability and Diagnostics. A Practical Approach to High Power and Single Mode Devices. Chichester: John Wiley & Sons Ltd , 2013. – 469 p.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.119

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИСЛОКАЦИЙ В GAN И ВЛИЯНИЯ НА НИХ ОБЛУЧЕНИЯ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНЫМ ПУЧКОМ

Вергелес П.С., Якимов Е.Б., Орлов В.И., Поляков А.Я.

Институт проблем технологий микроэлектроники РАН,
г. Черноголовка, Россия, vergelesp@gmail.com

GaN и твердые растворы на его основе широко используются для производства мощных оптоэлектронных приборов, однако свойства дефектов, например, дислокаций, которые могут влиять на рабочие характеристики прибора, остаются все еще до конца не выясненными. В этой работе представлены результаты исследования оптических свойств свежевведенных дислокаций и влияния на них облучения низкоэнергетичным электронным пучком.

В проведенных исследованиях использовался широкий набор пленок и кристаллов GaN с разным типом проводимости (толстый кристалл HVPE n-GaN, пленка ELOG n-GaN, тонкие пленки MOCVD n-GaN и p-GaN). Деформации проводилась индентором типа Виккерса под нагрузкой порядка 1 Н в диапазоне температур от комнатной до 873 К. Исследования методом КЛ и облучение низкоэнергетичным электронным пучком осуществлялись в сканирующем электронном микроскопе JSM-6490 (Jeol) с системой MonoCL-3 в диапазоне температур от температуры жидкого азота до комнатной. Энергия электронного пучка, как во время облучения, так и при получении изображения была равна 10 кэВ, так как при такой энергии достигалось наилучшее разрешение.

Известно, что дислокации в GaN могут вводится при пластической деформации при комнатной температуре и при этом появляется новая линия свечения с энергией фотона около 3.1 эВ. В литературе эту полосу чаще всего связывают с излучением полных или расщепленных винтовых дислокаций. Однако, наши исследования показывают, что данная линия излучения, скорее всего, связана с комплексами точечных дефектов, генерируемых скользящей дислокацией.

Как уже говорилось выше, дислокации в GaN подвижны при комнатной температуре и, соответственно, возникает вопрос об энергии активации скольжения дислокаций в этом материале. В рамках предположения о термоактивационном характере движения дислокаций из температурной зависимости размера дислокационной розетки была оценена энергия скольжения дислокаций. Для GaN n-типа эта оценка дала величину 720±160 meV, в то время как в p-GaN она несколько меньше и порядка 450±100 meV.

Кроме того, было обнаружено, что при облучении низкоэнергетичным электронным пучком как ростовых, так и свежевведенных дислокаций при пластической деформации они подвержены рекомбинационно-ускоренному скольжению (эффект recombination-enhanced dislocation glide – REDG). Исследование температурной зависимости эффекта REDG позволило оценить энергию активации для этого процесса и оказалась, что она не превышает 0.2 eV.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.120

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОТЯЖЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛМАЗАХ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ДАВЛЕНИЯХ

Дьячкова И.Г.[1], Асадчиков В. Е.[1], Бузмаков А. В.[1], Золотов Д. А.[1], Ширяев А.А.[2]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия,* dyachkova.i@crys.ras.ru
[2]*ИФХЭ РАН, Москва, Россия*

Уникальные свойства алмазов делают их исследование интересным и важным для разных областей науки и техники. Решение вопроса о происхождении и условиях образования алмазов является одной из актуальных проблем. Изучение дефектов и примесей в алмазах даст информацию об условиях формирования и среде кристаллизации этих минералов. Несмотря на продолжительную историю исследований, некоторые аспекты роста природных и синтетических алмазов остаются недостаточно хорошо изученными. В частности, определенный интерес представляет исследование структуры высококачественных алмазов, полученных при высоких температурах и давлениях (HPHT).

Предметом настоящей работы является исследование необычных дефектов, обнаруженных в крупных синтетических алмазах вблизи линии равновесия графит-алмаз. Выращивание кристаллов на нижнем пределе допустимых температур при T ≈ 1250˚C существенно повлияло на совершенство их структуры и привело к образованию дефектов конусообразной формы, развивающихся из центра кристалла перпендикулярно каждой из пяти граней кристалла. Для выявления природы этих образований были проведены исследования методом рентгеновской топо-томографии [1]. Сопоставление рентгеновских и спектроскопических (инфракрасная и рамановская спектроскопия) данных позволяет предположить, что конусовидные дефекты представляют собой дислокации, декорированные микровключениями посторонних фаз (вероятно силикатов и/или оксидов). Причиной их образования может являться разбиение ростовой грани кристалла на отдельные блоки с последующим образованием дислокационных пучков и межблоковых границ.

Кроме того, представлено дальнейшее развитие подхода к исследованию дефектов в совершенных кристаллах с алмазной решеткой на основе рентгеновской топографии в квазизапрещенном отражении 222 и инфракрасной спектроскопии. Изучение алмазов различных типов (IIa, IIb, Ib) показало высокую чувствительность метода рентгеновской топографии при использовании квазизапрещенного отражения 222 к слабым напряжениям, создаваемым различными дефектами в совершенных кристаллах. Для некоторых образцов выявлена неоднородность распределения интенсивности квазизапрещенных отражений по сечению кристаллов, вызванная протяженными и, в ряде случаев, точечными дефектами.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части «рентгеновских исследований».

1. Shiryaev A.A. Zolotov D.A., Suprun O.M, Ivakhnenko S.A., Averin A.A., Buzmakov A.V., Lysakovskyi V.V., Dyachkova I.G., Asadchikov V.E. // CrystEngComm. – 2018. V.20. – P. 7700 – 7705.
2. Ширяев А.А. Золотов Д.А., Супрун Е.М., Дьячкова И. Г., Ивахненко С.А., Асадчиков В.Е. // Письма в ЖЭТФ. – 2020. – Т. 111, № 9. – С. 597 – 601.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.121

МАГНИТОСТИМУЛИРОВАННЫЕ ЭФФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА С ПРИМЕСЬЮ ХРОМА (TGS:Cr)

А. П. Еремеев[1,2], Е. С. Иванова[1], Е. А. Петржик[1], Р. В. Гайнутдинов[1], А. К. Лашкова[1], Т. Р. Волк [1]

[1]Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия e-mail: ivanova.el.ser@gmail.com
[2]Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

Триглицинсульфат (TGS) является модельным сегнетоэлектриком, удобным для исследований зависимости сегнетоэлектрических свойств от внешних воздействий. Недавно [1, 2] обнаружено влияние слабого постоянного магнитного поля на диэлектрические и родственные свойства кристаллов TGS, подвергнутых длительному воздействию переменного электрического поля, далее называемые “уставшими”. Исследование топографии полярной (010) поверхности методами зондовой микроскопии обнаружило на свежих сколах таких “уставших” кристаллов характерный нанорельеф, который согласно [3], отражает степень дефектности кристалла. Магнитное воздействие приводило к долговременной релаксации нанорельефа.

В данной работе исследованы магнитостимулированные эффекты в кристаллах TGS с примесью Cr. В отличие от “уставшего” TGS, где нанорельеф является результатом воздействия переменного поля, в TGS:Cr нанорельеф характеризует равновесное состояние кристалла. Исследовалось влияние постоянного магнитного поля на температурную зависимость диэлектрической проницаемости $\varepsilon'(T)$ вблизи фазового перехода и на характеристики нанорельефа.

Образцы выдерживались в магнитном поле B = 2 Тл в течение 20 минут. Вектор магнитной индукции $\mathbf{B} \perp \mathrm{Ps}$, $\mathbf{B} \parallel \mathbf{X}$. Затем проводились измерения $\varepsilon'(T)$ и исследования доменной структуры и топографии поверхности методами атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Магнитостимулированные эффекты в TGS:Cr заключаются в следующем. После воздействия **B** величина ε'_{max} возрастает в 1.5 – 2 раза в течение первых суток. Затем ε'_{max} возвращается к исходному значению в течение 7-10 суток. Исследование топографии сколов после воздействия магнитного поля обнаружило существенное изменение характеристик нанорельефа. Средний диаметр нанорельефа уменьшается в течение первых суток, после чего возвращается к исходному значению. Подчеркнем, что при этой эволюции нанорельефа сохраняется процент занимаемой им площади поверхности. Совпадение времен релаксации диэлектрической проницаемости и магнитоиндуцированного изменения нанорельефа указывает на взаимосвязь этих характеристик. На этом основании предполагается, что воздействие магнитного поля приводит к пространственному перераспределению точечных дефектов, характерных для этого состава TGS.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

Gainutdinov, R. V. et al. // JETP Letters. 106, 97 (2017).
Ivanova E. S. et al. // Physics of the Solid State. 59, 569 (2017).
Belugina N. V. et al. // Crystallography Reports. 56, 1070 (2011).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.122

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Варюхин В.Н.,[1] Малашенко В.В.,[1,2,3] Малашенко Т.И.[4]
[1]Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк
[2]Донецкий национальный университет, Донецк
[3]Академия управления и государственной службы, Донецк
[4]Донецкий национальный технический университет, Донецк
malashenko@donfti.dn.ua

Эффекты коллективного взаимодействия структурных дефектов в условиях высокоскоростной деформации имеют свои специфические особенности, в частности, их характер и область существования зависят от скорости движения дислокаций. Высокоскоростная деформация реализуется в таких важных процессах, как штамповка и формовка материалов, их высокоскоростная обработка, ударное повреждение авиационных и космических летательных аппаратов и конструкций, при воздействии на материалы лазерными импульсами высокой мощности, при использовании сварки взрывом и динамического канально-углового прессования [1-3]. Аналитически решить широкий круг задач дислокационной динамики в условиях высокоскоростной деформации позволяет теория динамического взаимодействия структурных дефектов [4-6]. Учет коллективных эффектов позволяет, в частности, объяснить различные экспериментально наблюдаемые типы зависимости динамического предела текучести от концентрации легирующих примесей (линейная, корневая, *N*-образная). При высокоскоростной деформации плотность дислокаций значительно возрастает и может достигать значений $\rho = 10^{15}\,\text{м}^{-2}$. Благодаря этому именно взаимодействие дислокаций между собой вносит главный вклад в формирование щели в спектре дислокационных колебаний. Наличие такой щели означает, что дислокация совершает колебания в параболической потенциальной яме, перемещающейся по кристаллу вместе с ней. Увеличение плотности дислокаций приводит к увеличению щели, т.е. углублению потенциальной ямы, которая ограничивает амплитуду дислокационных колебаний, а, следовательно, снижает эффективность динамического торможения. При высокой концентрации в сплаве зон Гинье-Престона именно они вносят главный вклад в динамическое торможение дислокаций. Поскольку с ростом плотности дислокаций величина этого торможения снижается, возникает отклонение зависимости предела текучести от соотношения Тейлора. Зависимость динамического предела текучести бинарного сплава от плотности дислокаций в этом случае становится немонотонной: корневой рост сменяется спадом. Максимум соответствует значению плотности, при которой дислокации начинают вносить главный вклад в формирование спектра дислокационных колебаний.

1. Batani D. // EPL. 2016. V. 114. P. 65001(1-7).
2. Lee J., Veysset D., Singer J., Retsch M., Saini G., Thomas E. // Nature Communications.. **3,** 1164 (2012).
3. Mayer P.N., Mayer A. E. // J. Appl. Phys. 2016. V. 120. P. 075901.
4. Malashenko V.V. Physica B: Phys. Cond. Mat., **404**, 3890 (2009).
5. Варюхин В.Н., Малашенко В.В. // Известия РАН. Серия физическая. №9. С. 37 (2018).
6. Малашенко В.В. // ФТТ. 2020. Т. 62. № 10. С. 1683–1685.
7. Малашенко В.В. // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46. № 18. С. 39–41.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.123

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ИОНА Nd^{3+} В СОЕДИНЕНИЯХ $A^2B_2^3C_4^6$

Мамедова И.А., Керимова Т.Г., Бадалова З.И., Абдуллаев Н.А.

Институт физики НАНА, г.Баку, Азербайджан, irada_mamedova@yahoo.com

Соединения $A^2B_2^3C_4^6$ характеризуются яркой люминесценцией, высокой фоточувствительностью, значительными значениями ширины запрещенной зоны ~2,4 - 4 эВ, что представляет интерес для использования в качестве матрицы для легирования РЗЭ**.** В настоящей работе в качестве матрицы для легирования ионами Nd^{3+} нами использованы соединения, являющиеся представителями тройных полупроводников группы $A^2B_2^3C_4^6$, $CdGa_2Se_4$ и $ZnGa_2Se_4$.

Измерения спектров фотолюминесценции были проведены на конфокальном лазерном микроспектрометре Nanofinder 30 (Tokyo Instr., Japan). В качестве источника возбуждающего света использовался фемтосекундный перестраиваемый сапфировый с примесью Ti лазер (Spectra Physics, USA) с длиной волны на второй гармонике λ =400 нм и максимальной мощностью 10 мВт и лазер Nd:YAG с выходной длиной волны излучения λ=532 нм.

В спектрах фотолюминесценции $ZnGa_2Se_4:Nd^{+3}$ и $CdGa_2Se_4:Nd^{3+}$ обнаружены узкие линии в спектральной области от 880-928 нм. Сравнение с литературными [1,2] и табличными данными значений частот электронных переходов в атоме неодим, позволяет предположить, что эти полосы с расщепленными линиями относятся к внутрицентровой люминесценции иона Nd^{3+}. Эти лазерные по природе линии обусловлены излучательными переходами между уровнями $^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$. Полуширина всех линий наблюдаемых в спектре ФЛ $ZnGa_2Se_4:Nd^{+3}$ и $CdGa_2Se_4$: Nd^{3+} в порядке 1÷2 нм. В таблице 1 приведена идентификация линий Nd^{3+}в $ZnGa_2Se_4$ и $CdGa_2Se_4$.

Таблица 1. Полосы ФЛ иона Nd^{3+}в $ZnGa_2Se_4$ и $CdGa_2Se_4$

Соединение	$ZnGa_2Se_4:Nd^{+3}$	$CdGa_2Se_4$: Nd^{3+}
Длина волны, нм	886 902, 904, 905 920	880, 888, 893, 898, 901, 906, 909, 915, 918, 923, 928,
Переход	$^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$	

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской республики (грант № EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/02/1).

1. Расулева А. В., Соломонов В. И. // Физика твердого тела - 2005. – Т. 47. - №8. - С. 1432-1435

2. Каминский А.А, Саркисов С.Э., Чан Нгок и др.// Неорганические материалы - 1980. – Т. – 16. – С.1333

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.124

НАБЛЮДЕНИЕ УЗКИХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ В ФОНОННОМ КРЫЛЕ GeV$^-$-ЦЕНТРОВ В HPHT МИКРОАЛМАЗАХ

Нелюбов А.Ю. [1,2], Еремчев И.Ю. [3], Косолобов С.С.[2], Екимов Е.А. [4], Наумов А.В. [3]
[1]Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Институт спектроскопии РАН
[4] Институт физики высоких давлений РАН
г. Москва, Россия, arthur.nelubov@gmail.com

Центры окраски в алмазе типа германий-вакансия (GeV-) и кремний-вакансия (SiV-) образуются в результате замещения двух атомов углерода в решетке алмаза атомом Ge и Si соответственно. Интерес к этим центрам связан с их уникальными оптическими свойствами: наличию узкой бесфононной спектральной линии (БФЛ), большому значению фактора Дебая-Валлера даже при комнатной температуре, высокой фотостабильности. Эти свойства делают их перспективными в качестве спектрально узких источников одиночных фотонов, биомаркеров, наносенсоров и находит применение в нанофотонике, оптической термометрии, в биологических исследованиях (см., напр., [1,2]).

В данной работе исследовались одиночные микро- и наноалмазы, синтезированные методом высоких давлений и высоких температур (HPHT), содержащие GeV-центры окраски. Типичный спектр люминесценции таких центров при комнатной температуре представляет собой узкую (FWHM ~ 5нм) яркую БФЛ с центром на длине волны ~603 нм, соответствующую электронному 0-0 переходу, а также широкое бесструктурное фононное крыло (ФК) занимающее спектральный диапазон от ~ 600 нм до ~660 нм (Рис. 1а). Подробное описание экспериментальной установки дано в [3]. В ходе проведенных исследований были обнаружены участки одиночных микроалмазов (или группы алмазов субмикронных размеров) с нетипичными спектрами фотолюминесценции. Помимо характерных GeV- БФЛ и ФК была обнаружена целая серия очень узких спектральных линий (FWHM < 1 нм), выделяющихся на фоне ФК (Рис.1а). Форма суммарного спектра (число, спектральное положение линий, взаимная интенсивность) резко менялась при перестройке длины волны возбуждающего излучения (узкополосного лазера). Примечательно, что подавляющее большинство обнаруженных спектральных линий характеризовалось узким резонансным возбуждением и большим стоксовым сдвигом спектра люминесценции. Характерные ширины спектров возбуждения люминесценции исследованных линий составляли величины порядка 1 нм (Рис. 1б), а стоксов сдвиг линии люминесценции - величины ~1450 см$^{-1}$. Участки микроалмазов, в спектрах которых были обнаружены неизвестные линии, были сильно локализованы в пространстве. Для визуализации этих областей и исследования спектрально-морфологических корреляций была разработана и реализована техника совмещения люминесцентной и электронной микроскопии. В результате удалось определить, каким областям определенных микроалмазов соответствуют нетипичные спектры люминесценции.

Еще одним важным результатом является обнаруженное скачкообразное необратимое (на протяжении десятков часов) фотовыжигание ряда обнаруженных узких спектральных линий при резонансном интенсивном возбуждении. Кроме того, для ряда линий наблюдалось мерцание люминесценции - обратимые переходы между двумя состояниями интенсивности линии – ярким и темным (безызлучательным). Помимо прочего, Обнаруженные эффекты косвенно свидетельствуют о том, что часть обнаруженных линий соответствуют свечению одиночных центров окраски. Более точные измерения, основанные на измерение антигруппировки фотонов в узкой спектральной области, не дали результатов из-за большого остаточного вклада сигнала ФК от ансамбля GeV центров.

Возможным объяснением наблюдаемых линий может быть наличие помимо GeV- других примесных центров неизвестной природы. Однако, совпадение областей спектров возбуждения и люминесценции с GeV-центрами, огромный стоксовый сдвиг линии люминесценции, а также одиночный характер обнаруженных излучателей может свидетельствовать в пользу того, что обнаруженные линии соответствуют электронно-

колебательным повторениям спектра одиночных GeV-центров, находящихся в локальном окружении, сильно отличающемся от окружения основного ансамбля GeV-центров в микроалмазе. Исследования природы этих линий представляют большой научный интерес и в дальнейшем могут помочь проводить контролируемый синтез образцов с наиболее привлекательными оптическими свойствами.

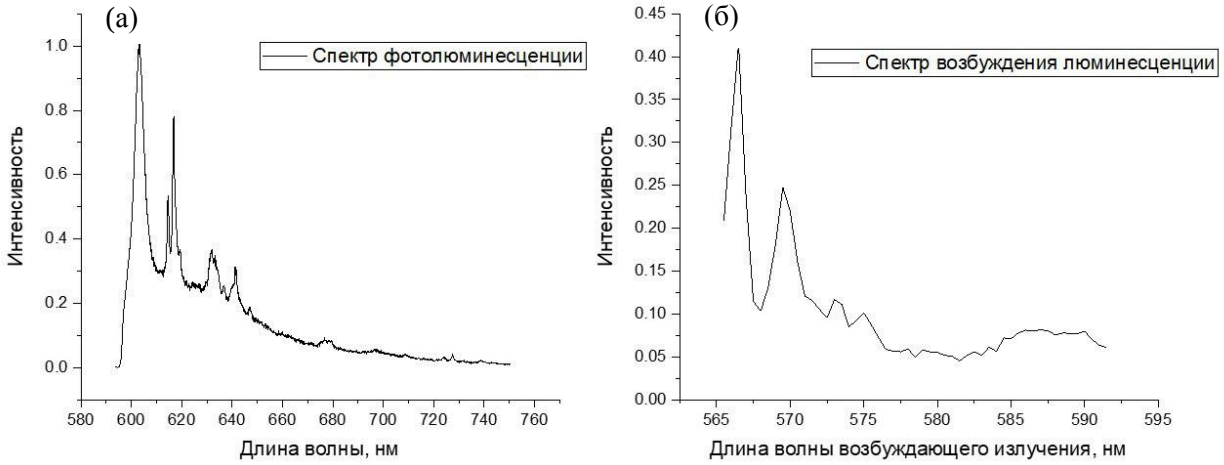


Рис. 1 Спектры фотолюминесценции и возбуждения люминесценции одиночного микроалмаза, содержащего GeV-центры. (а) Пример спектра фотолюминесценции микроалмаза с GeV-центрами при возбуждении в районе 565 нм, в котором наблюдаются узкие линии в области фононного крыла GeV-центров; (б) пример спектра возбуждения люминесценции для линии с центром на длине волны 614,2 нм.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-29-19200.

1. F. Jelezko, J. Wrachtrup, "Single defect centres in diamond: A review", Physica Status Solidi a-Applications and Materials Science, 203, 13, (2006) 3207-3225.

2. Кудрявцев О.С., Хомич А.А., Седов В.С., Екимов Е.А., Власов И.И. «ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ И КР-СПЕКТРОСКОПИЯ ЛЕГИРОВАННЫХ НАНОАЛМАЗОВ» Журнал прикладной спектроскопии. 2018. Т. 85. № 2. С. 280-284.

3. И.Ю. Еремчев, М.Ю. Еремчев, А.В. Наумов, "Многофункциональный люминесцентный наноскоп дальнего поля для исследования одиночных молекул и квантовых точек (к 50-летию Института спектроскопии РАН)", Успехи Физических Наук, 189, 3, (2019) 312-322.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.125

РАСШИРЕНИЕ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ В 4H-SIC ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Орлов В.И., Якимов Е.Е., Якимов Е.И.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия, yakimov@iptm.ru
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

Дефекты упаковки в 4H-SiC могут генерироваться в процессе работы силовых приборов, что приводит к деградации их свойств. Поэтому исследования процессов генерации и расширения дефектов упаковки при инжекции неравновесных носителей заряда представляют как научный, так и практический интерес. В настоящей работе дефекты упаковки вводились в 4H-SiC с концентрацией доноров 5×10^{15}см$^{-3}$ при облучении электронным пучком в РЭМ JSM 6490в интервале температур 80 – 300 К. Исследования дефектов упаковки и их расширения в процессе облучения проводились методом катодолюминесценции в том же микроскопе с использованием системы MonoCL3. Для зарождения дефектов упаковки на поверхность, наклоненную на 4° по отношению к базисной плоскости, при комнатной температуре наносились отпечатки алмазного индентора.

При облучении электронным пучком области вблизи отпечатка зарождаются и расширяются дефекты упаковки, имеющие форму ромба. Анализ их расширения показывает, что облучение электронным пучком стимулирует движение только двух 30°-ных частичных дислокаций, движение которых и приводит к расширению дефектов упаковки. Согласно широко распространенному мнению, эти дислокации имеют Si ядро. Обнаружено, что скорость подвижных частичных дислокаций практически не зависит от расстояния до отпечатка, хотя сдвиговые напряжения должны спадать обратно пропорционально квадрату этого расстояния. Это может свидетельствовать о том, что, либо напряжения существенно релаксируют, либо при облучении на частичные дислокации действует эффективная сила, сравнимая или даже больше, чем упругие напряжения. Обычно считают, что эта движущая сила определяется выигрышем в энергии при захвате электронов на дефект упаковки. Как было показано нами, энергетический уровень, связанный с дефектом упаковки $E_{SF} = E_c - 0.213$ eV [1], т.е. расположен ниже уровня Ферми. Показано, что дефекты упаковки, введенные при комнатной температуре при облучении электронным пучком, могут уменьшаться в размерах при последующем отжиге при температурах выше 500°C.

Показано, что, скорость скольжения частичной дислокации пропорциональна току пучка во всем исследованном диапазоне температур, а энергия активации ее скольжения не превышает 8 мэВ, что существенно ниже энергии скольжения дислокаций под действием сдвиговых напряжений (~ 1.5 эВ) [2]. Исследования с использованием точечного облучения показали, что дислокация движется как целая линия даже когда облучается одна точка на ней. При этом расстояние между точкой облучения и движущейся дислокацией может достигать 10 мкм.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской *Федерации (тема № 075-00355-21-00).*

Feklisova O.V., Yakimov E.E., Yakimov E.B. // Appl. Phys. Lett. – 2020. – V. 116. – 172101.
Yakimov E.E., Yakimov E.B. // J. Alloys Compds. – 2020. – V. 837. - 155470.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.126

ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ НАНОВКЛЮЧЕНИЙ ЖИДКОГО СВИНЦА ВДОЛЬ ОДНОЙ ЗАКРЕПЛЕННОЙ ДИСЛОКАЦИИ В АЛЮМИНИИ, СВЯЗАННАЯ С ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Прокофьев С.И.

Институт физики твердого тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, prokof@issp.ac.ru

Ранее нами с помощью in-situ ПЭМ наблюдений было показано, что, благодаря линейному натяжению, нановключения на закрепленном на концах сегменте дислокации взаимодействуют друг с другом и с закрепленными концами сегмента. [1-4] Это приводит к их хаотическим осцилляциям вблизи линии дислокации. [1-5]. Так как осцилляции каждого из включений приводят к осцилляциям связанных с ним краев потенциальных ям, что вносит вклад в осцилляции находящихся в них соседних включений. Таким образом, включения на одной дислокации являются связанными хаотическими осцилляторами, что позволяет ожидать их пространственно-коррелированное движение, что было показано в [4]. Кроме того, можно ожидать появления временных корреляций их осцилляций и возникновения общих колебательных мод.

В данной работе рассматриваются коррелограммы временных зависимостей осцилляций нановключений жидкого свинца на закрепленной дислокации в алюминии. Кроме того, анализируются частотные спектры, полученные из временных зависимостей осцилляций нановключений с помощью быстрого преобразования Фурье. Они указывают на временные корреляции тепловых осцилляций включений на дислокации и говорят о том, что хаотические осцилляции включений на дислокации синхронизированы. Кроме того, нам удалось получить указания на переход между синхронными и асинхронными осцилляциями включений.

Благодарности.

Данная работа сделана в рамках госзадания ИФТТ РАН.

Prokofjev S., Zhilin V., Johnson E., Levinsen M.T., Dahmen U. // Def. Diff. Forum. – 2005. – V. 237-240. – P. 1072-1077.
Johnson E., Prokofjev S., Zhilin V., Dahmen U. // Z. Metallk. – 2005. – V. 96. – № 10 – P. 1171-1180.
Prokofjev S.I., Johnson E., Zhilin V.M., Dahmen U. // Adv. Sci. Technol. – 2006. – V. 46. – P. 98-103.
Prokofjev S.I., Johnson E. // J. Phys. Commun. – 2017. – V. 1. – № 5. – 055001.
Prokofjev S. I., Zhilin V. M., Johnson E., Dahmen U. // Def. Diff. Forum. – 2007. – V. 264. – P. 55-61.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.127

ТОПОГРАФИЧЕСКОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В ИЗОГНУТОМ КРИСТАЛЛЕ

Смирнова И.А., Суворов Э.В.
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, irina@issp.ac.ru

Дифракция рентгеновского излучения является практически единственным неразрушающим методом определения параметров реальной структуры кристаллов – пространственное расположение и размеры деформированных областей в объеме кристалла, величины деформаций и пр. Однако суперпозиция пространственно протяженных и локализованных искажений кристаллической решетки в большинстве случаев затрудняет анализ параметров таких дефектов. В литературе имеется только несколько публикаций [1-3] в которых обсуждается эта проблема. Теоретический анализ [2], проведенный методом траекторий блоховских волн показал, что динамические интерференционные полосы становятся асимметричными по отношению к дислокационной линии, а прямое изображение дислокации расщеплено.

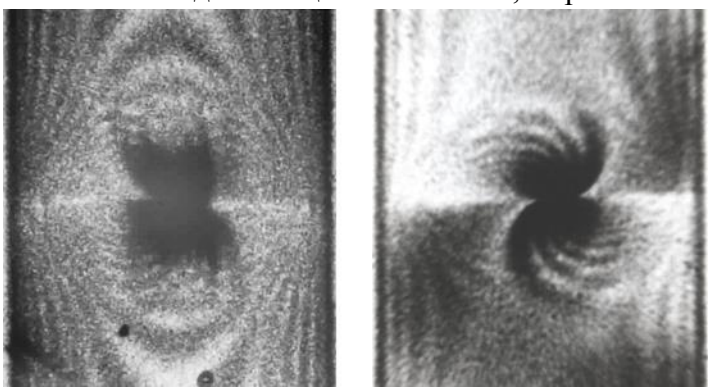


Рис. 1. Фрагменты топограмм кристалла Si с винтовой дислокацией, отражение (660), толщина кристалла t = 412 мкм, (**Hb**)=-24; а) без изгиба, б) кристалл изогнут.

В данной работе экспериментально и методом численного моделирования исследуется влияние изгиба кристалла на изображение винтовой дислокации в секционной и проекционной топографии. На рис.1 представлены экспериментальные секционные изображения винтовой дислокации, параллельной поверхности кристалла и находящейся на середине толщины кристалла. Видно, что изображения сильно различаются. В первом случае прямое изображение и интерференционные полосы зеркально симметричны относительно дислокационной линии. Во втором, прямое изображение винтовой дислокации центро-симметрично и по разному смещено в сторону отраженного пучка выше и ниже следа дислокационной линии.

Дальнейший численный анализ был проведен при различных величинах и знаках радиуса изгиба, при различной глубине залегания дислокации, с учетом и без релаксации напряжений на поверхности кристалла. Для того чтобы более наглядно выявить основные особенности прямого изображения дефекта было рассмотрено прямое изображение винтовых дислокаций с большой величиной (**Hb**), и на отражениях высоких порядков.

1. В.И. Кушнир, Э.В. Суворов, К.Ю. Мухин // ФТТ, т.22, в.7, 2135-2143, (1980).
2. F. N. Chukhovskii, P.V. Petrashen // Acta Cryst., A44, 8-14, (1988).
3. Tomoe Fukamachi, Masahiko Tohyama et al. // Acta Cryst. A66, 421–426, (2010).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.128

ПРИЧИНЫ И ПРОЯВЛЕНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ПРИ ДВИЖЕНИИ ГРАНИЦ ЗЁРЕН

В.Г. Сурсаева, В.Н.Семенов
Институт физики твердого тела, РАН, Черноголовка, Московская область, 142432, Россия
E-mail: sursaeva@issp.ac.ru

Экспериментально изучено движение индивидуальной границы зерен в форме полупетли в цинке. Обнаружена связь между подвижностью полупетли и изменением формы ее структурных элементов (криволинейные сегменты, фасетки, и зернограничные ребра). На температурной зависимости подвижности зернограничной полупетли наблюдается гистерезис

Мы считаем, что наличие минимумов на зависимости зернограничной энергии от кристаллографии границы является необходимым условием появления фазового перехода фасетирования. Однако, чтобы граница могла выйти из энергетического минимума при движении границы и росте зёрен, необходимо определённое соотношение подвижностей фасетированной и нефасетированной границы. Если подвижность фасетки $m_{фас}$ выше, чем скруглённой границы $m_{гр}$, границе выгодно перемешаться с фасеткой. Это соотношение подвижностей фасетки и искривлённой части $m_{фас} / m_{гран}$ должно меняться с температурой. Нами экспериментально измерено отношение подвижностей для границ $[10\bar{1}0]$ и $[11\bar{2}0]$ и обнаружено, что для границ $[11\bar{2}0]$ это отношение меняется более резко. [1]. Сравнение отношения подвижностей фасетки и искривлённой части $m_{фас} / m_{гран}$ границы наклона $[10\bar{1}0]$ и границы наклона $[11\bar{2}0]$ при температурах 395С и 405С показывает, что для обеих температур для границы наклона $[11\bar{2}0]$ они выше, чем для границ наклона $[10\bar{1}0]$. Это означает, что искривлённая часть границы $[11\bar{2}0]$ менее подвижна, чем границы $[10\bar{1}0]$. Поэтому границы $[11\bar{2}0]$ более склонны к фасетированию, что и наблюдается экспериментально. От того, насколько сильно это соотношение меняется с температурой, зависит величина гистерезиса зернограничной подвижности полупетли как целого. И параметры гистерезиса для $[10\bar{1}0]$ и $[11\bar{2}0]$ тоже отличаются [2,3]. Гистерезис для границ наклона $[11\bar{2}0]$выражен более слабо [3].

Литература

1. Сурсаева В.Г., Прокофьев С.И. Фасетирование движущейся границы зерна и его влияние на кинетические свойства границы. Известия РАН. Серия Физическая, 2017, № 11, стр 1534-1537
2. Гистерезис зернограничной подвижности границ наклона [10-10] в цинке.
Деформация и разрушение материалов 2020 N4, стр 2-7
3. . Сурсаева В. Г., А. С. Горнакова
Гистерезис зернограничной подвижности при зернограничных фазовых переходах
Деформация и разрушение материалов 2020 N5, стр 2-6

Работа выполнена в рамках госзаказа и при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-03-00168).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.129

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ПРИ РКУП С ЭКСТРУЗИЕЙ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКОЙ СПЛАВА СИСТЕМЫ Mg-Al-Zn

Аксенов Д.А.[1,2], Назаров А.А.[3], Асфандияров Р.Н. [1,2], Рааб Г.И. [1]

[1]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

[2]*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия*

[3]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия*

Магниевые сплавы представляют особый интерес в использовании их в медицинской и авиационной отраслях. Магниевые сплавы биорастворимы, имеют небольшую плотность, благодаря чему являются легкими, а также хорошо поглощают энергию удара и вибрационных колебаний. Наряду с положительными характеристиками, они обладают рядом отрицательных –это и высокая скорость биодеградации, и низкая прочность, а также низкая пластичность, что существенно затрудняет обработку материала деформационными методами.

В данной работе исследуются структурные изменения и эволюция прочностных свойств магниевого сплава подверженного деформационной обработке по совмещенной схеме –РКУП-экструзия, а также последующего воздействия ультразвуком.

Деформация проводилась при температуре 350°С в результате чего были получены образцы, структура которых сочетает в себе фрагменты в виде полос средним поперечным размером 80±6 мкм и направленные вдоль оси деформирования области рекристаллизованных зерен с размером 13±2 мкм. Предел прочности достигает 290±10 МПа.

Воздействие ультразвуком происходило по схеме формирования стоячей волны в образце длиной равной λ/2. Амплитуда колебаний составила 10 мкм, время воздействия 2 мин. Исследования подвергалась центральная часть образца. Установлено, что средний поперечный размер полос практически не изменяется и составляет 74±6 мкм, а также средний размер рекристаллизованных зерен остается прежним 12±2 мкм. При этом наблюдается повышение предела прочности материала на 10 МПа до 310±10 МПа.

Таким образом в процессе РКУП-экструзии происходит непрерывная динамическая рекристаллизация, в результате чего формируется полосовая структура с направленными скоплениями рекристаллизованных зерен по границам полос. Упрочнение, которое происходит в процессе ультразвуковой обработки вероятно происходит в связи перераспределением дислокаций и совершенствованием границ фрагментов.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.130

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ НА КИНЕТИКУ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Cu-Cr-Zr

Аксенов Д.А.[1,2], Фаизова С.Н.[3]

[1]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

[2]*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия*

[3]*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак, Россия*

В формировании свойств дисперсионно-упрочняемых материалов фазовые превращения играют особую роль. В условиях интенсивной пластической деформации характер фазовых превращений изменяется. Установлено, что при больших пластических деформациях возможно протекание процесса деформационно-индуцированного растворения частиц, что в свою очередь ведет к изменению кинетики распада пересыщенного твердого раствора. Наиболее подробные данные о деформационно-индуцированном растворении накоплены для сплавов на основе железа, где для определения концентрации твердого раствора используются специфичные для ферромагнетиков свойства, температура Кюри и коэрцитивная сила, которые чувствительны к концентрации растворенных примесей.

Для низколегированных медных сплавов такой характеристикой является электропроводность, а также параметр решетки. На рис.1 представлены результаты измерения электропроводности сплава системы Cu-Cr-Zr в состаренном состоянии подверженного кручению под высоким давлением от 1 до 10 оборотов при комнатной температуре.

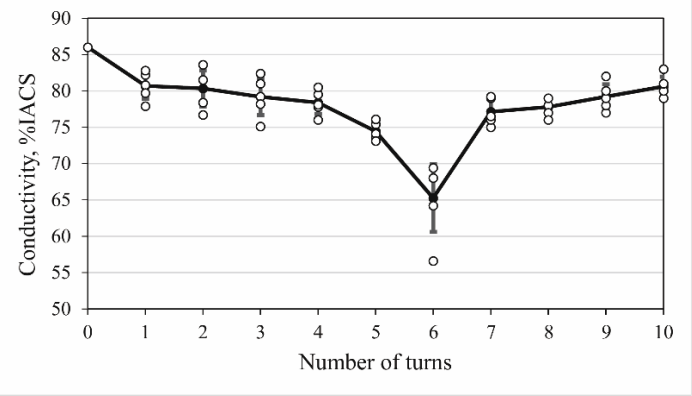


Рис. 1. Электропроводность образцов сплава системы Cu-Cr-Zr после КВД.

В работе установлено, что представленное немонотонное изменение электропроводности, а также параметра решетки и концентрации хрома и циркония связано с воздействием высоких сдвиговых напряжений при КВД на частицы, а именно их разлому. Этот процесс приводит к появлению большого числа острых ребер, что ведет к формированию неравновесного состояния частиц и приводит к их деформационно-индуцированному растворению. По завершении ресурса частиц, предрасположенных к разлому, активно развивается процесс деформационно-стимулированного распада пересыщенного твердого раствора до наступления динамического равновесия.

Таким образом выявлена активная роль ИПД которая проявляется в том, что она обеспечивает независимый от диффузии механизм влияния на состояние второй фазы (частиц), тем самым существенно меняя граничные условия диффузионного уравнения.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.131

Термическая стабильность карбогидридов, полученных высокоэнергетическим измельчением титана в среде толуола

Аксенова В.В.*, Канунникова О.М., Бурнышев И.Н., Пушкарев Б.Е., Ладьянов В.И.

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия, aksenova@udman.ru

Благодаря своей низкой плотности, высокому соотношению прочности к весу и хорошей коррозионной стойкости титан и его сплавы в настоящее время востребованы в качестве конструкционных материалов в аэрокосмической, автомобильной и медицинской отраслях промышленности. Среди методов синтеза наноструктурированных материалов механическое легирование является одним из наиболее перспективных. Для получения в процессе механической активации (МА) гомогенно-легированных порошков с хорошей микроструктурой добавляются поверхностно-активные органические вещества. В настоящей работе карбогидриды титана получали высокоэнергетическим измельчением титана в шаровой планетарной мельнице АГО-2С (скорость вращения 890 об / мин.) в присутствии толуола. Продолжительность МА от 50мин до 20ч. Термический анализ карбогидридов проводили с помощью установки Diamond DSC (Perkin Elmer) при нагревании до 700°С в потоке аргона. Спектры термодесорбции (ТДС) водорода получены на газоанализаторе G8 Galileo H (Bruker). В качестве газов-носителей использовались азот и аргон, нагрев осуществлялся в диапазоне 200 – 910°С. Рентгеноструктурный анализ проводили с использованием дифрактометра D8 Advance (Bruker) с монохроматическим излучением CuKα.

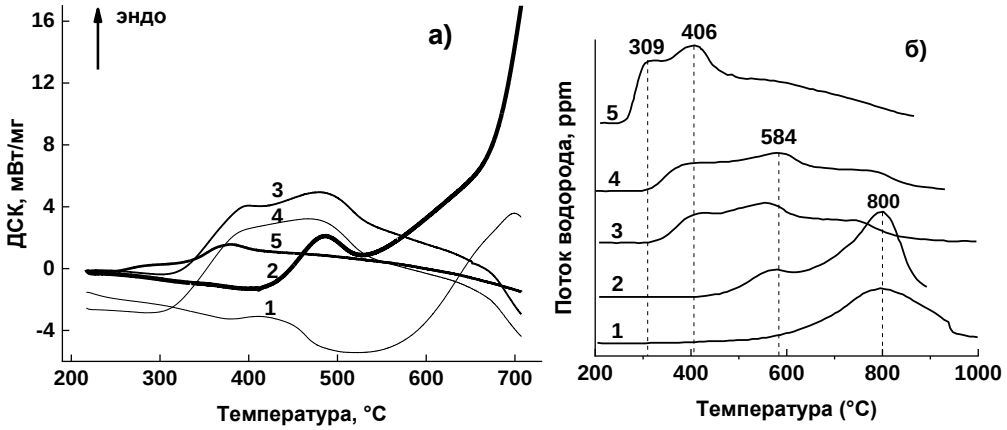


Рис. 1. Кривые ДСК (а) и спектры ТДС (б) порошка после МА: 50мин (1), 5ч (2), 10ч (3), 15ч (4), 20ч (5).

Установлено, что шаровое измельчение титана в толуоле до 5ч приводит к образованию смеси α-Ti с ГПУ-структурой и карбогидридов Ti с ГПУ и ГЦК-структурой. При малых временах МА (50 мин и 5 ч), характеризующихся полным превращением ГПУ→ГЦК, эндотермический пик при 430°С появляется за счет α→β фазового превращения в Ti в присутствии водорода. При этом водород стабилизирует β-Ti, снижая температуру его образования до 300°С. Увеличение тепловыделения около 530°С связано, по-видимому, с высвобождением энергии деформации измельченного порошка Ti. Показано, что увеличение доли карбогидридов ГПУ сопровождается также уменьшением размеров кристаллитов твердой фазы. Причем ГПУ карбогидриды содержат меньше водорода, чем ГЦК карбогидриды. При этом температура разрушения карбогидридов выше, чем у карбогидридов ГЦК.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.132

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ПРОПИТКИ ЧЕТЫРЕХМЕРНЫХ КАРКАСОВ ПРИ ИЗГОТОВЛЕНИИ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

[1]Антанович А.А., [2]Колесников С.А., [2]Максимова Д.С.

[1]ФГБУН институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской Академии наук, Москва, г. Троицк, Россия, antanov@hppi.troitsk.ru

[2]АО «НИИ конструкционных материалов на основе графита», г. Москва, Россия, skolesnikov02@mail.ru, dmaksimova@niigrafit.org

Исследована пористая структура 4D-L (Рисунок 1) четырехмерных углеродных каркасов, используемых при изготовлении углерод-углеродных композиционных материалов (УУКМ). Углеродный армирующий каркас собирали из стержней диаметром 1,22 мм, каждый из которых получен параллельным сложением трех углеродных конструкционных нитей УКН-5000, содержащих 5000 элементарных филаментов диаметром ~ 8 мкм. В соответствии с этим пористая структура такого каркаса содержит меж стержневые и внутри стержневые поры, а внутри стержневые поры можно разделить на меж нитяные и меж филаментные поры. Из геометрии 4D-L каркаса были определены и оценены четыре типа меж стержневых пор с условными диаметрами 0.2, 0.7, 1.0 и 2.0 мм. Условный размер трех продольных межнитевых пор оценен как 10-70 мкм, а условные размеры двух типов межфиламентных пор, рассчитанные из гексагональной схемы упаковки филаментов в нити, составили 0.7 и 2.0 мкм.

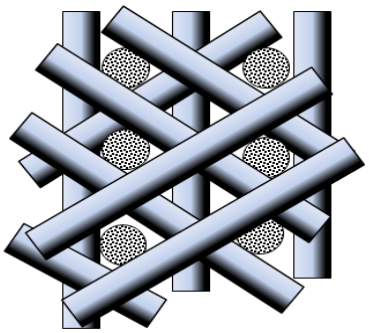


Рис. 1. Структура 4D-L

Изготовление УУКМ, как правило, предусматривает два этапа: предварительное уплотнение материала без внешнего давления и последующую изостатическую обработку при высоком давлении. В качестве прекурсора углеродной матрицы УУКМ использовали каменноугольный пек. Сначала армирующий каркас пропитывается в автоклаве жидким пеком при температуре минимальной вязкости ~ 340 ºС с последующими карбонизацией пека в печи карбонизации и высокотемпературной обработкой в вакууме для графитизации полученного коксового остатка. Полученная заготовка УУКМ с уже меньшей, чем в каркасе, пористостью снова проходит цикл пропитка-карбонизация-графитизация, который последовательно повторяется до достижения заданного уровня уплотнения.

На основании проведенного анализа поровой структуры армирующего каркаса были проведены оценки глубины пропитки каменноугольным пеком каркасов и заготовок УУКМ, которые показали что в объеме стержней капиллярные силы достаточны для обеспечения необходимого массопереноса, а поры между стержнями могут заполняться только под внешним давлением среды.

Кроме того, при перемещении пропитанного каркаса из автоклава в печь карбонизации возможно истечение расплава пека из поровой структуры краевых областей каркаса, что создает неоднородность структуры материала. Ввиду того, что основная часть объема пор каркаса приходится на меж стержневую пористость, основным содержанием технологических приемов создания промышленных образцов УУКМ является обеспечение уровня давления на предварительном этапе уплотнения, достаточного как для пропитки каркаса, так и для предотвращения истечения импрегната на последующих высокотемпературных операциях.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.133

ВЫРАЩИВАНИЕ, СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ВЫСОКОГЕРМАНИЕВОГО КВАРЦА

Балицкий В.С.[1], Балицкий Д.В.[2], Бубликова Т.М.[1], Балицкая Л.В.[1], Сеткова Т.В.[1]

[1]*Институт экспериментальной минералогии им. акад. Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия,* balvlad@iem.ac.ru
[2]*Cristal Laser SAS, г. Мессен, Франция*

Доклад посвящен проблеме выращивания высокогерманиевого α-кварца (ВГК) с более высокими пьезоэлектрическими характеристиками и работоспособностью при более высоких температурах, чем обычный кварц. Исследования позволили впервые разработать надежный лабораторный метод выращивания кристаллов ВГК в сверхкритических водно-фторидных флюидах и установить условия максимального захвата и равномерного распределения германия в выращенных кристаллах.

Кристаллы ВГК выращивали гидротермальным методом температурного градиента при температурах от 240 до 700ºС и давлениях от 30 до 150 МПа в жаропрочных автоклавах объемом до 1.5 л, используя водные растворы NH_4F концентрацией 1.5–10 масс. %. Шихтой служили спеченные смеси кварца и кварцеподобного оксида германия. Продолжительность опытов составляла от 1 до 3 месяцев.

В результаты установили, что основными факторами, влияющими на формирование однородных кристаллов ВГК, являются концентрация растворов, доля оксида германия в шихте, температура и направление роста кристаллов. Эти же факторы определяют скорости роста кристаллов, их морфологию и степень однородности. Наиболее однородные кристаллы ВГК с содержанием GeO_2 10–16 масс. % были выращены в растворах 3–8 масс. % NH_4F на затравках, параллельных граням тригональных призм и дипирамид, отрицательного и положительного ромбоэдров при температурах 500–650°С и давлениях 70–150 МПа. Выбор таких затравок, обусловлен тем, что в растворах NH_4F они сохраняют морфологическую устойчивость даже при температурах 600-700°С (давления 80–150 МПа). Наиболее устойчивыми являются грани основных ромбоэдров и тригональной дипирамиды. Скорости роста выращенных кристаллов ВГК составляли от первых сотых до первых десятых долей миллиметра в сутки. Исследование монокристаллов ВГК показало, что их пьезоэлектрические характеристики и коэффициент электромеханической связи близки к таковым кристаллов ортофосфата галлия, а температура α→β перехода возрастает при содержании германия 10–12 масс.% до 780–800°С, т.е. возрастает более чем на 200°С по сравнению с обычным кварцем. Это существенно повышает температурные пределы работоспособности монокристаллов ВГК. В отличие от природного и обычного синтетического кварца высшего качества, уход частот в кристаллах ВГК не наблюдается, по крайней мере, до 400-450°С (при более высоких температурах измерения не проводились). Зависимость логарифма удельного сопротивления у ВГК от температуры имеет строго линейный характер.

Все это позволяет считать кристаллы ВГК перспективным пьезоэлектрическим материалом, промышленное производство которого может привести к усовершенствованию известных и созданию новых более эффективных устройств и приборов, работающих при повышенных и высоких температурах.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.134

ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ ИСПАРИТЕЛЬНО-РЕЦИРКУЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД ВЫРАЩИВАНИЯ КВАРЦЕПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛОВ $GaPO_4$ В ОБЛАСТИ РЕТРОГРАДНОЙ РАСТВОРИМОСТИ

Балицкий Д.В.[1], Балицкий В.С.[2], Бубликова Т.М.[2], Балицкая Л.В.[2], Сеткова Т.В.[2]

[1]*Cristal Laser SAS, г. Мессен, Франция*
[2]*Институт экспериментальной минералогии им. акад. Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия,* balvlad@iem.ac.ru

Монокристаллы кварцеподобного α-$GaPO_4$ являются перспективным пьезоэлектрическим материалом, работающим при высоких температурах вплоть до фазового α-β перехода при 970°C. В представленном докладе приводятся результаты развития метода гидротермальной испарительно-рециркуляционной кристаллизации (ГИРК), впервые примененного для выращивания указанных монокристаллов (рис.1а).

Кристаллы α-$GaPO_4$ массой 10-20 граммов (рис.1б) выращивали в смесях водных растворов кислот низкого и высокого давления пара (H_3PO_4/HCl) при 180-240°C (10-20 бар) [1]. Принципиальной особенностью метода является пространственное разделение зон роста кристаллов и растворения питательного вещества (шихты), что приводит к постоянному массовому переносу растворенного питательного вещества, особенно для материалов с ретроградной растворимостью. Перенос вещества осуществляется путем растворения шихты α-$GaPO_4$ в капельном потоке конденсированного «легколетучего» растворителя (HCl). Метод позволяет обеспечить насыщение раствора при температуре равновесия и избежать спонтанной кристаллизации, а также растворения затравки. Выращенные кристаллы не содержат H_2O, имеют низкую концентрацию OH (рис. 1в) и приемлемую структурную однородность. Предложенный метод относительно прост в использовании, хорошо воспроизводится для выращивания кристаллов α-$GaPO_4$ и может быть применен для выращивания других соединений с ретроградной растворимостью.

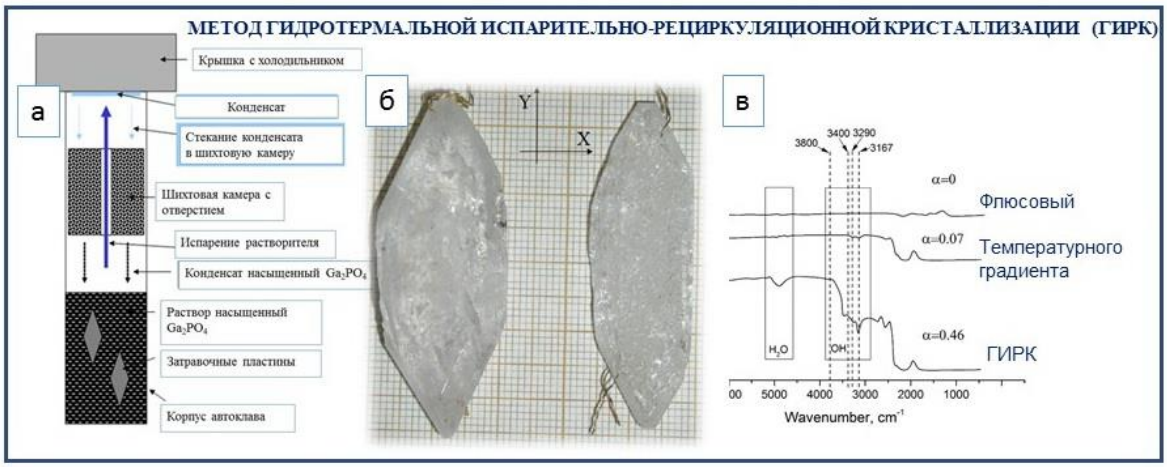


Рис. 1. а-принципиальная схема процесса выращивания кристаллов $GaPO_4$ методом ГИРК в водных растворах кислот H_3PO_4+HCl; б-монокристаллы $GaPO_4$, в-ИК-спектры кристаллов $GaPO_4$, полученных методами: ГИРК, температурного перепада и флюсовым.

D. Balitsky, E. Philippot, V. Balitsky, L. Balitskaya, T. Setkova, T. Bublikova, and P. Papet. // Molecules. – 2020. – 25(19). P- 4518–4518.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.135

ПЛЁНОЧНЫЙ НАГРЕВАТЕЛЬ С СЕРЕБРЯНЫМИ НАНОПРОВОЛОКАМИ

Бедин С.А.[1,2], Миронова А.Б.[1], Панов Д.В.[1,2]

[1]*Московский Педагогический Государственный Университет, Москва, Россия*
[2]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
bserg5@gmail.com

В настоящее время возникает большой интерес к созданию различных элементов гибкой электроники, таких как проводники, сенсоры и активные элементы. Одним из таких активных элементов является плёночный нагреватель. С развитием методик синтеза наноматериалов появляются новые подходы к синтезу подобных элементов. Одним из них является создание на поверхности полимерной плёнки сетки из медных или серебряных нанопроволок [1-2]. Нанопроволоки наносят методом спинкоатинга или при помощи кисточки с последующим отжигом или кратковременным нагревом ионным пучком или оптическим излучением при помощи лампы для спекания нанопроволок между собой и образования сплошной сетки. Полимерная плёнка толщиной в несколько десятков микрометров с сеткой из нанопроволок является хорошим проводником для небольших токов и может быть использована для размещения элементов электроники. Если же через сетку из нанопроволок пропускать токи в несколько десятков миллиампер, то поверхность плёнки начинает нагреваться. Температуру нагрева обычно ограничена температурной стойкостью полимера-носителя. Предполагается, что такие нагреватели могут быть использованы для подержания в рабочем температурном режиме дисплее устройств, как система антизапотевания (например, для очков) или в медицине для прогревания. Всё вышеописанное определяет актуальность работы по созданию гибких нагревателей на основе тонких полимерных плёнок.

В данной работе предлагается создание не поверхностной сетки из нанопроволок на поверхности полимера, а интегрировать нанопроволоки внутри полимерной плёнки виде трёхмерной сетки. Для этого мы в качестве основы использовали полимерные трековые мембраны (ТМ). Они как известно представляют из себя полимерную плёнку толщиной 10-12 мкм из полиэтилентерефталата (или поликарбоната) внутри которых имеется система идентичных пор диаметром от нескольких десятков нанометров до нескольких микрон. Благодаря особенности производства ТМ, поры имеют пересечения в глубине полимера. Если поры в ТМ заполнить металлом (серебром или медь), то получится трёхмерная сетка из НП, которая может быть использована для нагрева.

Благодарности.
Работа выполнена в рамках государственного задания МПГУ по теме «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике».

Kim Y. J., Kim G., Kim H.-K. Study of Brush-Painted Ag Nanowire Network on Flexible Invar Metal Substrate for Curved Thin Film Heater // Metals. – 2019. – T. 9, № 10.
Lan W., Chen Y., Yang Z., Han W., Zhou J., Zhang Y., Wang J., Tang G., Wei Y., Dou W., Su Q., Xie E. Ultraflexible Transparent Film Heater Made of Ag Nanowire/PVA Composite for Rapid-Response Thermotherapy Pads // ACS Appl Mater Interfaces. – 2017. – T. 9, № 7. – C. 6644-6651.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.136

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ МЕТАЛЛИЗИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК НА БАЗЕ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН

Ковалец Н.П., Варшавский Д.М., Разумовская И.В., Бедин С.А.

Московский педагогический государственный университет, г. Москва, Россия,
zabalueva_1991@mail.ru

Металлизированные полимерные плёнки находят широкое применение в технике, в том числе в авиакосмической промышленности (высоко отражающие материалы, радиоантенны и пр.). Формирование металлического покрытия на поверхности полимера с хорошей адгезией полимер/металл является достаточно сложной задачей, которая решается различными физико-химическими методами [1,2].

Ранее [3] мы рассмотрели возможность увеличить прочность связи металлического покрытия с полимерной пленкой в виде трековой мембраны (ТМ) за счет частичного заполнения пор ТМ металлом. В этом случае металл в порах служит точками закрепления металлической поверхностной пленки, но одновременно образует своеобразные дефекты, влияющие на разрушение пленки и ее отслаивание. Задачей данной работы было определить, как вариация размеров пор и их плотности меняют соотношение между этими двумя факторами.

В работе были использованы ТМ на основе полиэтилентерефталата (ПЭТФ) толщиной 12 мкм, изготовленные в Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флерова ОИЯИ (г. Дубна), с системой пор, перпендикулярных по отношению к поверхности, а также пересекающихся пор, направленных к поверхности под углом 43º. Плотность и диаметр пор в разных сериях выбиралась таким образом, чтобы в одних сериях существовало взаимодействие полей упругих напряжений между порами, а в других – практически отсутствовало [4].

В качестве металлического покрытия было выбрано серебро, т.к. оно используется для хорошо отражающих поверхностей в условиях дальнего космоса, в отсутствии кислорода. Толщина слоя составляла 50, 100 и 200 нм. Поры заполнялись либо медью (что определялось простотой технологии заполнения пор и хорошей адгезией выбранной пары металлов), либо серебром.

В одной серии экспериментов развитие трещин на металлической поверхности исследовалось непосредственно в поле зрения оптического микроскопа Nikon Eclipse LV100. Растяжение осуществлялось с помощью ручной растяжной машинки с одновременным измерением электрического сопротивление образца двухпроводным методом с помощью мостового измерителя импеданса UT-612LCR. В другой серии экспериментов на разрывной машине Autograph AG-10kNXplus фирмы «Shimadzu» со специальными зажимами одновременно снимались кривые растяжения и измерялось электрическое сопротивление образцов.

Результаты эксперимента подтвердили перспективность получения металлизированных гибких полимерных пленок на основе ТМ с частично заполненными порами. При сочетании достаточно большой плотности пор и расстояниях между ними, превышающих 5 их диаметров, металлическая поверхность при деформации образца эффективно сопротивляется отслаиванию от полимерной основы (Рис. 1) и сохраняет значительную часть проводимости до деформаций в 30-40%.

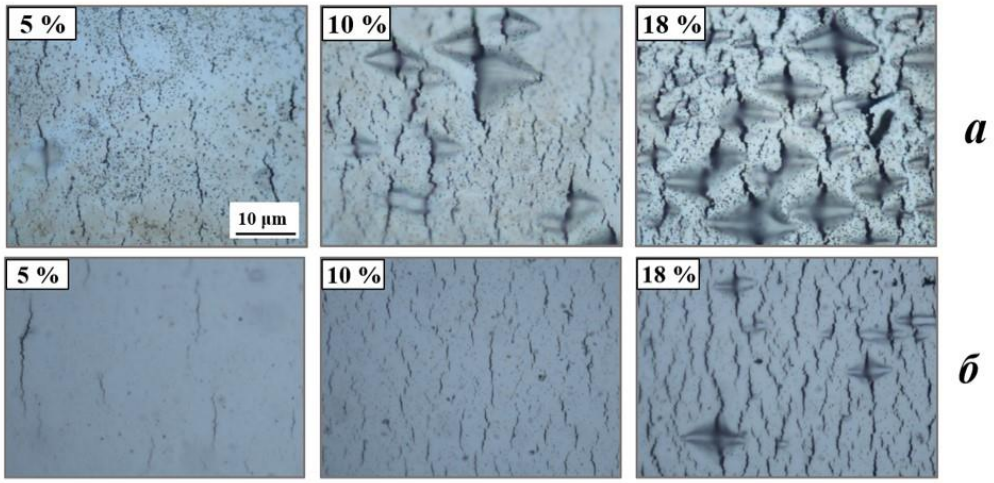


Рис.1. Фотографии металлизированной поверхности ТМ для серии образцов ***а*** – при существенном взаимодействии полей упругих напряжений между порами (плотность пор $1{,}18 \cdot 10^7$ см$^{-2}$, диаметр пор 0,29 мкм) и ***б*** – при отсутствии полей (плотность пор $4{,}41 \cdot 10^7$ см$^{-2}$, диаметр 0,058 мкм) при разных деформациях (Nikon Eclipse LV100). Толщина покрытия 100 нм.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение работ по теме: «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике».

1. Sacher E., Kovalchuk S.P., J.-J. Pireaux (ed.), Metallization of polymers. 2001, p. 533.
2. Muhina L.L., Razumovskaja I.V., Kudaikulova Saule K., Zhubanov B.A., Marc J.M. Abadie // Eurasian Chemico-Technological Journal. – 2004. – Vol. 6, N.1 – P. 37-40.
3. Баженов С.Л., Разумовская И.В., Ковалец Н.П., Бедин С.А. // Доклады академии наук. – 2019. – Т. 488, № 1. – С. 44–46.
4. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М., Теория упругости. М.: Наука, 2001, с. 264.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.137

НАНОИНДЕНТИРОВАНИЕ СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ AIIIBVI

Борисенко Е.Б.[1], Борисенко Д.Н.[1], Бдикин И.К.[2], Колесников Н.Н.[1], Тимонина А.В.[1]

[1]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, borisenk@issp.ac.ru*
[2]*Mechanical Engineering Department and Aveiro Institute of Nanotechnology (AIN), University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal, bdikin@ua.pt*

Кристаллы халькогенидов галлия широко применяются в лазерной оптике, в нелинейной оптике для преобразования частот в ИК и ТГц диапазонах. Механические свойства их мало изучены, поскольку кристаллы, имеющие ван-дер-Ваальсовы силы по оси *c* и ковалентные в плоскости базиса, скалываются, отслаиваются и изгибаются, ограничивая возможности измерений стандартных характеристик прочности и пластичности. Разработанный метод измерения микротвердости кристаллов AIIIBVI [1] также имеет ограничения, поскольку при нагрузках на индентор 0.3Н и выше происходит резкое разупрочнение, а затем образование трещин вокруг отпечатка. В этой связи, было предложено протестировать возможности наноиндентирования в применении к слоистым кристаллам. GaS. Измерения были проведены на наноинденторе TTX-NHT, CSM Instruments с пирамидой Берковича [2]. Основной измеряемой величиной была контактная глубина h_c, по которой рассчитывали контактную площадь A_c и твердость наноиндентирования H_{IT}.

$$A_c = (h_c \cdot tg\vartheta)^2 \cdot \pi \quad (1) \qquad H_{IT} = F_{\max} / A_c \quad (2),$$

где ϑ - угол при вершине пирамиды, F_{max}- максимальная нагрузка в каждом тесте.

Из Рис.1 видно, что зависимости h_c и H_{IT} от максимальной нагрузки немонотонные, а при F_{max} выше 110 мН, нанотвердость только уменьшается. Вероятное объяснение хода кривых состоит в том, что в области упруго-пластической деформации слоистого кристалла, показанного на Рис. 2, происходит упрочнение при уплотнении материала под индентором в пределах одного слоя, и разупрочнение при проникновении в следующий недеформированный слой. При больших нагрузках преобладает пластическое течение, что приводит к разупрочнению материала.

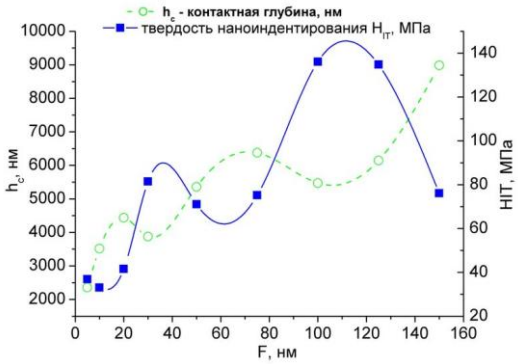


Рис. 1. Зависимость h_c и H_{IT} от F_{max},

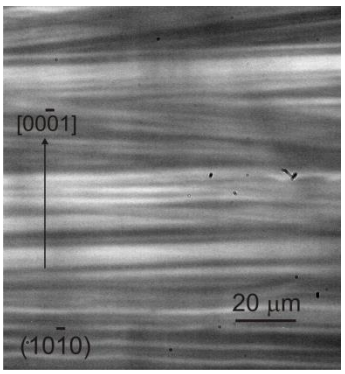


Рис. 2. Поперечный срез кристалла GaS

Borisenko E.B., Kolesnikov N.N., Borisenko D.N., Bozhko S.I. // J. Cryst. Growth- 2011 - V. 316. – P. 20–24.
Borisenko E., Borisenko D., Bdikin I., Timonina A., Singh B., Kolesnikov N. // Mater. Sci. Engineer. A. - 2019. - V. 757. P. - 101−106.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.138

ARPES FROM SEMICONDUCTOTING MATERIALS: ACCOUNT FOR A BAND-BENDING

ValeyevV.G.

National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia. Valeev_VG@nrcki.ru

Quantitative analysis of the ARPES data from semiconducting materials requires accounting for a near-surface band-bending, with the potential variation described by self-consistent Poisson-Schrödinger equations. Here we formulate an approach to simulate the ARPES spectra from this region.

To this end we employ the Keldysh field theory based non-linear sigma model for a disordered electron system [1, 2], take advantage of the slowness of the spatial behavior of the screened external electric field near the sample surface to perform the Wigner transformation for the disorder-averaged Keldysh Green function in the Bloch representation and follow [3, 4] in the final electron state model. In particular, for the bulk photoemission current from the conduction band as a function of the transverse photoelectron momentum $\vec{k}_{\parallel}=\vec{e}_x k_x+\vec{e}_y k_y$ and kinetic energy E in the vacuum we finally get:

$$j(\vec{k}_{\parallel},E)=\frac{4em}{\hbar}|M|^2\,\theta(E-\varepsilon_{\parallel})\,A_0^2\int_0^{\infty}dz\exp\left[-(\mathrm{Im}(k_s)+\lambda_{ph})z\right]\frac{k_v}{\left(k_v+\mathrm{Re}(k_s)\right)^2+\left(\mathrm{Im}(k_s)\right)^2}$$
$$\times\frac{\hbar/2\tau_e}{\left(E-\hbar\omega-\varepsilon_{\parallel}-\hbar^2\,\mathrm{Re}(k_s)^2/2m-E_c(z)\right)^2+(\hbar/2\tau_e)^2}\,f_o\left(\frac{E-\hbar\omega-\mu}{kT}\right),$$

where a semi-infinite sample is assumed to extend in the region $z>0$, $\varepsilon_{\parallel}=\hbar^2k_{\parallel}^2/2m$, τ_e - electron elastic scattering time in the initial state, $E_c(z)-$ debth-dependent conduction band minimum, $f_0(x)$ is the Fermi function, $M=\frac{e\hbar}{m}\int\frac{d\vec{r}}{\Omega_{cell}}u^*_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r})\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\nabla}u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r})$ - the dipole matrix element with $u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r})$ being the Bloch amplitude in the conduction band, $\vec{A}(\vec{r},t)=A_0\vec{\varepsilon}\exp\left[i\omega\,t-i\vec{k}_{ph}\vec{r}-\frac{\lambda_{ph}}{2}z\right]$ - the electromagnetic vector-potential with amplitude A_0, frequency ω, polarization $\vec{\varepsilon}$ and penetration depth $1/\lambda_{ph}$, $k_v=\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\varepsilon_{\parallel}\right)\right]^{1/2}\left(k_s=\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\hbar\omega-\varepsilon_{\parallel}-i\hbar/2\tau_s\right)\right]^{1/2}\right)$ - z-component of the final state momentum in the vacuum (in the sample) and $1/\tau_s$ is the final state electron scattering rate in the sample. The above result is further utilized to interpret the ARPES spectrum from GaN, heavily doped with Si.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research under Grants No. 19-07-01090 and 20-07-00813.

3. Keldysh L. V. // Sov. Phys. JETP. – 1965. – V. 20. P. – 1018-1026.
4. Kamenev A., Andreev A. // Phys. Rev. – 1999. – V. B 60. P. – 2218-2238.
5. Caroli C., Lederer-Rozenblatt D., Roulet B., Saint-James D. // Phys. Rev. – 1973. – V. B 8. P. – 4552-4569.
6. Feidt M., Mathias S., Aeschlimann M. // Phys. Rev. Mat. – 2019. – V. 3. P. – 123801-123812.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.139

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОФАЗНЫХ КОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ТЕРМООБРАБОТКОЙ И КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ АМОРФНЫХ ЛЕНТ СПЛАВА $Al_{86}Ni_9Gd_5$

Васильев С.В.[1,2], Ткаченко В.М.[1], Аронин А.С.[3], Свиридова Е.А.[1,2], Цветков Т.В.[1], Бурховецкий В.В.[1], Лимановский А.И.[1], Ткач В.И.[1]

[1]ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, Украина

[2]ГО ВПО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры», Макеевка, Украина

[3)] Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, 142432, Московская обл., Россия

E-mail: vasils75@gmail.com

Одним из перспективных направлений разработки высокопрочных конструкционных сплавов с малым удельным весом является консолидация быстроохлажденных сплавов на основе алюминия с аморфной структурой с использованием методов интенсивной пластической деформации [1]. Однако существенным недостатком материалов с нанокомпозитной структурой, консолидированных при повышенных температурах из аморфных лент и порошков, является низкая пластичность. По этой причине представлялось интересным изучить структуру и механические свойства образцов, полученных консолидацией аморфных лент при комнатной температуре, что и явилось целью настоящей работы.

Объектами исследований, проведенных методами рентгенографии, сканирующей электронной микроскопии, испытаний на трехточечный изгиб и измерений микротвердости были образцы быстроохлажденной ленты сплава $Al_{86}Ni_9Gd_5$ в исходном (аморфном) и термообработанном (нанокомпозитном) состояниях, а также диски диаметром 5 мм, полученные консолидацией двух слоев аморфной ленты методом неограниченного кручения под высоким давлением (КВД) [2] (2 оборота под давлением 2 и 4 ГПа).

Установлено, что образец аморфной ленты, подвергнутый нагреву со скоростью 10 K/min до 473 K, и консолидированные диски имеют частично кристаллические структуры, состоящие из нанокристаллов Al с размерами 24 и 9–10 нм и объемными долями 0,17 и 0,23–0,26 соответственно. Образцы с нанокомпозитными структурами имеют существенно более высокую твердость (консолидированные диски – 4,1 и 4,6 ГПа и термообработанная лента – 3,7 ГПа) по сравнению с исходной аморфной лентой (2,7 ГПа). Установлено, что термически индуцированная нанокристаллизация приводит к существенному охрупчиванию (снижению пластической деформации при изгибе от 2,0 до 0,4%), в то время как пластичность консолидированных дисков была значительно выше (1,9 и 2,3% соответственно). Сделано предположение, что повышенная пластичность нанокомпозитных структур, сформированных в процессе КВД, обусловлена повышенной концентрацией избыточного свободного объема в аморфной матрице, сформированного в процессе деформационно индуцированного течения материала. Одновременное увеличение прочностных характеристик и пластичности консолидированных дисков открывают новые возможности для разработки объемных наноструктурных материалов с повышенным уровнем механических характеристик.

1. Shpak A.P., Varyukhin V.N. et al // Mater. Sci. Eng. A. – 2006. – 425 – pp. 172–177.
2. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. // Progr. Mater. Sci. – 2008. – 53. – pp. 893–979.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.140

СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Co-Fe-B В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЛЕГИРУЮЩЕГО КОМПОНЕНТА И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ.

Волков Н.А., Чиркова В.В., Абросимова Г.Е.
Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия
volkov@issp.ac.ru

В современном мире постоянно растет потребность в новых материалах, обладающих хорошими функциональными свойствами. Одними из таких материалов являются частично-кристаллические сплавы на основе железа и кобальта. Благодаря своим высоким магнитным характеристикам они хорошо зарекомендовали себя в областях радио- и микроэлектроники [1-3]. Данная группа сплавов получается путем термообработки или механической обработки аморфных лент, для образования структуры хаотично расположенных кристаллов в аморфной матрице. К сожалению, образовать такую частично-кристаллическую структуру получается не во всех сплавах, для формирования необходимой структуры в состав сплавов добавляют легирующие компоненты с низким коэффициентом диффузии, что в свою очередь может повлиять как на образующуюся при кристаллизации структуру, так и на магнитные свойства сплавов. Поэтому целью данной работы является исследование влияния легирующего компонента на образующуюся структуру и магнитные свойства на начальных стадиях кристаллизации.

Для проведения исследований были выбраны сплавы, отличающиеся лишь легирующим компонентом $Co_{56}Fe_{16}Nb_8B_{20}$ и $Co_{56}Fe_{16}Ti_8B_{20}$. Кристаллизация исходных аморфных сплавов проводилась с помощью изотермического отжига и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). После каждой термообработки проводились исследования структуры и магнитных свойств. Проведенные рентгеноструктурные исследования образцов после ДСК и отжига показывают, что структура сплава $Co_{56}Fe_{16}Nb_8B_{20}$ состоит из нанокристаллов с ОЦК структурой, нанокристаллов кубического кобальта и аморфной фазы. Сплав $Co_{56}Fe_{16}Ti_8B_{20}$ состоит из тех же фаз что и предыдущий сплав, но также в нем происходит выделение нанокристаллов фазы $Co_{23}B_6$. Магнитные свойства сплавов меняются в зависимости от легирующего компонента и образующейся структуры. Было установлено, что сплав $Co_{56}Fe_{16}Ti_8B_{20}$ по отношению к сплаву $Co_{56}Fe_{16}Nb_8B_{20}$ обладает более высокой намагниченностью насыщения и более высокой коэрцитивной силой.

В результате исследований было показано, что при термообработке аморфных сплавов с разным легирующим компонентом происходит изменение фазового состава на начальных стадиях кристаллизации. В зависимости от образующейся структуры также меняются магнитные свойства сплавов.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН при частичной поддержке РФФИ (проект 19-02-00406)

1. R. Xiang, Sh. Zhou, B. Dong, G. Zhang, Z. Li, Y. Wang, Ch. Chang, Effect of Co addition on crystallization and magnetic properties of FeSiBPC alloys, Progr. In Natural Sci. Mater. Intern. 24 (2014) 649.

2. R. Nowosielski, A. Zajdel, S. Lesz, B. Kostrubiec, Z. Stokłosa, Crystallization of amorphous $Co_{77}Si_{11.5}B_{11.5}$ alloy, Archives of Mater. Sci. Eng. 28 (2007) 141-148.

3. C.F. Conde, J.S. Blazquez, A. Conde, Nanocrystallization process of the HITREM Fe-Co-Nb-B alloys, in: B. Idzikowski (Ed.), Properties and Application of Nanocrystalline Alloys from amorphous Precursor, Kluwer Academic Publ., The Netherlands, 2005, pp.111-121

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.141

НАНОПРОВОЛОКИ ИЗ СЛОЕВ CO/CU И ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ СЛОЯ CO НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Гилимьянова А.Р.[1,2], Долуденко И.М.[2], Загорский Д.Л.[2], Менушенков В.П.[1],

[1] НИТУ «МИСиС», институт новых материалов и нанотехнологий, кафедра физического материаловедения, Москва, Россия
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
E-mail: gilimyanova2010@yandex.ru

В настоящее время большое внимание привлекают нанообъекты различных типов, которые находят широкие сферы применения. Один из типов материалов здесь – это нанопроволоки (НП), которые могут быть получены путем матричного синтеза. Интерес к НП связан , в частности, с их магнитными свойствами. Эти свойства зависят как от материала (элементного состава), так и от способа их изготовления

В данной работе были получены массивы НП диаметром 100 нм, состоящие из слоев Co/Cu. Толщина слоев Co в первых трех образцах массивов НП варьировалась (25, 50, 300 нм) при постоянной толщине Cu (300 нм). Четвертый образец отличался тем, что слой Co был толще слоя Cu: слои Co/Cu составили 400/50 нм соответственно. Были изучены особенности электроосаждения таких структур в гальванической ячейке. Для дальнейших исследований (например, электронномикроскопических) массив металлических НП либо извлекался из матрицы (путём стравливания последней), либо оставался в ней , образуя своеобразный «металл-полимерный композит» (для магнитных и рентгеновских исследований).

Электронномикроскопические исследования массивов полученных НП позволили подтвердить рассчитанные толщины слоёв и элементный состав. Фазовый состав был определён рентгеновским методом (дифрактометрия). Измерения магнитных характеристик (на вибромагнетометре) позволили оценить основные параметры получаемы массивов НП-коэрцитивную силу и остаточную намагниченность. Так, показано, что при изменении толщин магнитожестокого материала в НП, меняется коэрцитивная сила в зависимости от направления внешнего магнитного поля (вдоль оси роста НП и поперек). На основании полученных результатов можно говорить о возможности создания таких металлополимерных нанокомпозитов, которые будут иметь контролируемую анизотропию магнитных свойств.

Благодарности. Авторы благодарны проф. П.Ю Апелю (ОИЯИ,г,Дубна) за предоставление образцов трековых мембран. Часть работы (синтез НП, СЭМ и рентгеновские исследования выполнены в рамках Госзадания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Магнитометрия проведена на базе НИТУ МИСиС.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.142

ДАТЧИК МАГНИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ УДАРНО-СЖИМАЕМОГО ЖЕЛЕЗА

Голышев А.А., Емельянов А.Н., Козлов А.А., Молодец А.М.

Институт проблем химической физики РАН,
г. Черноголовка, Россия, golyshev@icp.ac.ru

Как хорошо известно, в области давлений $P_{\alpha\varepsilon}$~12 ГПа и температур 300-700 К железо и многие стали испытывают обратимый полиморфный переход из α–фазы с объёмно-центрированной кубической решёткой (оцк) в ε–фазу с гексагональной плотноупакованной (гпу) решёткой (см. Рис.1). Этот переход происходит как при статических давлениях, так и при ударно-волновом сжатии.

Особенностью перехода $\alpha\leftrightarrow\varepsilon$ в железе и сталях является то обстоятельство, что α–фаза является магнитной, а ε–фаза оказывается немагнитной. Поэтому в условиях микросекундных ударно-волновых воздействий размагничивание железного образца при прямом и намагничивание при обратном переходах обуславливает возникновение сильных электромагнитных импульсов [1]. Эти импульсы обычно рассматриваются как помехи. Вместе с тем очевидно, что электромагнитный сигнал, обязательно сопутствующий полиморфному оцк↔гпу переходу в железе и многих магнитных сталях, может быть использован в методическом отношении для регистрации изменения магнитных свойств ударно-сжимаемого железа, сталей *in situ* и оценки кинетических характеристик этого процесса. В данном докладе обсуждается методика регистрации магнитного превращения железа, обусловленного полиморфным $\alpha\leftrightarrow\varepsilon$ превращением при ударно-волновом нагружении. Ниже приведена иллюстрация работы датчика применительно к прямому и обратному $\alpha\leftrightarrow\varepsilon$ превращению при ударно-волновом нагружении железа как тестового материала.

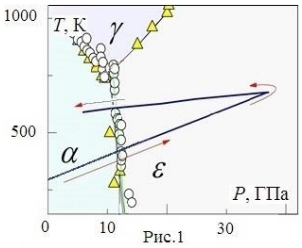


Рис.1

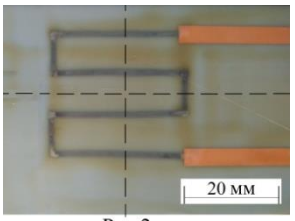


Рис.2

На Рис.2 показан датчик магнитного превращения, чувствительный элемент которого изготовлен из железа, Датчик расположен в изолирующей среде параллельно фронту ударной волны и имеет толщину δ=0.06 мм. Оценка постоянной времени τ~δ/C при скорости звука в железе C≈6 мм/μс составляет τ~0.01 μс. На Рис.3а показан сигнал датчика магнитного превращения в железе Армко. Здесь отрицательные пики U соответствуют прямому, а положительные - обратному магнитному превращению при ступенчатом ударно волновом сжатии датчика. На Рис.3б представлена расчётная зависимость давления P от времени t при ступенчатом ударно волновом сжатии датчика. Этот расчёт вместе с литературными данными по давлениям прямого и обратного $\alpha\leftrightarrow\varepsilon$ перехода в железе позволяет сопоставить пики сигнала датчика с давлениями переходов $\alpha\leftrightarrow\varepsilon$. Так отрицательные пики соответствуют прямому $\alpha\rightarrow\varepsilon$ переходу при P_1≈12 ГПа и 12<$P_{\alpha\varepsilon}$<20 ГПа, а положительный фиксируется при давлении в области обратного $\varepsilon\rightarrow\alpha$ при $P_{\varepsilon\alpha}$≈12 ГПа. Подробный анализ работы датчика представлен в [2].

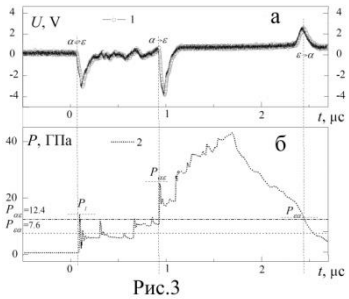


Рис.3

Работа выполнена по теме Государственного задания № АААА-А19-119071190040-5 с использованием УНУ «Экспериментальный взрывной стенд»

Killer R.N., Mithcell A.C. // Sol.St.Com. –1969. №7. С.–271-274.
Молодец А.М., Голышев А.А., Емельянов А.Н., Козлов А.А. // ЖТФ. –2021. Т. 91.– вып. 5.– С. 803-807.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.143

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ Ti-Fe, ВЫЗВАННЫЕ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Горнакова А.С.[1], **Страумал Б.Б.**[1,2]
[1]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
[2]*Черноголовский научный центр РАН, г. Черноголовка, Россия*
alenahas@issp.ac.ru

В серии работ [1-5] были исследованы сплавы титана с 0.5 до 10 масс.% железа, после предварительной термообработки и воздействия кручения под высоким давлением (КВД - 7 ГПа, 5 оборотов и 1 об/мин). В исходном состоянии сплавы содержали сочетание α/α' и β-фаз. КВД привело к превращению исходных фаз в смесь α и ω-фаз. Фазовые превращения α→ω и β→ω являются мартенситными, поэтому между фазами α и ω, а также между фазами β и ω, существуют определённые ориентационные соотношения. Структура и свойства α и ω-фаз после КВД не зависят от структуры и свойств исходных α' и β до КВД.

Результаты исследований показали влияние легирования титана железом на образование ω-фазы при КВД. При сдвиговой деформации под одноосным давлением ярко выраженная ориентационная зависимость между соседними зернами α и ω-фаз сопровождается сильной локальной преимущественной ориентацией, которая интерпретируется как ″основная″ кристаллографическая текстура в α-фазе. Она представляется благоприятной для реализации преобразования α/ω в условиях КВД. Количество образовавшейся ω-фазы после КВД зависит от концентрации железа. В сплавах, содержащих β-фазу, добавление железа к титану изменяет соответствие решеток между β и ω-фазами, а их наилучшее соответствие облегчает фазовое превращение β/ω, по сравнению с чистым титаном.

Также в одной из наших работ была исследована термостабильность ω-фазы и других микроструктурных особенностей, возникающих при КВД в титановых сплавах, содержащих 1–7 масс.% железа. При низком содержании железа до 2 масс.% сильно деформированные образцы содержали смесь α′ и ω-фаз. Более высокое количество железа, как в образце с 7 масс. % Fe, стабилизируют β-фазу в качестве вторичной фазы к ω. Проведенные *in-situ* высокотемпературные рентгеновские дифракционные измерения показали, что путь трансформации при нагревании идет следующим образом: ω→α′→α+β→β.

Таким образом были подробно исследованы фазовые превращения ω-фазы в титановых сплавах с β стабилизатором железа до 10 масс.%.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН при частичном финансировании РФФИ (грант 19-58-06002).

1. B. Straumal, A. Kilmametov, A. Gornakova, A. Mazilkin, B. Baretzky, A. Korneva, P. Zięba. Archives of Metallurgy and Materials 64 (2019) 457–465.
2. Kriegel M.J., A. Kilmametov, V. Klemm, C. Schimpf, B.B. Straumal, A.S. Gornakova, Y. Ivanisenko, O. Fabrichnaya, H. Hahn, D. Rafaja. Advanced Engineering Materials. (2018)1800158 (1-9).
3. Kilmametov A.R., Ivanisenko Y., Mazilkin A.A., Straumal B.B., Hahn H., Gornakova A.S., Fabrichnaya O.B., Kriegel M.J., Rafaja D. Acta Materialia, 144 (2018) 337-351.
4. Kriegel M.J., A. Kilmametov, M. Rudolph, B.B. Straumal, A.S. Gornakova, Y. Ivanisenko, O. Fabrichnaya, H. Hahn, D. Rafaja. Advanced Engineering Materials. (2018) 1700933.
5. Kilmametov A., Yu. Ivanisenko, B.B. Straumal, A.A. Mazilkin, A.S. Gornakova, M.J. Kriegel, O.B. Fabrichnaya, D. Rafaja, H. Hahn. Scripta Mater. 136 (2017) 46–49.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.144

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА Ti–2.2 ВЕС.% Fe ПОСЛЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКИ И КВД

Горнакова А.С.[1], Афоникова Н.С.[1], Тюрин А.И.[2], Прокофьев С.И.[1], Страумал Б.Б.[1]

[1]*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*

[2]*НИИ «Нанотехнологии и наноматериалы» ТГУ им. Г.Р. Державина, Тамбов, Россия*

alenahas@issp.ac.ru

Обработка многофазных титановых сплавов с помощью кручения под высоким давлением (КВД) в сочетании с термообработкой, влияя на их фазовый состав, на дисперсность и морфологию микроструктуры, позволяет получать широкий спектр механических свойств [1,2]. В данной работе было исследовано влияние термообработки перед КВД на твердость и модуль Юнга сплава Ti–2.2вес.% Fe.

Сплав Ti–2.2вес.% Fe был выплавлен в индукционной печи в атмосфере чистого аргона из титана марки ТИ-1 (иодидный титан 99.98 %) и железа (99.97 %). Образцы сплава (∅10 мм, толщина 0.7 мм) были отожжены в двухфазной области (αTi)+TiFe при 470°C (673 часов), в двухфазной области (αTi)+(βTi) при 615°C (270 часов) и в однофазной области (βTi) при 950°C (270 часов) и закалены в воде. Затем образцы были подвергнуты КВД-обработке при комнатной температуре (7 ГПа, 5 оборотов, скорость вращения 1 об/мин). После КВД толщина образцов составила 0.35 мм.

Наноиндентирование проводили при комнатной температуре на приборе TI-950 Triboindenter при нагрузке 200 mN с использованием индентора Берковича [3]. Из этих измерений на основе характерных $P(h)$ диаграмм по методике Оливера-Фарра [4] были определены величины твердости H и модуля Юнга E.

Показано, что величины H и E образцов после КВД зависят от предварительной термообработки и от радиальной зависимости фазового состава после КВД. Предварительная термообработка сплава в двухфазной области (αTi)+(βTi) при 615°C дает максимальные значения твердости (5,8 ГПа) и модуля Юнга (152,7 ГПа) на середине радиуса образца.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН при частичном финансировании РФФИ (грант 19-58-06002).

1. Y. Chong, G. Deng, A. Shibata, and N. Tsuji. Adv. Eng. Mater. 21 (2019) 1900607.
2. Straumal B.B., Korneva A., Kilmametov A.R., Litynska-Dobrzynska L., Gornakova A.S., Chulist R., Karpov M.I., Zieba P. Materials. 12 426 (2019) 3.
3. Golovin Yu.I., Tyurin A.I., Aslanyan E.G., Pirozhkova T.S., Vorobev M.O. Measurement Techniques. 2016. V. 59. № 9. P. 911-915.
4. Oliver W.C., Pharr G.M. // J. Mater. Res. 19 (2004) 1: 3.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.145

АНАЛИЗ КИНЕТИКИ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФФУЗИИ АТОМОВ МЕДИ В СЛОЯХ ВОЛЬФРАМА В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ СИСТЕМЫ МЕДЬ-ВОЛЬФРАМ

Дружинин А.В.[1,2], Страумал Б.Б.[1,3,4], Йоргенс Л.П.Х.[2], Канчеллэри К.[2]

[1]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Россия,* druzhininsas@mail.ru
[2]*EMPA Swiss federal laboratories for material science, г. Дюбендорф, Швейцария*
[3]*Институт физики твердого тела (ИФТТ РАН)* и *Научный центр Российской академии наук в Черноголовке (НЦЧ РАН), г. Черноголовка, Россия*
[4]*Karlsruhe Institute of Technology (KIT), г. Эггенштайн-Леопольдсхафен, Германия*

Термическая эволюция микроструктуры многослойных структур преимущественно определяется диффузией атомов вдоль внутренних границ раздела, таких как границы зерен и межфазные границы раздела [1]. Знание величин коэффициентов диффузии необходимо для оценки кинетики процессов деградации, происходящих в многослойных структурах во время термического отжига, например, процесса превращения многослойной структуры в нанокомпозит.

В данной работе была экспериментально получена температурная зависимость коэффициента зернограничной диффузии атомов меди в вольфраме. В качестве объектов исследования выступали многослойные структуры, состоящие из чередующихся слоев меди и вольфрама. Анализ кинетики диффузионного процесса проводился с помощью метода оже-электронной спектроскопии, где в течение термического отжига (T = 400, 500, 600°C; режим кинетики типа C) *in situ* регистрировалось изменение интенсивности сигнала оже-переходов LMM меди на поверхности последнего слоя вольфрама (диффузионный барьер), из которой в дальнейшем определялись величины поверхностной концентрации атомов меди. С помощью метода рентгеновской дифракции было обнаружено, что в слоях вольфрама действуют высокие сжимающие механические напряжения (до -3 ГПа), величина которых линейно изменяется с ростом длительности отжига. Для аппроксимации экспериментальных значений поверхностной концентрации атомов меди использовалась диффузионная модель, основанная на модели Островского и Бокштейна [2], которая включала в себя линейную зависимость средней величины механических напряжений в слое диффузионного барьера от длительности отжига. Полученная температурная зависимость коэффициента зернограничной диффузии имеет вид: $D(T) = (3{,}18 \pm 0{,}63) \times 10^{-15} \exp(-(0{,}29 \pm 0{,}02)\ \text{эВ}/kT)$ см^2/сек. Основные экспериментальные результаты изложены в работе [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90125

Josell D., Spaepen F. // MRS Bulletin. – 1999. – № 24. С. – 39-43.
A.S. Ostrovsky, B.S. Bokstein. // Appl. Surf. Sci. – 2001. – № 175-176. С. – 312-318.
Druzhinin A. V., Rheingans B., Siol S., Straumal B.B., Janczak-Rusch J., Jeurgens L.P.H., Cancellieri C. // Applied Surface Science. – 2020, – № 508. С. – 145254.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.146

ЭВОЛЮЦИЯ РЕШЕТОЧНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА И КОНЦЕНТРАЦИИ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ ПРИ НАЛОЖЕНИИ ИНТЕНСИВНОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИ

Заворотнев Ю.Д., Метлов Л.С.
Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина
zavorotnev.yurii@mail.ru

В работе [1] исследовалось поведение в таких условиях бинарных сплавов замещения *Cu-Ag* и *Cu-Sn*. Наложение ИДКР осуществлялось таким образом, что не допускалось разрушение образца. Было обнаружено, что изменения решеточного параметра порядка *q* (ПП) и процентное содержание *Ag (Sn)* при наложении ИДКР зависит от температуры отжига $T_{отж}$. При теоретическом рассмотрении эффекта использовалась модель виртуального кристалла. В неравновесном термодинамическом потенциале учитывались взаимодействие ПП с искажениями решетки и неоднородность ПП. При отсутствии ИДКР ($M = 0$) график зависимости $q(T_{отж})$ для $Cu_{1-x}Sn_x$ приведен на рисунке 1 сплошной линией и качественно совпадает с экспериментальными данными в [1]. При наложении ИДКР $M \neq 0$ кривая $q(T_{отж})$ смещается, причем знак отклонения зависит от знака коэффициента γ_2 при инвариантах Лифшица. График зависимости $q(T_{отж})$ при $M \neq 0$ приведен на рис.1 пунктирной линией. Из экспериментальных данных следует, что имеет место некоторая критическая температурная точка T_{kp}, в которой оба графики пересекаются. Это возможно если коэффициент γ_2 зависит от температуры отжига и в данной точке обращается в бесконечность, а также меняет знак при переходе через критическую точку. От знака γ_2 зависит и знак вектора распространения спиральной структуры. При прохождении критической температурной точки вектор распространения меняет знак и пространственное вращение спирали будет обратным. На рис.2 сплошной линией приведен результат численного расчета $x(T_{отж})$ в отсутствии кручения. Пунктирной линией на рис.2 приведен результат численного расчета зависимости $x(T_{отж})$ при наложении ИДКР.. Видно, что она не является прямой линией, как указано в работе [1]. Такое расхождение может быть связано либо с неверным приближением, примененным в настоящей работе, либо с недостаточной точностью экспериментальных данных.

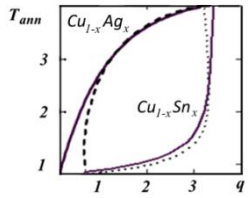


Рис.1. Зависимости параметра порядка от температуры отжига. Все величины в относительных единицах.

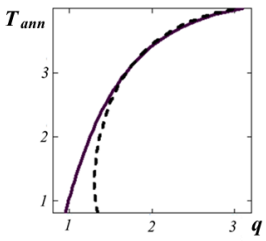


Рис.2. Зависимости концентрации от температуры отжига. Все величины в относительных единицах.

Аналогичное рассмотрение проведено и для сплава $Cu_{1-x}Ag_x$. Результат расчета зависимости ПП от температуры отжига приведен на рис. 1. Необходимо отметить, что зависимости концентрации примесей в обоих соединений качественно одинаковы. Поэтому соответствующие графики для $Cu_{1-x}Ag_x$ не приведены. Различие в поведении ПП обусловлено неодинаковой температурной зависимостью плотности искажений в данных сплавах.

1. B.B. Straumal, A.R. Kilmametov, B. Baretzky, O.A. Kogtenkova, P.B. Straumal, L. Litynska-Dobrzynska, R. Chulist, A. Korneva, P. Zieba. Acta Materialia, 195 (2020) 184-198.

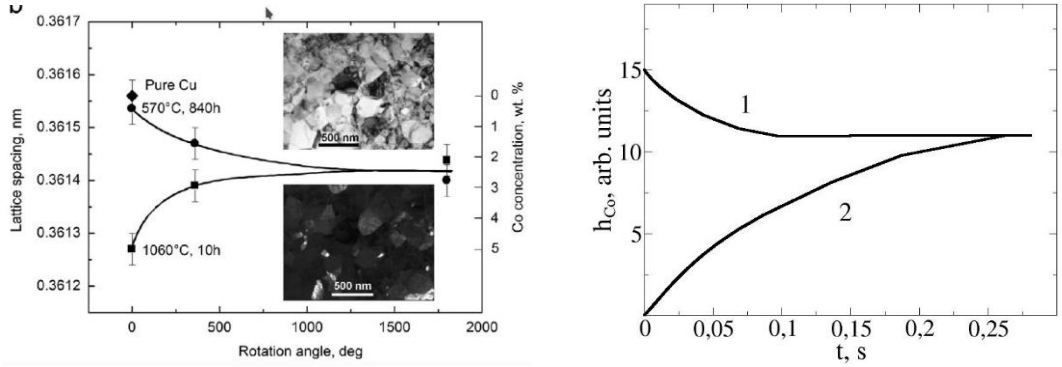
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.376

НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭВОЛЮЦИОННАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ДИФФУЗИОННЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ, ПОДВЕРЖЕННЫХ МЕГАПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Метлов Л.С.

ГУ "Донецкий физико-технический институт", Донецк, Украина, lsmet@donfti.ru
Донецкий национальный университет, Донецк, Украина,

Теория неравновесной эволюционной термодинамики (НЭТ) была предложена для описания эволюции структурных дефектов при обработке материалов методам мегапластической деформации (МПД) [1]. В рамках этой версии полагалось, что при МПД фазовое состояние материала не меняется. В то же время, в последнее время предпринимаются многочисленные попытки определить влияние обработки МПД на материалы, предрасположенные к протеканию, как бездиффузионных, так и диффузионных фазовых переходов. Так в работах Б.Б. Страумала исследовались диффузионные фазовые превращения в двухкомпонентных сплавах типа Cu-Co и др., и установлено существование стационарного состояния, к которому стремится сплав в процессе длительной обработки его кручением под давлением рис. 1,а [2].



а б

Рис. 1. Эволюция концентрации растворенного элемента в процессе обработке его МПД а) экспериментальные кривые для концентрации Cu-Co (шкала справа) [2], б) теоретические кривые, полученные в рамках модифицированной НЭТ: 1 – начальная плотность растворенного компонента h_{Co} выше, 2) ниже стационарного значения.

В работе [3] развита общая теорию НЭТ для многокомпонентных сплавов с учетом протекания диффузионных и бездиффузионных фазовых переходов в процессе обработки их МПД. Рассчитанные в ее рамках теоретические кривые (рис 1,б) неплохо описывают экспериментальные данные (рис. 1,а).

1. L.S. Metlov, Phys. Rev. Lett. **106**, 165506 (2011)
2. B.B. Straumal, Materials Letters **118**, 111 (2014)
3. Л.С. Метлов, 11-я международная научная конференция "Химическая термодинамика и кинетика" (принятый доклад)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.147

СТРУКТУРА СУЛЬФИДА КАДМИЯ В ПЛЕНКАХ РАЗНОЙ ТОЛЩИНЫ

Иванова О.П.[a], Кривандин А.В.[a], Криничная Е.П.[a], Завьялов С.А.[b], Журавлева Т.С.[a]

[a] *Институт биохимической физики им.Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия*
olga@deom.chph.ras.ru; zhur@deom.chph.ras.ru
[b]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Одной из задач современного материаловедения является создание новых материалов с заданными свойствами. Перспективными материалами являются пленочные полимерные нанокомпозиты с полупроводниковыми включениями. В качестве наночастиц широко используется сульфид кадмия (CdS), обладающий высокой фоточувствительностью в видимом диапазоне. Известно, что переход CdS в наносостояние приводит к изменениям его свойств (оптических, электрических и др.), что вызвано не только размерными эффектами, но и структурными изменениями.

Методом рентгеновской дифракции в больших углах проведено исследование пленок CdS, имеющих толщину ≈ 0.2, ≈ 1 и ≈1.5 мкм. Пленки CdS толщиной ≈ 0.2 мкм синтезированы методом осаждения из газовой фазы на подложках из оптического кварца, толщиной ≈ 1 и ≈ 1.5 мкм – на кремниевых подложках, охлаждаемых до температуры жидкого азота. Полученные дифрактограммы пленок разной толщины значительно отличаются друг от друга, что указывает на образование в них разных структур CdS.

На дифрактограмме пленки CdS толщиной ≈ 0.2 мкм наблюдаются узкие, хорошо разрешенные пики, положение которых свидетельствует о том, что эта пленка имеет кристаллическую структуру типа вюрцита. Средний размер областей когерентного рассеяния (ОКР) в этой пленке, рассчитанный по ширине дифракционного пика (002) при угле 2θ ≈ 26.45°, равен ~60 нм. Интенсивность дифракционного пика (002) намного выше интенсивности других пиков, что, по-видимому, вызвано ориентацией ОКР в пленке, при которой кристаллографические плоскости (001) преимущественно параллельны плоскости подложки.

Дифрактограмма, свидетельствующая о менее упорядоченной структуре CdS, с тремя широкими пиками при 2θ ≈ 26.5°, 2θ ≈ 43.5° и 2θ □ ≈ 51.6° получена для пленки CdS толщиной ≈ 1.5 мкм. Такие дифрактограммы характерны для дефектной кристаллической структуры CdS в наносостоянии с нарушениями периодичности в укладке атомных слоев (структура со случайной плотнейшей упаковкой атомов – СПУ-структура) [1]. Оценка среднего размера ОКР CdS по ширине дифракционного пика при 2θ ≈ 26.5° □ (после отделения прилегающих к нему двух других более слабых пиков) дала значение ~9 нм.

Для пленки CdS толщиной ≈ 1 мкм на дифрактограмме зарегистрированы два широких пика при 2θ ≈ 27.83° и 47.69°. Такие пики наблюдались раньше в работе [2 Herron, Wang??] для частиц CdS размером не более 2.5 нм. По-видимому, частицы CdS в исследованной нами пленке толщиной ≈ 1 мкм имеют схожий размер и рентгеноаморфную или дефектную кристаллическую структуру (например, СПУ-структуру).

Работа выполнена в рамках государственного задания ИБХФ РАН (№ 01201253304)

Кожевникова Н.С., Ворох А.С., Урицкая А.А. // Успехи Химии. – 2015. – Т. 84. – № 3. – С. 225-250.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.148

СТРУКТУРНОЕ МНОГООБРАЗИЕ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В ПЛЕНАХ НАНОКОМПОЗИТОВ ППК-CdS

Иванова О.П.[a], Кривандин А.В.[a], Криничная Е.П.[a], Шаталова О.В.[a], Завьялов С.А.[b], Журавлева Т.С.[a]

[a] *Институт биохимической физики им.Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия*
olga@deom.chph.ras.ru; zhur@deom.chph.ras.ru
[b]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

При создании новых функциональных материалов с заданными свойствами особый интерес проявляется к плёночным полимерным нанокомпозитам с неорганическими включениями в виде полупроводниковых наночастиц. В качестве полимерной матрицы, стабилизирующей наночастицы, широко используется поли-*n*-ксилилен (ППК), а в качестве наночастиц - халькогениды кадмия (CdS, CdSe), обладающие высокой чувствительностью к воздействию света видимого диапазона. В связи с этим необходимы исследования физико-химических свойств этих нанокомпозитов, установление их связи со структурой и технологией синтеза

Методом рентгеновской дифракции проведены исследования структуры пленок нанокомпозитов поли-*n*-ксилилен – CdS (ППК–CdS), имеющих разную толщину (≈ 0.2, ≈ 0.5, ≈ 1 и ≈ 1.5 мкм) и концентрацию CdS от 5 до 90 об.%, а также однокомпонентных пленок CdS и ППК разной толщины. Пленки были синтезированы на полированных кремниевых или кварцевых подложка, охлаждаемых до температуры жидкого азота методом осаждения из газовой фазы. Результаты проведенных исследований показали, что структура наночастиц CdS в пленках ППК–CdS может изменяться в зависимости от их толщины и содержания CdS. Так, для наночастиц CdS в исследованных пленках ППК–CdS толщиной ≈ 0.2 мкм при концентрациях C ≈ 10.5 □ 13.5 %, как и в пленках CdS такой же толщины, наблюдалась кристаллическая структура типа вюрцита и средний размер ОКР был ≈ 30 нм, а при меньших концентрациях – рентгеноаморфная структура. и наночастицы CdS имели размер≈1–3 нм, что следует из сравнения с литературными данными. Такую же рентгеноаморфную структуру имели наночастицы CdS в пленках ППК–CdS толщиной ≈ 0.5 и ≈ 1 мкм при C ≈ 5 □– 90 %, в пленках ППК–CdS толщиной ≈ 1.5 мкм при C ≈ 5 –□ 80 %, а также пленка CdS, имевшая толщину ≈ 1 мкм.. Для наночастиц CdS в пленке ППК–CdS толщиной ≈ 1.5 мкм при C ≈ 90%, как и для пленки CdS толщиной ≈ 1.5 мкм, наблюдалась дефектная кристаллическая структура (СПУ-структура [1] - структура случайной плотнейшей упаковки, характеризующаяся непериодической последовательностью упаковки слоев Cd и S) со средним размером ОКР ≈ 9 нм, характерная для CdS в наносостоянии. Для матрицы ППК в исследованных нанокомпозитных пленках ППК–□CdS характерна рентгеноаморфная структура. При росте концентрации CdS в пленках ППК–□CdS наблюдались изменения соотношения интенсивностей дифракционных пиков ППК и CdS, что может быть вызвано разной степенью ориентации полимерной матрицы и наночастиц CdS в этих пленках.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИБХФ РАН (№ 01201253304)

Кожевникова Н.С., Ворох А.С., Урицкая А.А. // Успехи Химии. – 2015. – Т. 84. – № 3. – С. 225-250.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.149

ЭЛЕМЕНТЫ АДАПТИВНОЙ ОПТИКИ НА ОСНОВЕ МАТЕРИАЛОВ С ЭПФ

Иржак А.В. Коледов В.В.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия, airzhak@iptm.ru
Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук,
г. Москва, Россия, victor_koledov@mail.ru

Оптические системы на основе дифракционных решВалееток широко нашли применение в быту, технологии и научных исследованиях, являясь как инструментом, так и объектом исследований. Дифракция света широко используется для разделения спектра, монохроматизации, фильтрации излучения, голографии и т.п. Период дифракционной решетки определяет положение дифракционных максимумов:

$$d \sin(\theta_m) = m\lambda$$

Возможность управления параметром решетки d позволяет управлять спектральными характеристиками оптической системы.

Материалы с эффектом памяти формы показали хорошую обратимую деформацию, в том числе и на субмикронном уровне [1, 2]. Простые расчеты показывают, что при длине актюатора 5 мкм и деформации 0,5 % смещение незакрепленного конца достигает 0,25 мкм. Упорядоченный массив таких актюаторов будет являться дифракционной решеткой с изменяемым периодом в диапазоне Δλ = (0 – 0,5) мкм. Варианты изготовления решетки приведены на рис.1.

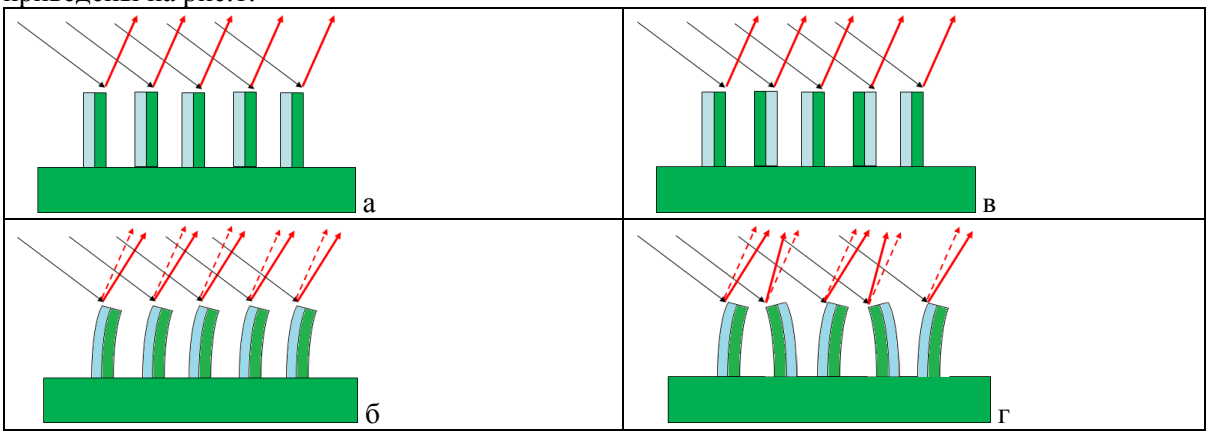


Рисунок 1 – Схема дифракционной решетки с изменяемым периодом.

Решение этой задачи возможно при использовании метода локального ионного травления (FIB). Процесс изготовления подобных актюаторов подробно описан в работах [1, 2].

Благодарности.
Работа в части создания массива наноактюаторов выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-19-01748)

Irzhak A.V., Lega P.V., Zhikharev A.M. e.a. // Doklady Akademii Nauk. – 2017. – V. 472. N 2. P. 139–144

Афонина В.С., Коледов В.В., Шавров В.Г. и др. // Журнал радиоэлектроники. – 2015. – – № 1.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.150

ВЛИЯНИЕ ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ НА ПРОЧНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛОКНА САПФИРА

Курлов В. Н., Стрюков Д. О., Кийко В. М.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка Московской обл., Россия
kiiko@issp.ac.ru

Характеристики поверхности волокон сапфира влияют на различные свойства: оптические, теплопроводности, прочности… В работе установлено влияние шероховатости поверхности волокон на прочность, и получены зависимости предельной деформации и прочности волокон от их длины.

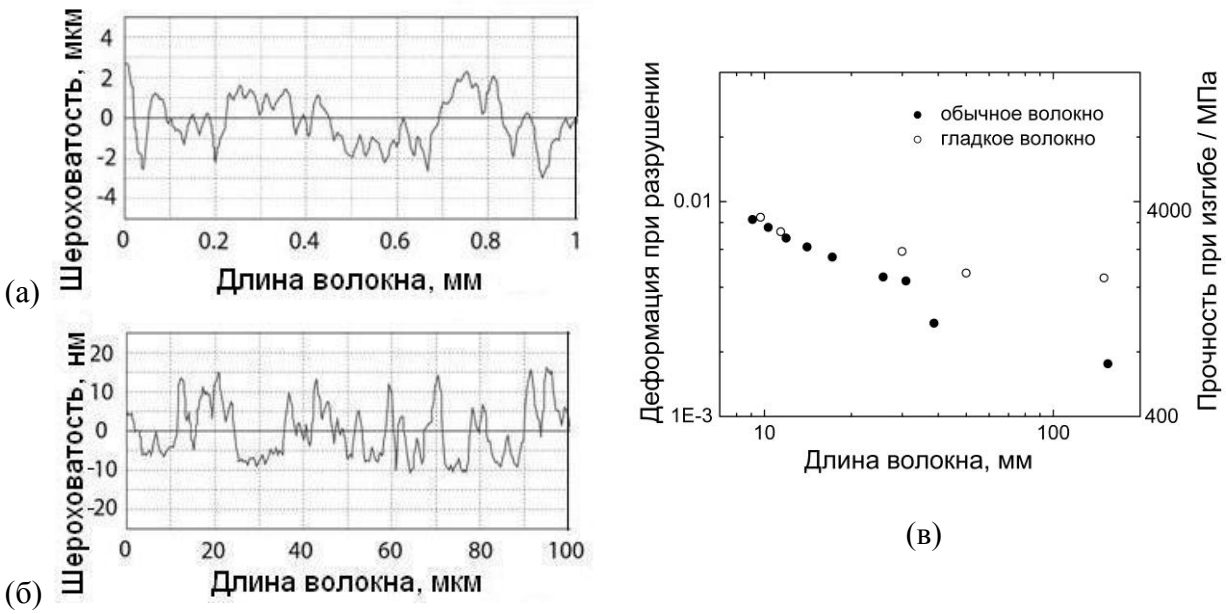


Рис. 1. Шероховатость по длине участков волокон: обычного волокна (а), гладкого волокна (б). Зависимость деформации при разрушении и прочности волокон от их длины.

На рис. 1а и рис. 1б показаны двумерные профили поверхностей (шероховатости) волокон. Сумма высоты наибольшего выступа и глубины наибольшей впадины обычного волокна составили 7.15 мкм, а для гладкого 29.6 нм. Получение гладких волокон проведено по методике, разработанной и запантентованной авторами. Результаты испытаний волокон на прочность по методике, также разработанной авторами, показаны на рис. 1в.

Выращивание сапфировых волокон и исследование их шероховатости выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00402), проведение испытаний волокон на прочность выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00296), а также в рамках Госзадания № 0028-2019-0020. Кроме того, авторы выражают благодарность Пиженину Д.Г. за помощь в экспериментальной работе.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.151

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОВ ЦИРКОНИЯ

Кривенцов В.В. [1], **Мороз Э.М.** [1], **Удовский А.Л.** [2]

[1] *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,* kriven@mail.ru

[2] *Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия,* audovskiy@imet.ac.ru

В настоящее время смешанные оксиды, имеющие структуру флюорита базового состава ZrO_{2-x}, модифицированные переходными металлами, успешно применяются для упрочнения ферритных сталей, используемых для специальных приложений. Например, данный материал пригоден для создания оболочки ТВЭЛов реакторов нового поколения на быстрых нейтронах, работающих в условиях высоких температур и жесткого облучения.

В докладе представлены результаты рентгеноспектрального исследования (методами XANES/EXAFS) состояния и локальной структуры образцов оксидов циркония (модифицированных иттрием, магнием, железом), приготовленных соосаждением и прокаленных при различных температурах. Спектры XANES/EXAFS (Zr-K, Y-K, Fe-K) исследуемых образцов регистрировались в СЦСТИ, г. Новосибирск. Установлено, что со стороны иттрия спектры XANES исследованных образцов однотипны. Можно предположить, что зарядовое состояние и ближайшее окружение иттрия также практически не изменяется в зависимости от состава образцов. Со стороны циркония, спектры XANES имеют незначительные различия. Видимо для циркония, при неизменном состоянии заряда, изменения в ближайшем кислородном окружении обусловлены различным составом образцов. Установлено, что кривые радиального распределения атомов (РРА), полученные из спектров EXAFS исследуемых образцов, имеют ряд характерных особенностей. Наблюдаются только первые координационные сферы Me-O и Me-Me, однако дальние координационные сферы (в области ~4.0-6.5Å) практически отсутствуют, что указывает на значительные искажения дальнего порядка. Локальное окружение иттрия стабильно, при изменении состава образцов, что может свидетельствовать о формировании кластеров, включающих только элементы Y и O. Локальное окружение циркония зависит от состава и предыстории образцов, так как наблюдаются некоторые различия в кривых РРА. Таким образом, амплитуды пиков, отнесенных к координационным сферам Zr-O и Zr-Me, значительно снижены (более чем на 25%) для Y, Mg - модифицированного образца по сравнению с таковыми для Y - модифицированного образца, что свидетельствует об искажениях исходной структуры флюорита. Показано, что изменения расстояний Zr-O и Zr-Me (более 0,05Å) больше, чем таковые, обусловленные различиями в параметрах ячеек для сравниваемых образцов. Было высказано предположение, что наличие Y-O кластеров препятствует уточнению структур с использованием модели статистического твердого раствора со структурой флюорита. Рассчитаны длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Детально рассмотрены возможные варианты структурных моделей. Дополнительно было проведено исследование образцов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Данные, полученные различными методами, хорошо согласуются между собой.

Работа проводилась в рамках проекта РФФИ № 19-03-00530. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.152

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА И СОСТОЯНИЯ МИКРООБЪЕКТОВ МЕТОДОМ XAFS

Кривенцов В.В. [1], Дарьин Ф.А. [2], Сороколетов Д.А. [2], Ракшун Я.В. [2], Дарьин А.В.[3]

[1]*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия,* kriven@mail.ru
[2]*Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирк, Россия*
[3]*Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия*

В представленном докладе показаны возможности микро-XAFS (XANES/EXAFS) спектроскопии для изучения микрообъектов, на примере исследования микрочастиц Сихотэ-Алиньского метеорита. Первоначально, образец, содержащий фрагменты Сихотэ-Алинского метеорита, был исследован методом высокоточного двумерного сканирующего микро-РФА-СИ с использованием принципа локализации включений на модуле конфокальной рентгеновской микроскопии (КРМ). Обнаружено наличие включений с аномально высоким содержанием вольфрама. Следует отметить, что наличие вольфрама в образцах микрочастиц метеорита не типично для подобных систем. Для установления природы происхождения соединений вольфрама в выбранном включении были проведены микро-XANES исследования. Спектры XANES (W-L_2 край) для найденной области, обогащенной вольфрамом, были записаны в режиме многократного сканирования на экспериментальном модуле «Конфокальный рентгеновский микроскоп (КРМ)» при варьировании шага съемки ~1.0-4.0 эВ в режиме флуоресцентного выхода. Спектры XANES (W-L_2 край) для реперных образцов были сняты на EXAFS станции Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового (СЦСТИ, Новосибирск) по методике на пропускание при энергии электронов 2 ГэВ и среднем токе в накопителе во время измерения 80 mA. В качестве монохроматора использовался разрезной моноблочный кристалл-монохроматор Si(111). Шаг при измерении XANES спектров составлял ~0.5-1.0 эВ. Для регистрации рентгеновского излучения в последнем случае использовались ионизационные камеры. Из анализа данных XANES установлено, что металлического W в частице метеорита не более 10-15%. Неметаллическая часть частицы метеорита, состоит из смеси фаз: различных карбидных фаз вольфрама (с большим вкладом) и оксидных фаз (с меньшим вкладом) различной дисперсности. Можно заключить, что полученные данные свидетельствуют скорее о внесении W-содержащей частицы в процессе пробоподготовки (как частицы, отколовшейся от инструмента), чем о ее внеземном происхождении, поскольку материалы на основе карбидов вольфрама широко применяются для изготовления различных инструментов.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 19-05-50046. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.153

Объемный эффект кристаллизации $Co_3Sn_2S_2$

Кузнецов Г.В., Тимонина А.В., Шахлевич О.Ф., Колесников Н.Н.
Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, avtim@issp.ac.ru

$Co_3Sn_2S_2$ □ материал с топологически защищёнными свойствами, электрические характеристики которого активно изучаются [1-2]. Кристаллы $Co_3Sn_2S_2$ получают преимущественно из расплава [1-2], поэтому для разработки и оптимизации процессов роста необходимы данные о свойствах этого вещества в жидком агрегатном состоянии.

Объемный эффект кристаллизации □V определяли методом закалки столба расплава. Загрузку $Co_3Sn_2S_2$, предварительно синтезированного из элементов, расплавляли в цилиндрическом графитовом тигле с внутренним диаметром 10 мм, помещенном в газовый автоклав. Расплав выдерживали при температуре 1263 К под давлением аргона 0,9 МПа, а затем закристаллизовывали путем отключения нагрева. Вследствие интенсивного теплоотвода кристаллизация начиналась по всей поверхности столба расплава, что сохраняло его габариты. Необходимую для расчета □V плотность кристаллического $Co_3Sn_2S_2$, равную 7,244 г/см^3, определили из данных рентгеноструктурного анализа.

Полученное значение объёмного эффекта кристаллизации

$$-\Delta V = (0.527 \pm 0.065)\ см^3$$

соответствует плотности расплава 6.369±0.565 г/см^3. В дальнейшем планируется экспериментальное определение вязкости и поверхностного натяжения расплава $Co_3Sn_2S_2$.

1. V.D. Esin, A.V. Timonina, N.N. Kolesnikov, E.V. Deviatov. Second-harmonic voltage response for the magnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$. JETP Letters 111 (2020), 685–689.
2. O. O. Shvetsov, Yu. S. Barash, S. V. Egorov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, E. V. Deviatov. Magnetically stable zero-bias anomaly in Andreev contact to the magnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$. EPL, 132 (2020) 67002.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.154

АСМ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ СЕГНЕТОЭЛАСТИЧЕСКИХ И СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ДОМЕНОВ В КРИСТАЛЛАХ 2-МЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА $C_8H_8N_2$

Кункель Т.С., Балашова Е.В., Кричевцов Б.Б., Анкудинов А.В.

Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе,
г. Санкт-Петербург, Россия, tatyana_kunkel@mail.ru

Интерес к 2-метилбензимидазолу (MBI) $C_8H_8N_2$, органическому молекулярному сегнетоэлектрику, вызван перспективами его применения в устройствах обработки информации, нелинейно-оптических устройствах и т.д.

Потенциальный фазовый переход в MBI из центросимметричной прафазы $P4_2/n$ в сегнетоэлектрическую фазу Pn может сопровождаться появлением сегнетоэластических (FEL) и сегнетоэлектрических (FE) доменов. В данной работе впервые удалось визуализировать заряженные сегнетоэластические доменные стенки и показать присутствие плоских доменных стенок между FE и FEL доменами.

Моно- и микрокристаллы MBI выращивались методом испарения из этанола. Для получения более совершенных кристаллов проводилась их многократная перекристаллизация. Исследование доменной структуры на поверхности проводилось путём визуализации поверхностного потенциала бесконтактными методиками атомно-силовой микроскопии: сканирующей Кельвин зонд микроскопии (СКЗМ) и электростатической силовой микроскопии (ЭСМ).

Рельеф поверхностного потенциала на сколе MBI $(001)_{tetr}$, измеренный в режиме СКЗМ, имеет периодическую структуру чередующихся полос шириной 1 и 4 мкм и длиной 20 мкм, направленных близко к оси $\{110\}_{tetr}$ (рис.1, а). Такая картина может соответствовать крупным FEL доменам (широкие светлые полосы) с заряженными стенками (узкие тёмные полосы), компенсирующим деформацию в приповерхностном слое, которая возникает при сколе кристалла.

Иная картина поверхностного потенциала на микрокристалле MBI размером 0,7 мкм×0,7 мкм. Здесь наблюдается система противоположно заряженных областей, отражающая равновесную 180° доменную конфигурацию FE доменов. ЭСМ режим позволил визуализировать четкие крестообразные полосы, предположительно являющиеся FEL доменным стенкам (рис.1, б). Также было показано, что воздействие локального импульса напряжения (U = 3V, τ = 6s) вызывает перемещение FEL и FE стенок по поверхности микрокристалла.

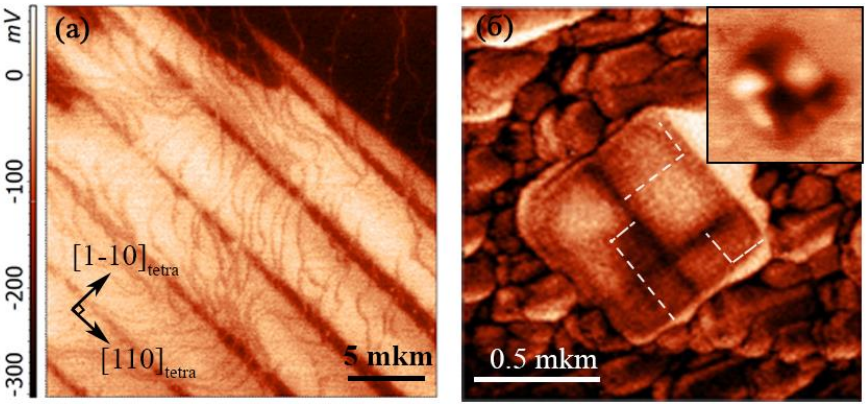


Рисунок 1. (а) - визуализация потенциала на поверхности $(001)_{tetr}$ скола кристалла MBI, (б) – ЭСМ изображение микрокристалла, на вставке – распределение поверхностного потенциала; белым пунктиром отмечены FE стенки, наблюдаемые на картине потенциала

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.155

МЕХАНИЗМЫ И КИНЕТИКА ОСАЖДЕНИЯ ЗАЩИТНЫХ ТАНТАЛОВЫХ ПОКРЫТИЙ БЕЗВОДОРОДНЫМ МЕТОДОМ CVD

Лубнин А.Н., Ладьянов В.И., Пушкарев Б.Е., Сапегина И.В., Файзуллин Р.Р., Трещёв С.Ю.

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской Академии наук,
426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, д. 34 qrcad@udman.ru

Танталовые покрытия чрезвычайно востребованы в приборостроении, авиакосмической технике, медицине. Химическое газофазное осаждение (chemical vapor deposition или CVD) – основной метод нанесения тантала на детали сложной формы. Классический CVD Ta (восстановление водородом $TaBr_5$ при ~1500K) имеет следующие недостатки: возможность растворения водорода в покрытии и подложке с ухудшением их свойств; высокие температуры осаждения. В нашей лаборатории создана альтернативная безводородная технология нанесения Ta, основанная на CVD с Cd в качестве восстановителя при ~1000K. Однако эти процессы, их кинетика и механизмы, недостаточно изучены. Методом рентгеновской дифракции (метод Ритвельда, гармонический анализ Уоррена-Авербаха, расчет вероятности дефектов упаковки (ДУ) по Уоррену), эмиссионной спектроскопии тлеющего разряда (послойный химический анализ) и применением термодинамических расчетов по модели Миедемы изучены кинетика и механизмы CVD Ta в системе $TaBr_5$-Cd на подложках из ст3, W и Cu в интервале температур 700-950°C. Показано, что при T=700-950°C осаждаются чистые Ta покрытия, толщиной (в мкм) 2.8-20, 2.2-5.3 и 2.0 на подложках из ст3, W и Cu соответственно. Энергия активации процесса CVD Ta на ст3 и W составила 28 и 78 кДж/моль соответственно. При T ~ 800°C и выше в ряду подложек Cu–W–ст3 скорость осаждения танталового покрытия возрастает и согласуется с отрицательной энтальпией образования интерметаллидов MeTa (где Me – металл подложки), рассчитанной по модели Миедемы. При температуре 700-750 °C на подложке из ст3 осаждалось покрытие с преобладанием ОЦК фазы (α-Ta), при 800-950°C – ГЦК (a_{fcc} = 0.4430-0.4452 нм) с примесью ГПУ фазы (a_{hcp} = 0.2847-0.3100 нм, c_{hcp} = 0.4926-0.5370 нм) (рис. 1). На подложке из W тантал при 700-750°C осаждается в виде ОЦТ фазы β-Ta (a_{bct}=1.0147-1.0148 и c_{bct}=0.5272-0.5285 нм), выше 800°C – ОЦК фазы. На медной подложке Ta осаждался при 800 °C в виде смеси ОЦТ и ОЦК фаз. Дефекты упаковки (ДУ) являются плоским (планарным) дефектом, представляющим собой элементы другой кристаллической структуры. Сумма вероятности деформационных (α) и двойниковых (β) ДУ $1.5\alpha+\beta$ в осажденном ОЦК тантале в плоскостях {112} составила в зависимости от температуры 0.1-1% (подложка из ст3) и 0.03-0.4% (подложка из W), в ГЦК Ta в плоскостях {111} 0.03-0.7%. Обсуждаются различная кинетика осаждения тантала на подложках, структурные особенности осажденного Ta и механизмы осаждения с учетом взаимодействия подложки и покрытия, накопления в покрытии напряжений и дефектов упаковки.

Рис. 1. Рентгенограммы осажденного Ta: (a) – 700 °C, ст3; (b) – 750 °C, ст3; (c) – 800 °C, ст3; (d) – 700 °C, W.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.156

STRUCTURAL TRANSITIONS AND THERMAL PROPERTIES OF HIGH-PRESSURE-SYNTHESIZED B20-TYPE MONOGERMANIDES

Magnitskaya M.V.[1,2], Chtchelkatchev N.M.[1], Kamaeva L.V.[3], Tsvyashchenko A.V.[1]

[1] *Vereshchagin Institute of High Pressure Physics, RAS, Troitsk, Moscow, Russia*
[2] *Lebedev Physical Institute, RAS, Moscow, Russia*
[3] *Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of RAS, Izhevsk, Russia*
magnma@yandex.ru

Transition metal monogermanides with a noncentrosymmetric B20-type crystal structure have long attracted the attention of researchers (see, e.g. [1]), since they represent a promising basis for the design of new thermoelectrics and spintronics-related materials. Here, the stability and phase transformations in the high-pressure-synthesized [2] B20 phases of FeGe, MnGe, and RhGe are studied theoretically using *ab initio* density functional calculations and experimentally by means of differential scanning calorimetry (DSC). We find that, for a given input chemical composition, the existence of B20 structures stable at finite temperature (and pressure) can be efficiently established by the T=0 evolutionary search, if this structure is present in the output list of low-lying metastable polymorphs. We also evaluated finite-temperature properties of B20 phases under study (Fig. 1). The obtained temperature dependence of specific heat of MnGe is in good agreement with the available experimental data [2].

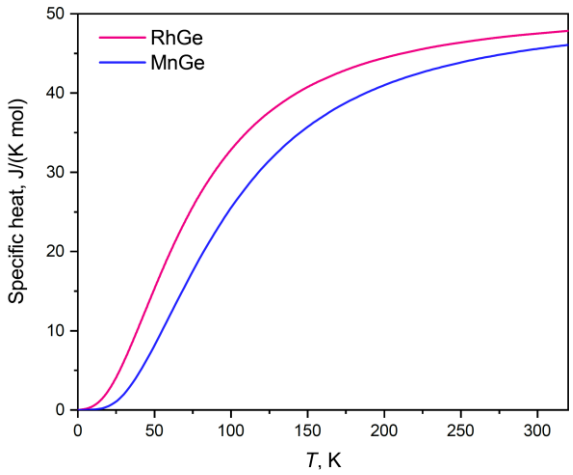


Fig. 1. Calculated specific heat of RhGe and MnGe.

The calculated ground state of nonmagnetic MnGe is represented by a hypothetical tetragonal structure unusual for this class of compounds. For FeGe and MnGe in magnetic state, the evolutionary search yields the same set of preferred phases. In case of FeGe, this result is consistent with available information, while for MnGe we find new equiatomic polymorphs, in addition to the known metastable high-pressure phase of B20 type [2]. The DSC thermograms of FeGe and MnGe are also similar. On the contrary, B20-RhGe differs from FeGe and MnGe both in calculated structural hierarchy and in the shape of DSC curve. The DSC shows that the studied metastable B20 phases are different in their properties from analogues obtained by other methods. Their behavior on heating notably depends on the preparation method and sample history.

This work is supported by Russian Science Foundation (18-12-00438, 17-12-01050).

Chtchelkatchev N.M. et al. // Pure Appl. Chem. – 2019. – V. 91. – № 6. – P. 941-955.
Tsvyashchenko A. et al. // Solid State Phenom. – 2012. – V. 190. – № 6. – P. 225-228.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.157

PORPHYRIN-POLYMER LAYERS AT AIR-WATER INTERFACE: IN SITU X-RAY DIFFRACTION STUDY

L.A. Maiorova[1,2], O.V. Konovalov[3], S.B. Astaf'ev[4], L.G. Yanusova[4], M.V. Petrova[1], T.A. Ageeva[1], O.I. Koifman[1,5], V.V. Erokhin[6], S.I. Erokhina[6]

[1)] Institute of Macroheterocyclic Compounds, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Russia, maiorova.larissa@gmail.com

[2)] Institute of Pharmacoinformatics, Federal Research Center "Computer Science and Control" of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

[3)] ESRF-The European Synchrotron, Grenoble, France Grenoble, France;

[4)] FSRC «Crystallography and Photonics» RAS, Moscow, Russia

[5)] Institute of Solution Chemistry, RAS, Ivanovo, Russia

[6)] Institute of Fundamental Medicine and Biology, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Polymers of vinylpyridines are cationic polyelectrolytes. They belong to macromolecular chelates, which, due to pyridyl fragments, can coordinate metal ions and metal-containing compounds, in particular, metalloporphyrins. Possessing a unique set of properties, metalloporphyrins form supramolecular complexes with proteins and other components of living organisms. They play an important role in photosynthetic, respiratory, enzymatic and other functions.

In this work we present in situ grazing-incidence X-ray diffraction (GIXD) and X-ray reflectometry (XRR) study of the structure of polyvinylpyridine (P4VP) and zinc tetraphenylporphyrin-polyvinylpyridine (Por-P4VP) layers at air-water interface. The layer structure was analyzed within the framework of the model of a nanostructured M-monolayer [1, 2] using the quantitative method of compression isotherm analysis [3, 4].

GIXD data for P4VP layer, formed at surface pressure π=20 mN/m, reveal periodicity corresponding to pyridine rings packing (0.41 nm) in the plane of the layer. Two periods corresponding to pyridine rings (0.41 nm) and porphyrin (0.37 nm) packing were detected for Por-P4VP layer. XRR data were processed directly from experimental data and using the BARD software package, which includes methods of multiple-scale wavelet analysis. It was shown that the total layer thickness of P4VP at π=20 mN/m is 35 Å (close to double layer), whereas for Por-P4VP at π=25 mN/m the thickness is 20-22 Å (close to monolayer).

Experimental part of the work was done in the European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France (ID10 beamline, project SC-4819).

Acknowledgements

The work was financially supported by the grant of the Russian Science Foundation (N 20-12-00175), ISUCT (in part of GIXD data analysis); by the Ministry of Science and Higher Education within the State assignment for ISUCT (FZZW-2020-0008 in part of XRR data analysis) and within the State assignment for FSRC «Crystallography and Photonics» RAS (in part of reconstruction of the layer thickness from wavelet patterns).

1. L.A. Maiorova et al. *ACS Langmuir*, 2018, 34, 9322-9329.
2. Karlyuk MV, Krygin YY, Maiorova LA *Russ. Chem. Bull.* 2013, 62, 471–479.
3. Maiorova L., Koifman O. In: Koifman O.I. et al. *Functional materials based on tetrapyrrole macroheterocyclic compounds* 2019.
4. L.A. Valkova, A.S. Glibin, O.I. Koifman *Macroheterocycles* 2011, 4(3), 222-226.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.158

ТРАВЛЕНИЕ САПФИРА С НАНОКРИСТАЛЛАМИ ЗОЛОТА В ПОТОКЕ ЭЛЕКТРОНОВ: ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ

Муслимов А.Э., Каневский В.М.

Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" РАН, 119333 Москва, Россия amuslimov@mail.ru

В основе современной технологии изготовления устройств микро- и наноэлектроники лежит процесс травления, позволяющий формировать микро и наноструктуры. В представленной работе изучены процессы металл-стимулированного травления (рис.1) сапфира с использованием пучков электронов с энергией 50-70 кэВ. В качестве металлической фазы использованы нанокристаллы золота. Рассмотрена возможность изучения кинетики процессов радиационно-индуцированного травления поверхности сапфира с нанокристаллами золота с использованием временной зависимости спектров катодолюминесценции.

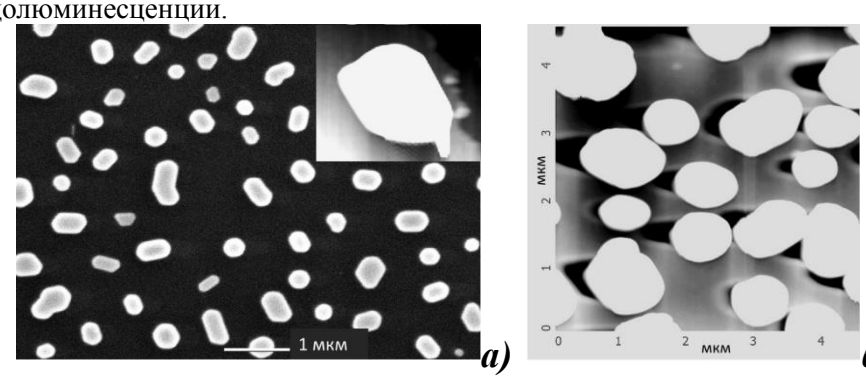


Рис.1. Микроскопические изображения поверхности сапфира с нанокристаллами золота до (а) и после (б) облучения потоком электронов. На врезке: изображение отдельного кристаллита полученное методов атомно-силовой микроскопии.

Показано, что основными центрами окраски в УФ области спектра катодолюминесценции сапфира являются F^+ центры, а F полоса подавлена. Исследование временной зависимости интенсивности свечения F^+ центров подтверждает отсутствие этапа поверхностного плавления сапфира в процессе облучения потоком электронов с ускоряющим напряжением 50 кэВ. Малая величина уширения линии Cr^{3+} соответствует незначительным отклонениям температуры на поверхности сапфира в процессе электронного облучения. Предложена качественная модель описывающая травление поверхности сапфира с нанокристаллами золота в процессе воздействия электронов. В основе рассмотренной модели лежит радиационно-индуцированный Оже-распад сапфира и формирование в процессе протекания экзотермической реакции интерметаллических фаз Au-Al.

Благодарности.
Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, а также при поддержке Российского фонда фундаментальных ис-следований (грант № 20-21-00068 Росатом).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.159

СВЕРХТВЕРДЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ТИТАНА

Муслимов А.Э., Каневский В.М.

Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" РАН, 119333 Москва, Россия amuslimov@mail.ru

С развитием военной и космической промышленности, электроники, медицины, материалы на основе соединений титана прочно заняли свою технологическую нишу. В настоящей работе представлены результаты исследования процессов формирования сверхтвердого покрытия в процессе обработки в потоке низкотемпературной плазмы азота в открытой атмосфере пленок титана на подложках сапфира и изучения их механических свойств. В качестве исследовательских образцов использовались пленки титана нанесенные на подложки сапфира методом магнетронного распыления. В дальнейшем образцы обрабатывались в потоке низкотемпературной высокоэнтальпийной плазмы азота.

В процессе обработки в течении 1 min в азотной плазме в открытой атмосфере на подложках сапфира формировалась зернистая пленка с избыточным содержанием кислорода. Величина микротвердости, полученная усреднением по индентам в интервале глубин отпечатка 50-200 nm превосходила 27 GPa, что на 22-23% выше величины микротвердости сапфировой пластины. Данные рентгеновской дифракции свидетельствуют о монофазности получаемого покрытия, что, несомненно, обеспечивает стабильность структуры и свойств при высоких температурах. С учетом данных микроанализа, свидетельствующем об избыточном содержании кислорода, высокой температуры синтеза в присутствии азота, можно определенно сказать, макрофаза покрытия сформирована азотсодержащей фазой рутила TiO_2. Касаемо высоких значений микротвердости, известно, структура рутила имеет более плотную упаковку (4.250 g/cm3), по сравнению с структурой анатаза (3.899 g/cm3). Точно также, вероятно, внедрённое положении атомов азота на межкристаллитных границах. Сегрегация атомов азота на границах зерен приводит к сдерживанию миграции границ и межзеренного скольжения. Снижается подвижность дислокаций. Можно предположить формирование в объеме микровключений типа Ti_2N, TiN с высокими значениями микротвердостью.

Таким образом, покрытие синтезируемое в процессе плазменной(азотной) обработки в открытой атмосфере пленок титана, представляет собой азотсодержащую фазу диоксида титана с структурой рутила. Компактная структура (рутил), мелкозернистость (закон Холла–Петча), сегрегация азота на границах зерен, а также сжимающие напряжения в комплексе определяют высокую микротвердость покрытия азотсодержащего диоксида титана. Высокая производительность и осуществление синтеза в открытой атмосфере позволяет рассматривать предложенную методику перспективной для получения сверхтвердых покрытий с высокой резистентностью к кислороду.

Благодарности.

Работа проводилась в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ "Кристаллография и фотоника"РАН, а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-0800598).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.160

МИКРО- И НАНОТВЕРДОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ GaTe

Орлов В.И.[1], Борисенко Е.Б.[1], Головин Ю.И.[2], Тюрин А.И.[2], Колесников Н.Н.[1]
[1]*Институт физики твердого тела Российской академии наук,*
142432 Черноголовка, Россия, orlov@issp.ac.ru
[2]*Тамбовский государственный университет иммени Г.Р. Державина,*
Тамбов, Россия, yugolovin@yandex.ru

Кристаллы GaTe являются типичными представителями слоистых полупроводниковых соединений AIIIBVI, которые легко скалываются по плоскостям спайности, образуя тонкие плоскопараллельные пластины толщиной от 100 нм до нескольких мм. В плоскости слоя химические связи являются ковалентными, а межплоскостные связи слабые и по прочности приближаются к ван-дер-ваальсовым. Существование слабой связи между слоями и отсутствие оборванных связей практически исключают возможность образования поверхностных уровней, концентрация которых оказывается на несколько порядков меньше, чем в обычных полупроводниках, что делает возможным простым скалыванием слоев изготовление оптически однородных образцов с естественной зеркальной поверхностью.

Изучение механических свойств слоистых кристаллах AIII BIV является важным. Однако таких экспериментальных данных недостаточно особенно для кристаллов GaTe. Большинство исследований таких кристаллов является качественным. В настоящей работе исследованы микро- и нанотвердость монокристаллов GaTe на плоскости скола (-201). На рис.1 показаны типичные кривые нагружения: нагрузка P – глубина погружения индентора h при различной величине максимальной нагрузки P_{max}. При P_{max} < 50 μН происходит полное восстановление отпечатка Рис.1(***а***). Лишь при нагрузках выше 50 μН фиксируется остаточный отпечаток. На кривой нагружения наблюдаются скачки Δh деформации (на Рис.1 ***б*** и ***в*** отмечены стрелками). С увеличением нагрузки величина скачков Δh как правило увеличивается от 0.5 нм до ~10 нм и больше (расстояние между слоями ~0.5 нм).

Рис. 1. Зависимость h от P при различной величине максимальной нагрузки

Величина нанотвердости – Н = 2.2 ± 0.2 ГПа, что значительно выше величины микротвердости ~350 МПа. Значение модуля Юнга - Е = 25 ± 0,5 ГПа. Величина модуля Юнга практически не зависела от размерного фактора и хорошо согласуется с литературными данными. Вид отпечатка и характер разрушения вокруг него свидетельствует о чисто хрупком разрушении слоев.

Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.161

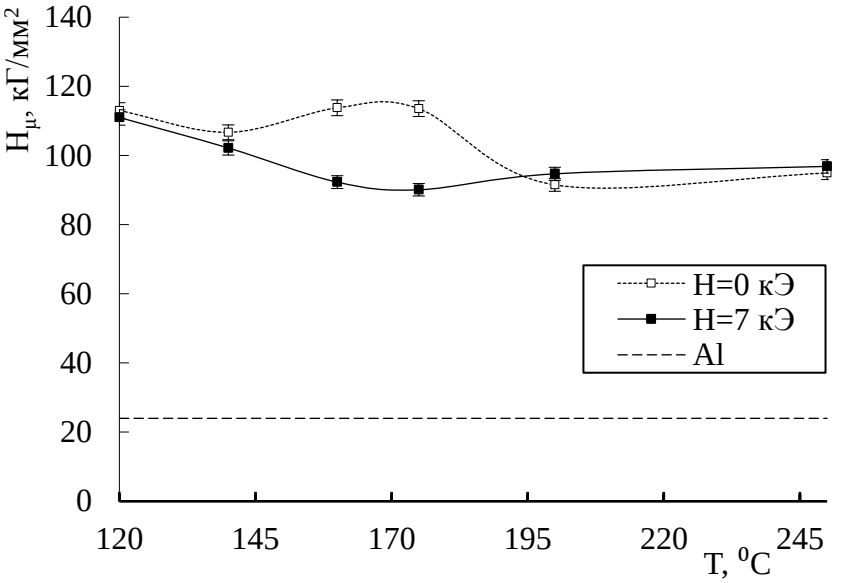
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СОСТАРЕННОМ АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ Al-Li

Осинская Ю.В, Звездкина А.А., Покоев А.В.
Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, ojv76@mail.ru

Методами микротвердости и рентгеноструктурного анализа выполнено экспериментальное исследование влияния постоянного магнитного поля (ПМП) напряженностью 7 кЭ на микротвердость и параметры тонкой структуры (средний размер блоков когерентного рассеяния, плотность дислокаций, относительная величина микродеформаций) алюминиевого сплава Al-Li, состаренного после предварительной закалки от 500 °С (выдержка 1 ч) в воду в температурном интервале старения от 120 до 250 °С при фиксированном времени старения 4 ч.

Анализ результатов позволил сделать следующие выводы:

1. Наложение ПМП приводит к уменьшению значений микротвердости (см. рис), при этом пластические свойства сплава возрастают, наблюдается положительный магнитопластический эффект (МПЭ) [1, 2] величиной до 21 %.



Зависимость микротвердости алюминиевого сплава Al-Li от температуры старения при наложении магнитного поля

2. Методом рентгеноструктурного анализа установлена корреляция между температурными зависимостями параметров тонкой структуры и микротвердости, обнаружено, что минимальным значениям плотности дислокаций и относительной величины микродеформаций соответствуют минимальные значения микротвердости.

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Урусовская А.А., Перекалина Т.М. О движении дислокаций в кристаллах NaCl под действием постоянного магнитного поля // ФТТ. – 1987. – Т.29. – №2. – С. 467 –470.

2. Головин Ю.И. Магнитопластичность твердых тел // ФТТ. – 2004. – Т. 46. – № 5.– С. 769 – 803.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.162

НАНОПРОВОЛОКИ ИЗ МЕДИ КАК КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ ОКИСЛЕНИЯ СО

Панов Д.В[1]., Бычков В.Ю[2]., Тюленин Ю.П[2]., Загорский Д.Л[1].
[1]ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, Москва, Россия
[2]ФГБУН ФИЦ Химической физики РАН, Москва, Россия

Одномерные наноматериалы-нанопроволоки (НП) представляют большой интерес для проведения каталитических реакций. Это обусловлено высоким отношением площади поверхности к объему, электропроводимостью и высокой кривизной поверхности, определяющей эффективность работы катализатора.

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей создания структур на основе НП для каталитического окисления СО при наименьшей температуре. Окисление СО чрезвычайно важно – например, в доочистке автомобильных выхлопных газов. Для этой цели в настоящее время используется коммерческий катализатор Pt-Pd-Rh, который превращают СО в СО2 практически со 100% выходом при температуре свыше 400 ˚С. Для практических применений важны катализаторы, которые будут работать при более низких температурах.

В ходе настоящей работы было использовано три типа структур на основе НП из меди – классические НП (столбики, закрепленные на подложке), конусовидные НП и структура типа сэндвич (столбики, закрепленные между двух подложек). Полученные образцы были использованы в качестве катализатора в процессе окисления СО. Полученные результаты представлены на Рис.1.

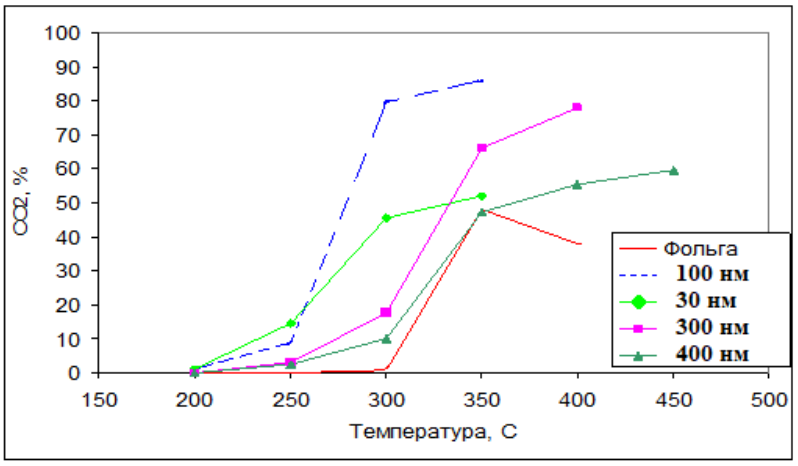


Рис. 1. Выделение CO_2 при взаимодействии образцов меди (16*5 мм) с потоком смеси 2% СО-5% O_2 - He (20 мл/мин).

На рисунке представлены классические нанопроволоки с различными диаметрами пор – 30 нм, 100 нм, 300 нм, 400 нм и образец из фольги. Выявлено, что самая высокая эффективность (максимальный выход СО2) получился с использованием классических НП. Было выявлено, что НП с диаметром 100 нм имеют наибольший выход СО2 – до 85% при 350 ˚С. Выход составлял 80% при 300 ˚С -что на 100 ˚С ниже, чем рабочая температура коммерческих катализаторов. В дальнейшем планируется провести эксперименты с использованием в качестве катализаторов массивов НП из других материалов. Также планируется изучить применимость массивов НП в качестве катализаторов для других реакций.

Благодарности. Авторы благодарны проф. П.Ю.Апелю за предоставление образцов трековых мембран. Работы по синтезу НП из меди выполнены в рамках Госзадания ФНИЦ «КиФ», а работы по катализу- Госзадания ФИЦ Химфизики.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.163

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОПРОВОЛОК ИЗ КОБАЛЬТА С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

***Д.В. Панов*[1,2], *Д.Л. Загорский*[2]**
[1]*МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, Россия*
[2]*ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, Москва, Россия*

В настоящий момент одни из самых перспективных областей науки связаны с разработкой и развитием наноматериалов. Существует и активно развивается большое количество методов получения различных наноструктур. Одним из методов получения наноматериалов является матричный синтез на основе трековых мембран.

Известно, что один из важнейших магнитных материалов-кобальт может иметь как кубическую (ГЦК), так и гексагональную структуру (ГПУ). Последняя имеет более низкую симметрию и в силу этого обладает значительно более высокой магнито-кристаллической анизотропией. Для многих задач, связанных с синтезом магнитных материалов, желательным является получение кобальта именно гексагональной структурой. Процесс этот отработан для объёмных материалов, однако для случая нанопроволок (НП) вопрос регулировния структуры до настоящего времени не решён.

В настоящей работе методом матричного синтеза, проводимого при различных условиях, были получены НП из кобальта. Их топография исследовалась методом СЭМ, а структура- рентгеновским методом. Показано, что на структуру получаемых НП влияет напряжение роста. Так, при потенциале 0,9 В формируется ГПУ-структура, а при потенциалах 0,6 В и 1,2 В преобладает ГЦК-структура (эти эксперименты проводились при pH раствора 5).

Также выявлено влияние изменения pH раствора. Пример результатов рентгеноструктурного анализа полученных образцов приведены на рис. 1.

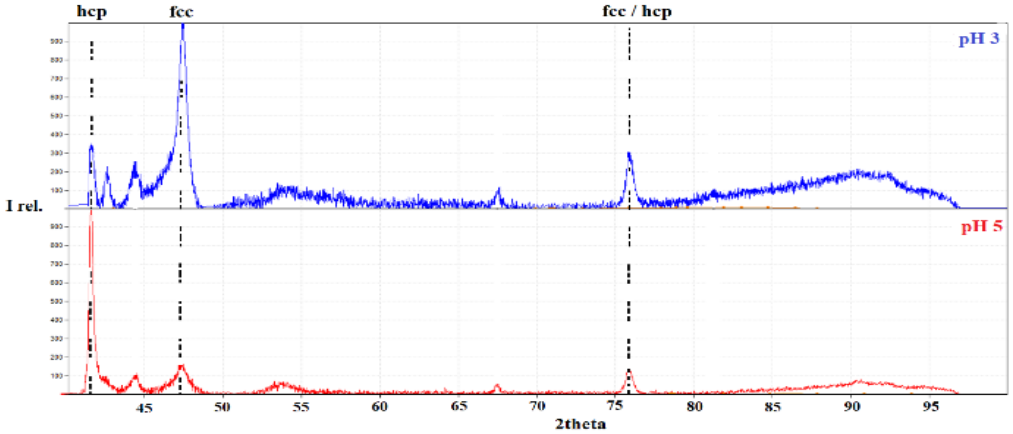


Рис. 1. Рентгеновский спектр кобальтовых нанопроволок, полученных при различных pH.

Эти результаты доказывают, что увеличение pH раствора приводит к постепенному переходу от кубической к гексагональной кристаллической решетке. Таким образом показано, что и напряжение роста, и изменение pH раствора влияет на структуру получаемых нанопроволок.

Благодарности: *Работа проводилась на базе ФНИЦ КиФ РАН. Работы по синтезу НП из меди выполнены в рамках Госзадания ФНИЦ «КиФ».*

Список литературы

1.Структура и магнитные свойства НП из металлов группы железа, полученных методом матричного синтеза; Загорский Д.,Фролов К.,Бедин С. и др.// ФТТ, Т 60 № 11, 2018, С 2075.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.164

СОПОСТАВЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ АМОРФНОГО СПЛАВА $Co_{70.5}Fe_{0.5}Cr_4Si_7B_{18}$ ПРИ РАЗНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Пермякова И.Е.

ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, Россия, inga_perm@mail.ru

Проведен комплексный сравнительный анализ отклика механических характеристик быстрозакалённого АС $Co_{70.5}Fe_{0.5}Cr_4Si_7B_{18}$ и структурных превращений при разных внешних воздействиях. Отжиг осуществлялся в вакуумной печи при заданном температурно-временном диапазоне; КВД – в камере Бриджмена с варьированием числа оборотов; лазерная обработка – с привлечением эксимерного УФ-лазера, работающего в импульсном режиме при подобранных параметрах. Для исследованного АС обнаружены схожие эффекты упрочнения при различных видах обработок, а именно два пика микротвердости по мере усиления того или иного воздействия (рис. 1). Однако степень и природа наблюдаемых эффектов различна.

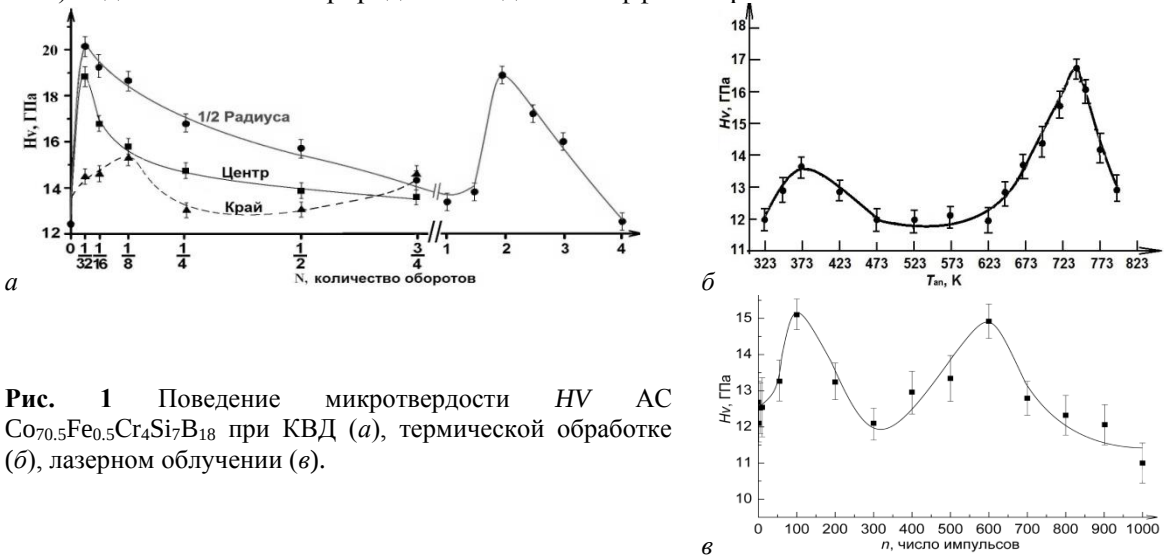


Рис. 1 Поведение микротвердости *HV* АС $Co_{70.5}Fe_{0.5}Cr_4Si_7B_{18}$ при КВД (*а*), термической обработке (*б*), лазерном облучении (*в*).

Первый максимум *HV* при КВД (рис. 1*а*) в области 1/2*R* дискового образца и самый большой по сравнению с другими воздействиями, связан тем, что при КВД АС на ранних стадиях ($N < 1$) обнаружено формирование двух морфологических типов полос сдвига (ПС) – радиальных и дуговых. Их взаимные пересечения, объединения и перевивы способны внести существенный вклад в деформационное упрочнение материала. Кроме того, известно, что в зоне колоний ПС происходят тепловые флуктуации, ведущие к адиабатическому разогреву. С учётом этого, зависимость микротвердости от величины деформации можно сравнить с зависимостью *HV*(*T*). При отжиге АС наблюдается эффект низкотемпературного упрочнения в диапазоне 373 K (рис. 1*б*). Вероятно, аналогичный эффект наблюдается и на начальных стадиях ИПД, поскольку материал способен нагреваться при КВД. Эффект низкотемпературного упрочнения – первый пик *HV* при отжиге (рис. 1*б*) может быть связан с сегрегацией атомов-металлоидов на специфических дефектах аморфной матрицы – областях свободного объема, вносящих определяющий вклад в процессы пластической деформации. При этом снижается подвижность данных дефектов, а, следовательно, повышается микротвердость и прочность.

Что касается лазерного воздействия, то эффект упрочнения при малых дозах облучения занимает промежуточное место: он уступает КВД, но эффективнее отжига (рис. 1*в*). Это связано с тем, что при обработке лазером идет не просто лазерный нагрев, но и ударное упрочнении под воздействием сверхкоротких импульсов. Второй пик *HV* при всех видах воздействия связан с началом процессов кристаллизации, выделением нанокристаллических фаз и их оптимальным распределением. Данные ПЭМ и РСА это подтверждают. Таким образом, сопоставляя структуру и механическое поведение изученного АС, выявлены оптимальные режимы обработок для получения необходимых механических свойств в рамках аморфного и аморфно-нанокристаллического состояний.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (*грант № 20-08-00341 "А"*).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.165

СОЗДАНИЕ НОВЫХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ

Пермякова И.Е.[1], Иванов А.А.[2], Шеляков А.В.[2]

[1] *ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, Россия,* inga_perm@mail.ru
[2] *НИЯУ «МИФИ», г. Москва, Россия*

Разработка физических основ создания новых функциональных аморфно-нанокристаллических и полностью нанокристаллических материалов с уникальным комплексом эксплуатационных характеристик является приоритетной задачей и важным направлением как в современном материаловедении, так и в физике.

Целью наших исследований являлось получение композитов путем лазерного облучения ленточных аморфных сплавов (АС), а также установлении закономерностей «структура-свойства» при варьировании параметров и геометрии лазерного воздействия.

Объектом изучения являлся АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$, полученный закалкой из расплава в виде ленты (толщина 25 мкм и ширина 1 см). Облучение АС проводилось в импульсном режиме эксимерным ультрафиолетовым KrF лазером серии CL-7100 (λ = 248 нм, τ = 20 нс). Эволюцию структуры исследовали с привлечением ПЭМ на микроскопе JEM 2100. Морфологию поверхности обработанных АС и их фрактографию изучали с помощью РЭМ на установках JSM 35C и Versa 3D. Пластичность образцов оценивали на изгиб (*U*-методом). Прочность композитов определяли из кривых растяжения, полученных с помощью электромеханической универсальной испытательной машины Instron-5565. Микротвёрдость *HV* образцов измеряли на твердомере ПМТ-3М.

Получены три вида композитных материалов (плотно покрытые, полосовые, "шахматные") представляющих собой аморфную матрицу, армированную кристаллическими областями, которые были сформированы в строго заданных технологических позициях по поверхности и в объеме быстрозакаленных лент АС за счёт селективного воздействия лазера.

Установлено, что чередование в композите в шахматном порядке аморфных и нанокристаллических областей, полученных в ходе лазерного отжига АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$, обеспечивает как достаточно высокую прочность, так и удовлетворительную пластичность исследуемого материала.

Показано, что зависимость микротвердости АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$ от числа импульсов (n) лазерного воздействия является немонотонной функцией с максимумом *HV* при n = 500. Данное поведение обусловлено последовательной сменой структурной релаксации в АС (с изменением локального композиционного и топологического упорядочения) на процесс кристаллизации (с зарождением и выделением кристаллических фаз, ростом зерен) при лазерной обработке.

Показано, что режим облучения с частотой следования импульсов 2 Гц $\leq f \leq$ 20 Гц (при n = 100, энергии импульса E_i = 150 мДж и плотности энергии W = 0.6 Дж/см^2) улучшает и эффективно поддерживает высокие значения микротвердости АС $Co_{28.2}Fe_{38.9}Cr_{15.4}Si_{0.3}B_{17.2}$ при сохранении аморфности в структуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (*грант № 20-08-00341 "А"*).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.166

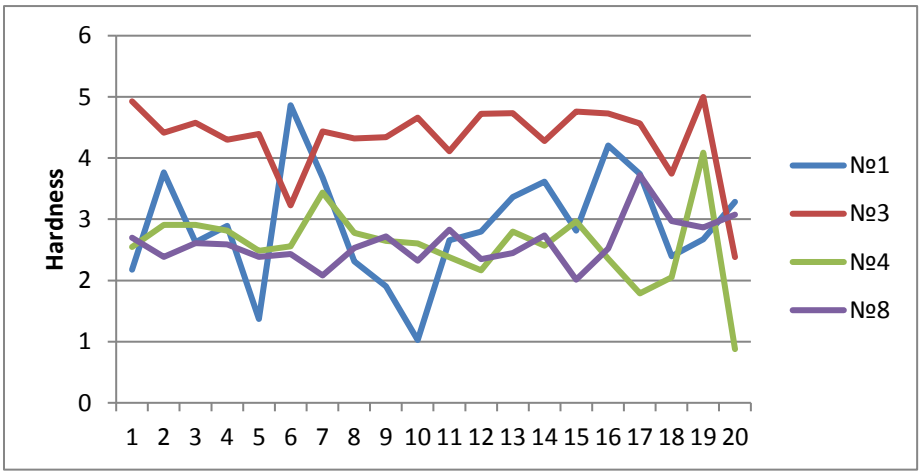
МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТЬ СПЛАВА CU-BE-NI, ВОЗНИКАЮЩЕГО В ЗАКАЛЕННОМ СОСТЯНИИ, ПОСЛЕ СТАРЕНИЯ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Покоев А.В., Ивлев Н.А., Дивинский С.В., Осинская Ю.В.
Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, a.v.pokoev46@mail.ru

Целью настоящего исследования был магнитопластический эффект [1], возникающий в закаленных модельных Cu-Be-сплавах с добавками Ni в постоянном магнитном поле, методом измерения нанотвердости [2].

Исследованию подвергался сплав 2.0 вес. % Be, 0.4 вес. % Ni, остальное - Cu. Образцы из сплава после закалки 0.5 ч с 800 °С в воду 20 °С старили при температуре 350 °С, 2 ч в постоянном магнитном поле (ПМП) напряженностью 557.7 кА/м и без него. Использовался прибор нанотестер NanoTest-600, производитель Micro Materials Ltd. (Великобритания). Значение твердости и модуля упругости определялись по методу Оливера и Фара циклом нагрузка-разгрузка. При этом использовался индентор Берковича с радиусом закругления 200 нм. Максимальная сила нагрузки равнялась 20 мН. Задача исследования состояла в том, чтобы «почувствовать» по изменениям нанотвердости изменения в фазовом составе образцов, обработанных в ПМП и без него.

При наложении ПМП наблюдается так называемый «отрицательный» магнитопластический эффект (МПЭ) [3], приводящий к уменьшению нанотвердости до 49 %, при этом пластические свойства сплава ослабевают.



Зависимость нанотвердости вдоль произвольной прямой образца (расстояние между точками – 50 мкм): №1 – образец без обработки в ПМП; №3 – образец с обработкой в ПМП; №4 – образец после закалки; №8 – исходный образец

Нанотвердость образцов является многофакторной величиной: она зависит от состава и микроструктуры сплава, микротвердости отдельных структурных составляющих и состояния интерфейсов, границ зерен, их удельной поверхностной энергии на границах раздела и др. [4].

Список литературы

1. Осинская Ю.В., Покоев А.В.: Физика и химия обработки материалов, 2003, № 3, с. 18.
2. Головин Ю.И. Наноиндентирование и его возможности. М.: Машиностроение, 2009. 312 с.
3. Молоцкий М.И.: Физика твердого тела, 1991, т. 33, № 10, с. 3112.
4. Pokoev A.V., Osinskaya J.V.: Defect and Diffusion Forum, 2018, v. 383, p. 180.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.167

EFFECT OF THERMAL STABILITY UNDER VACUUM CONDITIONS OF Sr-DOPED PEROVSKITE $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_{3+\delta}$ STUDIED BY *IN SITU* XRD ANALYSIS

Pchelina D.I.[a]*, Sedykh V.D.[b], Rybchenko O.G.[b], Fraisse B.[c], Sougrati M.T.[c]

[a*]*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia,* di.pchelina@physics.msu.ru
[b]*Institute of Solid State Physics, RAS, Chernogolovka, Russia*
[c]*ICGM, CNRS, ENSCM, Montpellier, France*

Lanthanum manganites of nonstoichiometric composition $La_{1-x}A_xMnO_{3+\delta}$ doped with bivalent alkaline earth metal ion *A* have considerable emphasis in the physics of strongly correlated systems. Aliovalent substitution of A^{2+} for La^{3+} induces formation of holes in the structure, which affect electron and oxide ion transport. For Sr-doped systems, it is the key for them to be applied widely as solid oxide fuel cell cathode, selective oxygen transport membranes and sensors in fuel systems [1-3], in the production of hydrogen with solar energy [4], for creation of temperature stabilizing coatings [5] due to the high diffusion of oxygen ions and high electrical conductivity. In various technological processes, it is necessary to know how is stable its structure under external influences, including high temperatures.

Here temperature dynamics processes in the structure, the thermal stability and structure tendency behavior of $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_{3+\delta}$ by comprehensive characterization techniques including *in situ* high temperature X-ray diffraction (150 – 650^{0}C) were investigated. Two series of high-temperature X-ray diffraction *in situ* measurements under vacuum of doped lanthanum manganite $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_{3+\delta}$ were performed: temperature step-by-step and time step-by-step.

Sr-doped lanthanum manganite $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_{3+\delta}$ powder was obtained by sol-gel method. The synthesized powder is single-phase and has a rhombohedral structure (*R-3c* space group). *In situ* XRD results showed that heating under vacuum does not lead to a structure change; it remains rhombohedral. However, with an increase of temperature, the lattice parameters increase, reflecting a decrease of interstitial oxygen fraction. In addition, rhombohedral angle α decreases, which indicates that the lattice tends to cubic.

Comparison of the studied sample with the $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ of stoichiometric composition has been carried out. The $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ without interstitial oxygen earlier prepared under annealing in vacuum (10^{-3} Torr) with using special conditions was measured at 25^{0}C in air. Thermal stability of the material under heating and vacuum, which did not lead to the expected phase transition, revealed. The necessary conditions for obtaining oxygen stoichiometry are given in work. The data obtained can be useful in the applied field in technological processes, when it is necessary for the structure of the material to be stable in a certain temperature range.

Acknowledgments.
The work was funded by RFBR, project number 19-32-90222.

K. Huang, J. Wan, J.B. Goodenough // J. Mater. Sci. 36 (2001) 1093–1098.
S.P. Jiang // J. Mater. Sci. 43 (2008) 6799–6833.
E.D. Wachsman, S.C. Singhal // Am. Ceram. Soc. Bull., 89 (2010) 22– 32.
N. Gokon, K. Hara, Y. Sugiyama, S. Bellan, T. Kodama, C. Hyun-seok // Thermochimica Acta 680 (2019) 178374.
M.M. Mikhailov, V.A. Vlasov, T.A. Utebekov, A.N. Sokolovskiy, A.A. Lovizkii, A.E. Smolin // Mater. Res. Bull. 89 (2017) 154–160.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.168

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ ОБРАЗЦЫ СОСТАВА $Bi_{1-x}La_xFeO_3$

Гаджимагомедов С.Х.[1*], Рабаданова А.Э.[1], Алиханов Н.М.-Р.[1,2], Палчаев Д.К.[1], Эмиров Р.М.[1], Мурлиева Ж.Х.[1], Гаджиев М.Х.[3], Сайпулаев П.М.[1], Ильичев М.В.[1]

[1]*Дагестанский государственный университет,*

[2]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

[3]*Объединенный институт высоких температур, Москва, Россия,* [*]darkusch@mail.ru

Наиболее изученным мультиферроиком является соединение на основе $BiFeO_3$ с ромбоэдрически искаженной структурой перовскита типа ABO_3, проявляющее при комнатной температуре свойства: сегнетоэлектричество (с температурой Кюри ~ 1103 K) и антиферромагнетизм G-типа (с температурой Нееля ~ 643 K). Однако возникающая в нем спиновая структура с периодичностью 62 нм препятствует проявлению линейного магнитоэлектрического эффекта и соответственно ограничивает его практическое применение. Для улучшения ферромагнитных и сегнетоэлектрических свойств предпринимается попытки одинарных или двойных замещений позиций A и B [1,2].

В работе изготовлены наноструктурированные керамические образцы (диаметром ~ 6 мм и толщиной ~ 1 мм) на основе $BiFeO_3$ при замещениях Bi на La (от 0 до 20%) из нанопорошков того же состава. Нанопорошки изготавливались золь-гель методом согласно рекомендациям [3,4]. Термообработка исходных порошков осуществлялась при температуре ~450°C в течение 30 мин, а спекание керамик осуществлялось уже при температуре ~600°C.

Исследованиями структуры установлено, что керамика $BiFeO_3$ содержит менее 5% примесных фаз ($Bi_2Fe_4O_9$ и $Bi_{25}FeO_{39}$), количество которых уже при 5% замещении La уменьшается до нуля.

Обнаружен ряд аномалий диэлектрической проницаемости $\varepsilon'(T)$ для всех керамик, характерные для таких систем, явно выраженные из которых приходятся на температурные интервалы: от ~ 100°C до ~ 200°C, от ~ 260°C до ~ 320°C и от ~ 330°C до ~ 350°C. Максимальное значение ε'_{max} для образца $Bi_{0.9}Fe_{0.1}O_3$ при ~ 315°C составляет ~ 1820, что в ~ 15 раз выше, чем у образца $BiFeO_3$.Установлено, что с увеличением температуры от ~ 270°C до ~ 300°C для легированных образцов величина ε' значительно возрастает. Наблюдаемый в окрестности от ~ 260°C до ~ 320°C резкий скачок ε' с ростом концентрации лантана смещается в область высоких температур.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-08-00242А, частично ГЗ FZNZ-2020-0002 и проектом «УМНИК» 14057ГУ/2019.

Morozovska A. N., Eliseev E. A., Chen D., Nelson C. T., Kalinin S. V. // Physical Review B. – 2019. – T. 99. – №. 19. – C. 195440.

Lisnevskaya I.V., Myagkaya K.V., Butova V.V., Shapovalov V.V., Rusalev Y.V., Zahran H.Y., Yahia I.S., Soldatov A.V. // Ceramics International. – 2020. – T. 46. – №. 5. – C. 6333-6341.

Алиханов Н.М., Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х. и др. // Патент № 2641203 от 16.01.2018.

Садыков С.А., Палчаев Д.К., Мурлиева Ж.Х., Алиханов Н.М.-Р. и др. // Физика твердого тела. 2017. Том 59, №. 9, С. 174- 175.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.169

СИНТЕТИЧЕСКИЙ БРУНОГАЙЕРИТ (Fe_2GeO_4): СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Сеткова Т.В.[a]., Спивак А.В.[a], Балицкий В.С.[a], Искрина А.В.[a,b], Захарченко Е.С. [a,c], Воронин М.В.[a], Сипавина Л.В.[a], Кузьмин А.В.[c], Хасанов С.С.[c]

[a] *Институт экспериментальной минералогии имени академика Д.С.Коржинского РАН, г.Черноголовка, Россия, setkova@iem.ac.ru*
[b] *Геологический факультет, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, г.Москва, Россия*
[c] *Институт физики твердого тела РАН, г.Черноголовка. Россия*

Бруногайерит редкий минерал, германат железа $(Fe^{2+})_2Ge^{4+}O_4$, со структурным типом шпинели. Германаты часто используются в качестве структурных аналогов силикатных фаз высокого давления, поскольку они позволяют изучать фазовые превращения и структурное поведение при давлениях, которые более доступны экспериментально, чем для соответствующих силикатных систем. Цель настоящей работы синтезировать бруногайерит - аналог высокобарного аренсита γ-Fe_2SiO_4 [1] и провести спектроскопические исследования новообразованной фазы.

Синтетические кристаллы бруногайерита размером до 500 мкм были получены в автоклаве в результате взаимодействия раствора борной кислоты на металлическую железную проволоку в присутствии оксида германия (GeO_2) при температуре 600 °C и давлении 100 МПа. Полученная фаза $(Fe^{2+})_2Ge^{4+}O_4$ ($Fd\bar{3}m$) имеет структуру шпинели с параметрами элементарной ячейки a = 8.3783(6) Å, b = 8.3783(6) Å, c = 8.3783(6) Å, V = 588.12(13) Å^3, что согласуется со структурными данными для природного бруногайерита [2]. Мессбауэровский спектр синтетического бруногейерита состоит из симметричного дублета с параметрами IS = 1,104 (1) мм/с и QS = 2,845 (1) мм/с, что соответствует октаэдрическому положению ионов железа ($^{[VI]}Fe^{2+}$). Это еще одно подтверждение того, что синтетический кристалл бруногейерита принимает нормальную структуру шпинели.

Для оксидных шпинелей допустимы только пять комбинационно-активных форм колебаний со следующими симметриями A_{1g} + Eg + $3F_{2g}$. Полученные спектры КР синтетического кристалла бруногейерита состоят из основной интенсивной полосы при 756 см$^{-1}$. Остальные второстепенные полосы видны около ~ 644, 302 и ~ 205 см$^{-1}$. Самый сильный пик ~ 756 см$^{-1}$ был отнесен к моде A_{1g}, следующий ~ 644 см$^{-1}$ - к F_{2g} по аналогии с рингвудитом [3]. Эти полосы соответствуют симметричным и асимметричным валентным колебаниям тетраэдров GeO_4, как и SiO_4 в рингвудите γ-Mg_2SiO_4.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках государственных заданий АААА-А18-118020590140-7 и АААА-А18-118020590140-5 Института экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского Российской академии наук.

Ma C., Tschauner O., Beckett J.R., Liu Y., Rossman G.R., Sinogeikin S.V., Smith J.S., Taylor L.A.// Geochim. et Cosmoch. Acta. – 2016. – V. 184. – P. 240-256.
Welch M.D., Cooper M.A., Hawthorne F.C.// Mineral. Mag. – 2001. – V. 65. - № 3. – P. 441-444.
Chopelas A., Boehler R., Ko T.// Phys. Chem. Minerals. – 1994. – 21. –P. 351-359.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.170

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ НАНОСКОПИЯ МАТЕРИАЛОВ С ВНЕДРЁННЫМИ ПАРНЫМИ ИЗЛУЧАТЕЛЯМИ

Смирнова Е.А.[1,2,*], Лозинг[1,2] Н.А., Гладуш М.Г. [1]

[1] *Институт спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк, Россия*
[2] *НИУ Высшая Школа Экономики, г. Москва, Россия*
[*] *ksmirno@yandex.ru*

Одним из методов изучения материалов является флуоресцентная наноскопия [1], то есть восстановление структуры (динамики) материала через регистрацию флуоресцентного сигнала от внедренных в образец оптически активных частиц. В качестве зондов могут выступать одиночные квантовые излучатели, а также их небольшие ансамбли, испускаемый ими свет, содержит богатую информацию о локальном окружении. Простейший ансамбль – это парный излучатель. В такой системе реализуются суб- и сверхизлучательные кооперативные состояния, впервые описанные Дике. Характер излучения парной системы крайне чувствителен к геометрии возбуждения, расположению излучателей в паре и к разности их индивидуальных свойств. В отличии от других теоретических работ [2], в данной не накладывается ограничение на геометрию задачи, учтена неидентичность излучателей. Кроме того, взаимодействие между излучателями не вводится феноменологически, а выводится методом Боголюбовских цепочек.

Данная работа посвящена расчётно-теоретическому анализу взаимодействия между двумя близко расположенными (меньше половины длины волны изучения) и неидентичными квантовыми излучателями. Расчеты производились для пар модельных двухуровневых и трехуровневых (V-схема) излучателей. Учтены различия в частотах переходов и дипольных моментов переходов у излучателей в паре. Получено управляющее уравнение для кооперативной матрицы плотности, учитывающее взаимодействие с лазерной волной и переходы под действием некогерентного поля. Вычислена новая поправка в управляющем уравнении, которая позволяет учитывать эффекты перерассеяния фотонов. Рассчитаны спектры возбуждения фотолюминесценции как зависимости полной интенсивности излучения от частоты возбуждающего непрерывного лазера для различных мощностей и геометрий возбуждения и детектирования. Показана возможность наблюдения миграции положений максимумов спектра возбуждения, которая происходит за счет вращения линейной поляризации возбуждающего пучка. Расчетные спектры находятся в соответствии со спектрами, полученными экспериментально для пары молекул терилена при температуре 1.4 K [3].

Проект был выполнен при поддержке гранта РФФИ 19-02-00991 А

Наумов, А.В. // УФН. – 2013. – 183.6. – 633-652
Rudolph T.G., Ficek Z., Dalton B.J. // Phys. Rev. A. – 1995. – 52
Hettich C., Schmitt C., Zitzmann J., Kuhn S., Gerhardt I., Sandoghdar V. // Science. – 2002.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.171

СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛОВ БОРАТА ЖЕЛЕЗА $FeBO_3$ В ОБЛАСТИ МАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Смирнова Е.С., Снегирев Н.И., Старчиков С.С., Алексеева О.А., Любутин И.С.

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, esmi@ns.crys.ras.ru

Благодаря сочетанию магнитных, магнитоакустических, магнитоооптических свойств кристаллы $FeBO_3$ представляют интерес для применения в различных высокотехнологичных отраслях. Плоскопараллельные монокристаллы $FeBO_3$ используются в мёссбауэровской спектроскопии как монохроматоры при ядерном резонансном рассеянии синхротронного излучения, а также могут быть использованы в качестве магнитооптических преобразователей [1].

В настоящей работе структура монокристаллов $FeBO_3$ исследовалась методом рентгеноструктурного анализа и методом мёссбауэровской спектроскопии в области магнитного фазового перехода $T_N \approx 348$ K [2]. Исследованные образцы были синтезированы в Лаборатории роста кристаллов КФУ им. В.И. Вернадского по методике, разработанной в [1]. Полные массивы рентгенодифракционных данных получены в интервале температур 293 – 403 K с шагом 10 K на дифрактометре Rigaku XtaLAB Synergy-DW (MoKα-излучение) с детектором Rigaku HyPix Arc 150° и температурной приставкой Cobra Plus. Гамма-резонансные спектры поглощения на ядрах ^{57}Fe получены на мёссбауэровском спектрометре MS-1104Em, оборудованном безжидкостным гелиевым криостатом замкнутого цикла RTI CryoFree-104.

В исследованном температурном диапазоне структура $FeBO_3$ принадлежит пр. гр. R-3c, Z=6. Резких флуктуаций структурных параметров вблизи T_N не обнаружено. Параметры элементарной ячейки увеличиваются с ростом температуры от a = 4.624(1) Å, c = 14.478(6) Å при 293 K до a = 4.627(1) Å, c = 14.500(6) Å при 403 K. Параметр c более чувствителен к изменению температуры. Структура $FeBO_3$ состоит из октаэдров FeO_6, соединенных вершинами между собой и с треугольниками BO_3. При увеличении температуры наблюдается рост расстояний Fe – O в октаэдре FeO_6, а расстояния B – O в треугольниках BO_3 и углы O–Fe–O не меняются. Температура Дебая, вычисленная на основе рентгеноструктурных данных для катионов в структуре FeO_6 по методике [3], составила T_D = 440(1) K для атомов Fe и T_D = 1063(4) K для атомов B. Итоговые факторы уточнения $R \leq 2.13$ %.

Величина константы квадрупольного взаимодействия в $FeBO_3$ уменьшается от -0.183(5) мм/с при 10 K до -0.1919 мм/с при 373 K. Монотонный характер этой зависимости подтверждает отсутствие скачкообразных изменений кристаллической структуры в $FeBO_3$. Значение мёссбауровской температуры Дебая, вычисленное на основе температурной зависимости величины изомерного сдвига, согласуется с данными рентгеноструктурного анализа и составляет $\theta_D \approx 450$ K.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016\20-мк, в части мёссбауэровских исследований. Рентгеноструктурный анализ проведен при поддержке Министерства науки и высшего образования с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

1. Yagupov S. et al. // Cryst. Growth Des. – 2018. – V. 18. – №. 12. – P. 7435.
2. Eibschütz M. et al. // J. Appl. Phys. – 1970. – V. 41. – № 3. – P. 1276.
3. Dudka A. P. et. al. // J. Appl. Crystallogr. – 2019. – V. 52. – №. 3. – P. 690.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.172

СТРУКТУРА СВЕРХРЕШЕТКИ CdF_2-CaF_2 НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Л.М. Сорокин, Р.Н. Кютт, В.В. Ратников, А.Е. Калмыков
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия,
E-mail: Lev.Sorokin@mail.ioffe.ru

Интерес к сверхрешеткам (СР) на основе фторидов кадмия и кальция обусловлен перспективой их использования для изготовления туннельных диодов и каскадных лазеров. Близость параметров кристаллических структур Cd_2F, Ca_2F и Si позволяет интегрировать СР CdF_2-CaF_2 в кремниевую технологию.

В данной работе методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской дифрактометрии исследована структура СР на основе гетероструктуры CdF_2 /CaF_2/Si(111).

СР была сформирована методом молекулярно-лучевой эпитаксии по технологии, описанной в [1]. Образцы для ПЭМ исследования представляли собой срезы {110}, приготовленные стандартным методом, включающем шлифовку и ионное травление. При этом принимались меры против воздействия паров воды на поверхность образцов. Изучение структуры производилось на электронном микроскопе JEM 4000 EX II с ускоряющим напряжением 400 kV и разрешением 0.17 nm.

ПЭМ исследование показало, что на поверхности кремниевой подложки сформировалась СР, состоящая из 28 слоев (CaF_2 + CdF_2) с кристаллической структурой псевдоморфной подложке. При этом кристаллическая решетка СР развернута на на 180° относительно подложки, что обусловлено, по-видимому, стремлением гетероструктуры снизить упругую энергию на границе между подложкой и СР. Средняя толщина одного слоя СР составляет 0,314 нм с неоднородностью до половины толщины слоя в перпендикулярном к подложке направлении и до 40 нм в латеральном направлении. Неоднородность обусловлена явлением фасетирования, характерном для короткопериодных СР.

Рентгенодифрактометрические измерения (геометрия Брэгга, рефлекс (111), Cu K альфа излучение) проводились как в интегральном, так и дифференциальном режимах для (ω - 2θ)- и ω- мод сканирования. Найдено, что уширение сателлитов дифракционной кривой связано, в основном, с латеральной неоднородностью СР. Найдено, что средний размер неоднородностей равен 24 нм и находится в пределах 10-40 нм, полученных методом ПЭМ. В работе впервые продемонстрирован подход к анализу короткопериодных СР, связанный с использованием функции Гаусса для подгонки рассчитанной кривой качания к измеренной в эксперименте.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-29-12041мк).

Авторы благодарят Н.С. Соколова за предоставленные образцы.

1. N.S. Sokolov, S.V. Gastev, A.Yu. Khilko, R.N. Kyutt, S.M. Suturin,M.V. Zamoryanskaya // Journal of Crystal Growth 201/202 (1999) 1053}1056

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.173

РОСТ ИЗ РАСТВОРОВ И СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ ЛИНЕЙНОНОГО ТИОФЕН-ФЕНИЛЕНОВОГО ОЛИГОМЕРА С ЦЕНТРАЛЬНЫМ БЕНЗОТИАДИАЗОЛЬНЫМ ФРАГМЕНТОМ И С КОНЦЕВЫМИ ТРИМЕТИЛСИЛИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Сорокин Т.А.[1], Кулишов А.А.[1], Лясникова М.С.[1], Сорокина Н.И.[1], Постников В.А.[1], Скоротецкий М.С.[2],Борщев О. В.[2]

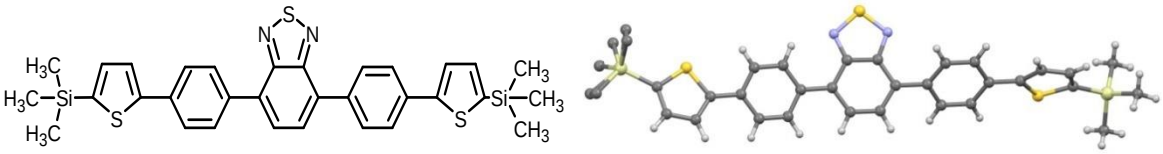
[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва*

[2]*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва,*

tim29@inbox.ru

Органические линейные сопряженные олигомеры в настоящее время играют важную роль в развитии органической оптоэлектроники, поскольку на их основе можно формировать с помощью различных методов роста качественные кристаллы с низким содержанием дефектов.

Настоящая работа посвящена исследованию роста из растворов и структуры кристаллов нового линейного π-сопряженного олигомера - 4,7-бис(4-(5-(триметилсилил)тиофен-2-ил)фенил)бензо[*c*][1,2,5]тиадиазола (**(TMS-T-Ph)$_2$-BTD**)(Рис.1а).



(а) (б)

Рис. 1. Структурная химическая формула(TMS-T-Ph)$_2$-BTD(а) и конформация молекулы вкристалле при 293 К, выращенном из раствора о-ксилола (б).

Монокристаллические образцы (TMS-T-Ph)$_2$-BTD впервые выращены из растворов методом диффузии осадителя в раствор через паровую фазу. В качестве растворителей использовались бензол, толуол, о-ксилол и хлорбензол, а в качестве осадителя – изопропанол. Период роста составлял от пяти до семи дней.

Полный дифракционный эксперимент для четырех монокристаллов, выращенных с разными растворителями, был получен на дифрактометрах Xcalibur S, который оборудован двумерным CCD-детектором, и XtaLABSynergy R, производства фирмы OxfordDifffraction. Рентгеноструктурный анализ, проведенный при температурах 293 К и 95К показал, что все исследуемые кристаллы имеют триклинную структуру и относятся к пр. гр. *P*-1. Установлено вхождение в структуру исследуемых кристаллов молекул растворителя бензола, толуола и хлорбензола. В кристаллах (TMS-T-Ph)$_2$-BTD, выращенных из раствора о-ксилола, при 293 К выявлен структурный беспорядок в расположении концевых -Si(CH$_3$)$_3$ групп (Рис.1б) и переход при понижении температуры от элементарной ячейки с параметрамиа=12.5626(1),b=14.4409(1), c=19.3253(2)Å к элементарной ячейке с параметрами: a=12.1869(1), b= 24.0121(1), c=33.8111(2)Å.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН с использованием научного оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов».

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.174

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ТИТАНА И НИКЕЛИДА ТИТАНА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

Токмачева-Колобова А.Ю.[1,2], Прокошкин С.Д. [2], Одинцова Г.В. [3], Манохин С.С. [1], Колобов Ю.Р. [1]

[1] *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

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

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

anastasiia.misis@gmail.com

В докладе представлены результаты исследования изменения структуры и фазового состава приповерхностных слоев технически чистого титана марки ВТ1-0 и никелида титана Ti-50,7% Ni в результате лазерного облучения импульсами наносекундной длительности под водой.

Для исследований были выбраны образцы титана в субмикрокристаллическом (средний размер элементов зеренно-субзеренной структуры ~200 нм) и крупнозернистом (средний размер зерен ~2 мкм) состояниях и никелида титана в крупнозернистом состоянии (средний размер зерен ~30 мкм) после обработки лазерным облучением с длительностью импульсов $\tau \approx 100$ нс и плотностью мощности энергии облучения $F=2*10^9$ ГВт/см^2 под слоем воды толщиной 2 мм.

Исследование микроструктуры указанных образцов проводили методами просвечивающей электронной микроскопии на тонких фольгах (ламелях), вырезанных из заданных точек на поверхности образца сфокусированным ионным пучком в направлении, перпендикулярном поверхности.

Обсуждаются особенности характерного для каждого из исследованных материалов измельчения исходной структуры в приповерхностном слое толщиной 1–2 мкм до наноразмерного масштаба в случае титана и аморфизации слоя толщиной ~250 нм, происходящей в никелиде титана.

Рассматриваются возможные механизмы наблюдаемого эффекта наноструктурирования тонкого приповерхностного слоя (толщиной ~1 мкм) в субмикрокристаллическом титане, связанные с фазовой перекристаллизацией или динамической рекристаллизацией.

Данная работа в основной части, связанной с изучением структурно-фазового состояния технического титана, проведена при финансовой поддержке Государственного задания, № госрегистрации АААА-А19-119100800130-0, а в части подготовки тонких фольг из заданных локальных участков образца за счет гранта Российского научного фонда № 19-12-00221.

Лазерное облучение проводили за счет финансовой поддержки Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Постановления Правительства РФ №218 от 09.04.2010 г. Соглашение №075-11-2019-066 от 22.11.2019, название проекта “Создание высокотехнологичного производства оборудования и технологий лазерного кодирования перемещаемых товаров и их оптической идентификации для реализации современных систем управления материальными потоками”.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.175

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗЛИЧИЙ КИНЕТИКИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНЫХ ЛЕНТ И МИКРОПРОВОДОВ СОСТАВА $Fe_{73,5}Cu_1Nb_3Si_{13,5}B_9$

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 твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия*

Сплав состава $Fe_{73,5}Cu_1Nb_3Si_{13,5}B_9$ – это высококачественный магнитомягкий материал, в аморфно-нанокристаллическом состоянии обладающий высокой магнитной проницаемостью (порядка 100000). Такое состояние материала достижимо путем кристаллизации исходного аморфного сплава посредством отжига при температуре 480-580 °C. Образующаяся при отжиге микроструктура состоит из нанокристаллической фазы твердого раствора кремния в железе α-Fe(Si) с размерами нанокристаллов 10-20 нм и остаточной аморфной матрицы.

В работах [1-2] показано, что приложение внешних механических напряжений к аморфному сплаву в процессе отжига может влиять не только на кристаллическую анизотропию материала, но и на скорость зарождения нанокристаллов. Известно, что для аморфных лент характерны малые значения внутренних напряжений, сохранившихся после их изготовления (десятки МПа). Для аморфных микропроводов, полученных методом Улитовского-Тейлора, характерна противоположная ситуация. В объеме микропровода наблюдается неоднородное распределение напряжений, причем их величина может варьироваться от сотен до тысяч единиц ГПа. Поверхностный слой микропроводов находится в поле сильных сжимающих напряжений, в центральной части сосредоточены растягивающие напряжения. Полученные методом Улитовского-Тейлора микропровода покрыты стеклянной оболочкой, которая также вносит изменения в напряженное состояние микропровода за счет разницы коэффициентов термического расширения металлической и стеклянной частей провода [3]. Такое различие в напряженном состоянии лент и микропроводов определяет перспективность сравнения кинетики кристаллизации в таких материалах.

В рамках данной работы была исследованы особенности кристаллизации аморфных лент и микропроводов состава $Fe_{73,5}Cu_1Nb_3Si_{13,5}B_9$. Методом рентгеноструктурного анализа изучены микропровода и ленты, отожженные при различных температурах (от 480 °C до 520 °C) и времени отжига. Установлено, что сжимающие напряжения в микропроводах приводят к увеличению скорости роста нанокристаллической фазы твердого раствора кремния в железе (рис.1). Проведен анализ относительного изменения скорости зарождения нанокристаллов при отжиге аморфных лент и микропроводов.

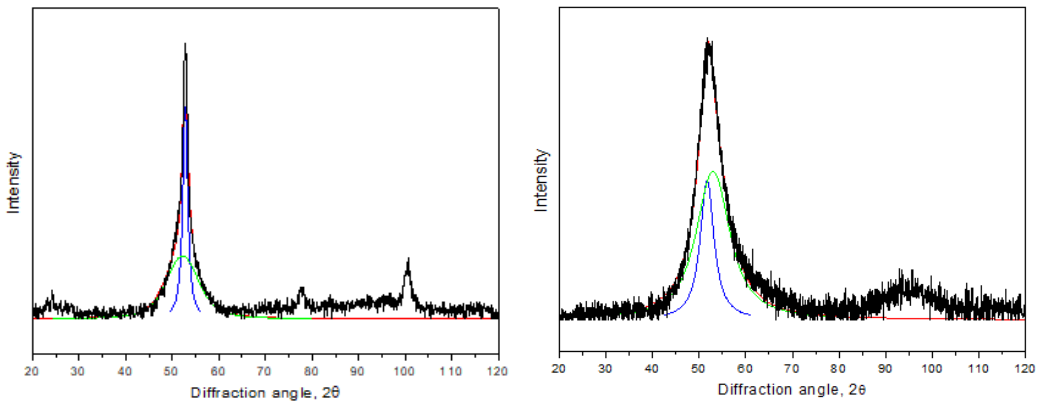


Рис. 1. Рентгенограммы микропровода (слева) и ленты (справа), отожженных при 480 °C в течение 1 часа, с соответствующими разложениями на кристаллическую и диффузную составляющие

Благодарности.
Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН при частичном финансировании РФФИ (проект 19-03-00355).

Yan Z., Song K., Hu Y., Dai F., Chu Z., Eckert J. // Sci. Rep. – 2016. – Vol. 6. – P. 19358.
Yavari A.R., Georgarakis K., Antonowicz J., Stoica M., Nishiyama N., Vaughan G., Chen M., Pons M. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol. 109. – P. 085501.
Aksenov O.I., Abrosimova G.E., Aronin A.S., Orlova N.N., Churyukanova M.N., Zhukova V.A., Zhukov A.P. // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 122. – P. 235103.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.176

Особенности диффузии Ni-(Fe+Cu)

Хайруллин А. Х., Родин А.О.

НИТУ МИСиС, Москва, Россия, aika-88@inbox.ru

В работе исследованы параметры диффузии в системе Ni-(Fe+Cu). Интерес к этой системе возник из-за ранее обнаруженного эффекта замедления зернограничной диффузии (ЗГД) в системах Fe-Cu и Co-Cu [1,2], при котором концентрационные профили, измеренные микрорентгенспекральным анализом (МРСА), по объему зерна и вблизи границы практически не отличаются.

Было предположенно, что причиной отсуствия опережающей ЗГД являются особенности взаимодействия этих элементов с границей зерна. В таком случае, предварительное легирование этими элементами должно привести к изменению подвижности атомов на границах зерен. Для выбранных систем хорошим маркером может являться никель, не имеющий особенностей во взаимодействии ни с медью, ни с железом.

Полученные результаты показывают, что при относительно высоких температурах диффузия никеля в меди, предварительно легированной железом практически не отличается от данных для чисто меди, в то время как понижение температуры до 650 С приводит к резкому замедлению ЗГД никеля и отличие становится заметным более чем в 20 раз.

1. Prokoshkina D.S, Esin V.A., Rodin A.O. AboutFe Diffusion in Cu // Defectand Diffusion Forum. – 2012. – 323-325. – P.171-176.
2 А.А. Ицкович, А.Х. Хайруллин, А.О. Родин // Научные ведомости БГУ им. Шухова – 2012 - №23(142) выпуск 29с.134

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.177

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ И АНАЛИЗ ФАЗ В ЯЧЕЙКЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ С АЛМАЗНЫМИ НАКОВАЛЬНЯМИ

Черткова Н.В.[1], Ефимченко В.С.[2], Спивак А.В.[1], Захарченко Е.С.[1,2], Литвин Ю.А.[1], Сафонов О.Г.[1], Мелетов К.П.[2], Бурова А.И.[3]

[1] *Институт экспериментальной минералогии им. Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия,* nadezda@iem.ac.ru
[2] *Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
[3] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Геологический факультет, г. Москва, Россия*

Ячейка с алмазными наковальнями является инновационным инструментом для изучения фазовых переходов, изменения структурных, физических и химических свойств материалов при высоких давлениях. Она совместима с целым рядом *in situ* аналитических методов исследования, включая оптическую спектроскопию, рентгеновские и нейтронные методы, а также спектроскопию ядерного магнитного резонанса [1-4].

В сотрудничестве с ИФТТ РАН спроектирована и введена в эксплуатацию установка высокого давления с алмазными наковальнями типа “piston-cylinder DAC”, оснащенная системой внешнего нагрева, для проведения оптических наблюдений и спектроскопических исследований образцов в условиях высоких давлений и температур. Во время экспериментов фотографии и видео фазовых переходов фиксируются цифровой камерой, подключенной к микроскопу, а анализ сосуществующих фаз выполняется с помощью спектрометра комбинационного рассеяния (КР), с фокусировкой лазерного пучка в заданной точке образца. Разработанная методика применена для исследования фазовых отношений в системе BH_3NH_3–SiO_2 при давлениях выше 2 ГПа.

Результаты проведенных испытаний показали, что предложенная методика КР измерений может быть успешно использована для анализа газообразных, жидких и твердых фаз в диапазоне давлений до 6.5 ГПа и температур до 600 °С. Конфигурация установки принципиально позволяет осуществлять регистрацию инфракрасных спектров образцов, а также проводить рентгеноструктурный анализ непосредственно при заданных экспериментальных параметрах.

Благодарности. Исследование выполнено при поддержке гранта № 20-77-00079 Российского научного фонда и частично в рамках государственного задания АААА-А18-118020590140-7 ИЭМ РАН.

Bassett W.A. // Diamond anvil cell, 50th birthday. High Pressure Research. – 2009. – Т. 29. – № 2. – С. 163-186.
Besedin S.P., Makarenko I.N., Stishov S.M., Glazkov V.P., Goncharenko I.N., Somenkov V.A. // Diamond anvil cells for neutron diffraction. International Journal of High Pressure Research. – 1995. – Т. 14. – № 1-3. – С. 193-197.
Kantor I., Prakapenka V., Kantor A., Dera P., Kurnosov A., Sinogeikin S., Dubrovinskaia N., Dubrovinsky L. // BX90: A new diamond anvil cell design for X-ray diffraction and optical measurements. Review of Scientific Instruments. – 2012. – Т. 83. – № 12. – С. 125102.
Pravica M.G., Silvera I.F. // Nuclear magnetic resonance in a diamond anvil cell at very high pressures. Review of scientific instruments. – 1998. – Т. 69. – № 2. – С. 479-484.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.178

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНТРОПИИ И КИНЕТИКИ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ TINI

Чуракова А.А.[1,2], Каюмова Э.М.[3]

[1]Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН
[2]Уфимский государственный авиационный технический университет
[3]Уфимский государственный нефтяной технологический университет

churakovaa_a@mail.ru

Сплавы с памятью формы широко используются в качестве актюаторов из-за их способности восстанавливать деформации и создавать напряжения при нагревании предварительно деформированных образцов [1,2]. Они обладают уникальным набором свойств - высокими значениями восстанавливаемой деформации и развиваемых напряжений, высокой коррозионной стойкостью, благодаря чему широко используются во многих отраслях промышленности и медицине [3-4]. Эффекты памяти формы, характерные для многих сплавов, могут быть вызваны: термоупругим мартенситным превращением [1,2], которое было открыто Курдюмовым и Хандросом в 1949 г. [3], кроме того, оно может быть вызвано гидростатическим давлением [5], ультразвуком [6], нейтронным облучением [7] или магнитным полем [8]. Параметры фазового превращения, несмотря на причину его возникновения, определяются из термодинамического баланса между изменением свободной энергии Гиббса (ΔG), упругой энергии (E_{el}) и диссипативной энергии (E_{dis}), иногда называемой «работой трения» [3,9]. Для определения скачка энтропии мартенситного превращения используются два основных подхода: по формулам [9-11,20] и через уравнение типа Клаузиуса - Клапейрона [14-16]. В то же время скачок энтропии может быть рассчитан из выражения, связывающего тепло, выделяющееся при прямом переходе, и термодинамические параметры, определяющие это превращение.

$$-Q^{A\to M} = -M_f \cdot \Delta S^{A\to M} \qquad (1)$$

Из выражения (1) скачок энтропии при мартенситном превращении можно определить как отношение количества тепла, выделяющегося при прямом мартенситном превращении, к температуре окончания прямого мартенситного превращения [18]:

$$\Delta S^{A\to M} = \frac{Q^{A\to M}}{M_f} \qquad (2)$$

В качестве материала исследования выбран двухкомпонентный сплав $Ti_{50.0}Ni_{50.0}$, при комнатной температуре имеет структуру B19'-моноклинного мартенсита, температуры превращения $M_н$ = 63 °C, $M_к$ = 40 °C, $A_н$ = 94 °C, $A_к$ = 110 °C. Для образования твердого раствора на основе TiNi и исключения предыстории получения материала сплав закаливали из области гомогенности (от 800 °C) в воду. Средний размер зерна закаленного сплава составлял 200 мкм. Для проведения РКУП использовалось оборудование конструкции УГАТУ в изотермическом режиме. Для формирования УМЗ структуры закаленный цилиндрический сплав TiNi был подвергнут 8 циклам по маршруту Вс при температурах 400 °C [21].

Таблица 1 - Термодинамические параметры сплава в различных состояниях *

Состояние	Q_{dir}, J/g	Q_{rev}, J/g	$\Delta S^{A\to M}$, J/(g*K)	$\Delta E_{el}^{A\to M}$, J/(g*K)	$\Delta E_{el}^{M\to A}$, J/(g*K)	ΔE_{el}^{d}, J/(g*K)	$\Delta H^{A\to M}$, J/g	E_{dis}, J/g
КЗ	34,4	-35,3	0,1090	2,474	1,744	0	39,207	2,539
КЗ + ТЦ (n=100)	32,8	-33,9	0,1046	2,291	1,14	0,371	37,253	2,233
УМЗ	33,8	-31,9	0,1095	1,664	2,244	0(1,713)	37,694	2,250
УМЗ + ТЦ (n=100)	33,0	-31,6	0,1075	1,72	1,623	0,043	37,031	2,295

* Погрешность определения теплоты превращения составляет ± 0,5 Дж / г.

В КЗ и УМЗ состояниях при термоциклировании с увеличением числа циклов до 50 температуры окончания прямого мартенситного превращения $M_к$ снижаются. При этом в состоянии КЗ температура начала превращения $M_н$ снижается на несколько градусов (10 °C), в то время как в УМЗ она остается стабильной. При последующем увеличении количества циклов n>50 наблюдается стадия повышения температур мартенситных превращений. Согласно полученным расчетам, изменение диссипативной энергии определяет изменение гистерезиса превращений в КЗ и УМЗ состояниях. Следует отметить, что УМЗ состояние характеризуется большим увеличением упругой энергии мартенситных пластин.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 20-72-00075).

1. K. Otsuka, X. Ren // Prog. Mater. Sci. 50 (2005) 511–678.
2. V. Brailovski, S. Prokoshkin, P. Terriault, F. Trochu, Shape Memory Alloys: Fundamental, Modeling and Applications, Ecole de Technologie Superieure, Quebec, 2003.
3. G.V. Kurdyumov, L.G. Khandros // Sov. Phys. Dokl. 66 (1949) 211–214.
4. J.W. Christian, The Theory of Transformations in Metals and Alloys, Elsevier Science, Oxford, 2002.
5. Z.L. Xie, B. Sundqvist, H. Hanninen, J. Pietikainen // Acta Metall. Mater. 41 (1993) 2283–2290.
6. V.V. Rubanik, V.V. Klubovich, V.V. Rubanik Jr. // J. Phys. IV 112 (2003) 249–251.
7. S.P. Belyaev, R.F. Konopleva, I.V. Nazarkin, A.I. Razov, V.L. Solovei, V.A. Chekanov // Phys. Solid State 49 (2007) 1969–1972.
8. K. Inoue, K. Enami, Y. Yamaguchi, K. Ohoyama, Y. Morii, Y. Matsuoka, K. Inoue // J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 3485–3488.
9. R.J. Salzbrenner, M. Cohen // Acta Metall. 27 (1979) 739–748.
10. J. Ortin // Thermochimica Acta 121 (1987) 397–412.
11. J. Ortin, A. Planes // Acta Metall. 36 (1988) 1873–1889.
12. J. Ortin, A. Planes // Acta Metall. 37 (1989) 1433–1441.
13. P. Wollants, J.R. Roos, L. Delaey // Prog. Mater. Sci. 37 (1993) 227–288.
14. Y. Liu, P.G. McCormick // Proceedings of the International Conference on Martensitic Transformation (ICOMAT 92), Monterey Institute for Advanced Studies, Monterey (1993) 923–928.
15. Y. Liu, P.G. McCormick // Acta Metall. Mater. 42 (1994) 2401–2406.
16. Y. Liu, P.G. McCormick // Acta Metall. Mater. 42 (1994) 2407–2413.
17. D. Stroz, D. Chrobak // Mater. Trans. 52 (2011) 358–363.
18. N. Resnina, S. Belyaev // Therm. Acta. 602 (2015) 30–35.
19. T.W. Duerig, K.N. Melton, D. Stückel, C.M. Wayman., London: Butterworth-Heinemann, 1990.
20. A.Planes, J.L. Macqueron, J. Ortin // Phil. Mag. Letters. 57 (1988) 291–298.
21. A.A. Churakova, D.V. Gunderov, S.V. Dmitriev // Materialwissenschaft und Werkstofftechnik 49(6) (2018) 769-778.
22. A.A. Churakova, D.V. Gunderov // Acta Metallurgica Sinica (English Letters), 28(10) (2015) 1230–1237.
23. A. Churakova, D. Gunderov // Metals, 10(2) (2020) 227.

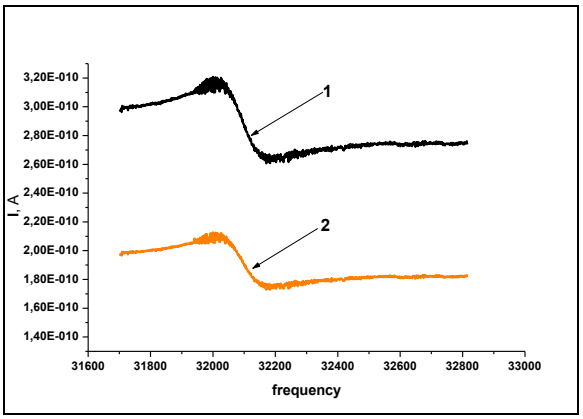
DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.179

ВЛИЯНИЕ ОСВЕЩЕНИЯ НА ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАРЦЕВЫХ РЕЗОНАТОРОВ

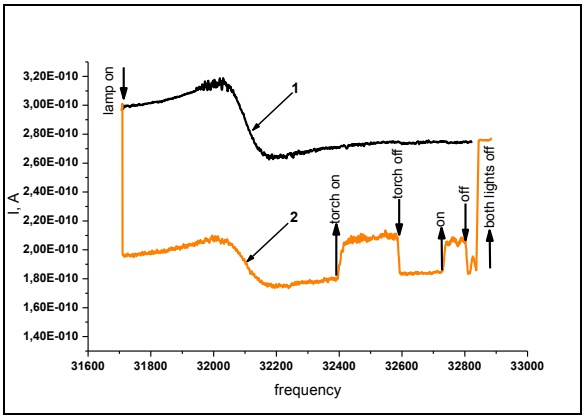
Шмытько И.М.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка, 142432, Московской обл., Россия,E-mail: shim@issp.ac.ru

Исследовано изменение пьезоэлектрических характеристик кварцевых резонаторов в виде камертона с изгибной модой колебаний, испытавших сначала предварительную тренировку повышенным трением от внешней среды, а затем воздействие света разного спектрального состава и разной интенсивности. Воздействие внешнего трения приводило к значительному падению добротности резонатора, резонансной частоты и полуширины резонансной кривой. Последующее освещение такого резонатора от лампы накаливания приводило к изменению пьезоэлектрических характеристик резонатора, зависящему от интенсивности освещения резонатора. Так освещение от настольной лампы, размещенной на расстоянии 70 см. от резонатора и обеспечивающей среднюю освещенность камертона ~ 720 лк приводило к падению тока смещения резонатора приблизительно на 33%, см. рис.1(a). Дополнительные эпизодические освещения высокой интенсивности от карманного фонарика «Energizer X-Focus X215 AA» с криптоновой лампочкой накаливания усиленной мощности, расположенного на расстоянии ~ 15 см. от резонатора и обеспечивающей среднюю освещенность камертона ~ 6670 лк, приводило к практическому восстановлению тока смещения резонатора – эффект гашения, см. рис.1(b). Сделано предположение, что обнаруженный эффект изменения резонансных характеристик кварцевых резонаторов в виде камертона с изгибной модой колебаний под действием освещения является проявлением хорошо известного фотопластического эффекта и его гашения в зависимости от частоты и интенсивности воздействующего света.



(a)



(b)

Рис.1. (a) - резонансные кривые на воздухе тренированного кварцевого резонатора после смыва капли глицерина с плеч камертона: (1) - спектр резонатора темноте, (2) - спектр резонатора под действием света от настольной лампы; (b) - (1) - спектр резонатора темноте, (2) - спектр резонатора под действием света от настольной лампы и сфокусированного света от карманного фонарика.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.180

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ОПТИЧЕСКОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКИ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Шовкун А.Д., Шевчун А.Ф., Шовкун Д.В., Барковский Н.В.

Институт Физики Твердого Тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, afsharov@gmail.com

Достоверные фундаментальные исследования сверхпроводимости зачастую чувствительны к качеству исследуемых материалов. Используемый нами метод оптической зонной плавки (TSFZ-travelling-solvent floating zone) позволяет получить высококачественные монокристаллы без посторонних примесей, что бывает невозможно при использовании других технологий.

В этой работе мы приводим описание процедуры роста монокристаллов нескольких семейств сверхпроводников – висмутовых высокотемпертурных сверхпроводников с допированием лантаном $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$, и сверхпроводника с необычной p-сверхпроводимостью Sr_2RuO_4. Также будут приведены поисковые параметры синтеза TSFZ-методом иттриевых высокотемпературных сверхпроводников *YBCO*, которые не привели к образованию монокристаллов.

Процедура получения монокристаллов состоит из нескольких общих шагов [1, 2]. Первый шаг - смесь необходимых оксидов и карбонатов, взятых в стехиометрических количествах, отжигается при температурах до 850 °C. Проходит твердофазная реакция, ведущая к образованию нужного нам поликристаллического сложного оксида. Затем из полученного порошка с помощью гидравлического пресса получают стержни длиной порядка 5-10 см. Второй шаг - эти стержни отжигают на воздухе при температуре до 940 °C, а затем проплавляют в установке TSFZ на 4-х 500W лампах при мощности от 20 % до 95 % со скоростью 20-30 мм/ч в атмосфере кислорода. Третий шаг - непосредственно рост монокристалла проводится на мощности от 20 % до 95 % в атмосфере кислорода со скоростью 0.1 мм/ч непрерывно в течение нескольких дней. В результате получается шихта, которая при раскалывании рассыпается на монокристаллы размером до нескольких мм. Для гомогенизации уровня допирования по кристаллу часто требуется дополнительный отжиг.

Для синтезированных монокристаллов были проведены измерения температурной зависимости динамической магнитной восприимчивости на частоте 100 kHz, которые позволили определить температуру сверхпроводящего перехода и его ширину.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН.

4. Кулаков А.Б., Шовкун Д.В., Трунин М.Р. ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В SrO-ПЛОСКОСТЯХ НА T_C(X)-ЗАВИСИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$ // НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ – 2019. – Т. 55. – № 12. – С. 1319-1326.
5. Kunihiko Oka, Toshimitsu Ito Crystal growth of REBa2Cu3O7-y and ambient atmosphere // Physica C: Superconductivity – 1994. – Т. 235-240. – № 1. – С. 355-356

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.181

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ОТЖИГЕ ПОСЛЕ БОЛЬШОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ТЕХНИЧЕСКИ ЧИСТОГО ТИТАНА

Шурыгина Н. А.[1], Глезер А. М.[1,2], Дьяконов Д. Л.[1], Сундеев Р. В.[1,3]

[1] ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, Россия, shnadya@yandex.ru
[2] ФГАОУ ВПО «НИТУ «МИСиС»», Москва, Россия
[3] ФГБОУ ВО «РТУ МИРЭА», Москва, Россия

Данная работа посвящена анализу влияния отжига после деформации кручением при высоком квазигидростатическом давлении (КВД) в камере Бриджмена на структуру и механические характеристики технически чистого титана марки ВТ1-0.

В качестве материала для исследования был выбран технически чистый титан ВТ1-0 (α-фаза). Образцы в исходном состоянии представляли собой пластины толщиной 200 мкм, которые были отожжены при 800 ºС в течении 3 часов. В исходном состоянии материал имел равноосную структуру зерен со средним размером ≈ 150 мкм. Затем образцы были подвергнуты КВД (P = 6 ГПа) в камере Бриджмена при комнатной температуре со скоростью вращения и при числе полных оборотов подвижного бойка 1 об/мин и N = 1/4; 1/2; 1; 2; 3 и 4 соответственно. После КВД был проведен отжиг в вакуумной печи при температурах 100 – 500 °С в течение 30 минут.

По результатам рентгеноструктурного анализа было установлено, что в исходном состоянии материал имеет однофазную структуру α-Ti. После КВД обнаружено появление пиков, соответствующих линиям гексагональной ω-фазы титана: ω-фаза появляется уже при N = ¼ в количестве V_ω = 0.08 и ее относительный объем плавно увеличивается с увеличением N до V_ω = 0.23 (N = 4). Исследована термическая стабильность ω-фазы высокого давления, образующейся при КВД в технически чистом титане. При отжиге ω-фаза сохраняется в материале при температурах отжига 100 и 200 °С, при температурах выше 250 °С ω-фазы в материале не наблюдается. Таким образом, установлено, что обратный фазовый переход ω→α реализуется при отжиге выше 250 ºС.

С использованием просвечивающей электронной микроскопии установлено, что значительные изменения в структуре происходят после отжига при 350 – 500 ºС: наблюдается резкое возрастание доли рекристаллизованных зерен и снижение доли деформационных фрагментов, что соответствует протеканию первичной рекристаллизации. При этом резко возрастает значение среднего размера рекристаллизованных зерен $D_{РЗ}$ от ≈ 120 нм до 380 нм, изменений в размерах деформационных фрагментов в процессе отжига практически не наблюдается.

Показано, что с увеличением температуры отжига микротвердость плавно уменьшается для всех режимов деформации. Значительное снижение микротвердости при низких температурах отжига 100 – 300 ºС обусловлено, скорее всего, процессами релаксации упругих искажений, возникших при больших пластических деформациях. При отжиге выше 300 ºС значения микротвердости после всех режимов деформации практически совпадают и продолжают снижаться. За это, вероятнее всего, ответственны процессы первичной рекристаллизации, которые приводят к увеличению размера и доли рекристаллизованных зерен.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.182

DI-N-HEXYL-PARA-QUATERPHENYL CRYSTAL FILMS

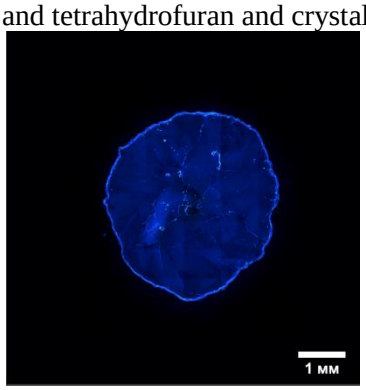
Г.А. Юрасик[1], А.А. Кулишов[1], М.С. Лясникова[1], О.В. Борщев[2], Е. А. Свидченко[2], Н.М. Сурин[2], П.В. Лебедев-Степанов[1], В.А. Постников[1]

[1]*ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, 119421, Москва, Россия,*
yurasik.georgy@yandex.ru

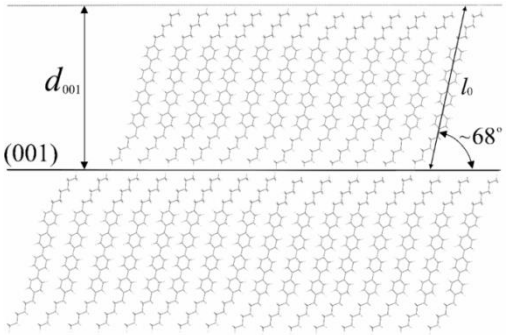
[2]*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, 117393, Москва, Россия*

Linear π-conjugated semiconductor oligomers are of great interest in organic electronics due to their ability to form large single crystal plates or ultrathin crystals consisting of one or more molecular layers. P-quaterphenyl (4P) is a promising highly stable π-conjugated oligomer with blue fluorescence and a high quantum yield. It was shown that thin crystalline films 4P with a length of several mm are capable of forming with a slow evaporation of solution droplets on the substrates [1]. However, the presence of a large conjugated rigid core in 4P leads to its low solubility, which plays a key role in highly efficient solution growth methods of thin organic crystals. It is known, that the derivatives end-capped with alkyl groups have significantly increased solubility [2].

The report presents the results of studies of growth from solutions, structure and spectral-luminescent properties of crystalline films of para-quaterphenyl derivative with terminal n-hexyl substituents – di-n-hexyl-para-quaterphenyl (**Hex-4P-Hex**). Diffraction studies of single-crystal films structure were carried out on a Miniflex 600 X-ray diffractometer (Rigaku). It was found that the crystalline Hex-4P-Hex films, as well as the crystals of unsubstituted 4P, are prone to formation of the stack of parallel monomolecular layers (in (001) orientation) with thickness d_{001} = 3.05 nm at the air-liquid interface. The elementary growth steps on smooth areas of the Hex-4P-Hex crystalline film surface found with the AFM method, the height of the steps corresponds to the thickness of the monolayer d_{001}. The absorption and photoluminescence spectra of Hex-4P-Hex solutions in *n*-hexane, toluene and tetrahydrofuran and crystalline samples are studied.



(a)



(b)

Fig. 1. (a) Luminescent image of a Hex-4P-Hex crystalline film formed on a substrate as a result of trichlorobenzene solution drop drying. (b) Schematic model representation of the crystal structure.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН с использованием научного оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов». Синтез, наработка материала и регистрация спектров поглощения и люминесценции выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 0086-2019-0006) с использованием научного оборудования ЦКП «Центр исследования полимеров» ИСПМ РАН.

1. Юрасик Г.А., Кулишов А.А., Лебедев-Степанов П.В., Борщев О.В., Постников В.А. // Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. иссл. – 2021. – № 2. С. – 78-87. DOI: 10.31857/S1028096021020163
2. Постников В.А., Кулишов А.А., Лясникова М.С., Гребенев В.В., Скоротецкий М.С., Борщев О.В., Пономаренко С.А. // Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. иссл. 2020. № 6. С. 10 – 13. DOI: 10.31857/S1028096020060187

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.183

ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ПОКРЫТИЙ ИЗ МОЛИБДЕНОВЫХ СПЛАВОВ НА ТИТАНОВЫХ ОСНОВАХ МЕТОДАМИ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ СВС-МЕТАЛЛУРГИИ

Юхвид В.И., Вдовин Ю.С., Андреев Д.Е.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, yukh@ism.ac.ru

Для наплавки сплавов Mo–Ni–Si–B на титановые основы методом центробежной СВС-металлургии, высокоэкзотермические смеси размещали в двуслойной постановке: нижний слой из смеси NiO/Al на поверхности титановой основы с последующим уплотнением, а сверху, вторым слоем, засыпали смесь MoO_3/Al/Si/B [1]. Смеси сжигали на центрифуге в режиме установившегося вращения под воздействием перегрузки. Центробежное воздействие позволяет осуществить гравитационную сепарацию расплава продуктов горения (сплава и оксида алюминия) и сформировать слой литого сплава на поверхности основы.

При общей массе смеси равной 100 г и перегрузке выше 40g удалось осуществить прочное сплавление слоя сплава толщиной 2,5 мм с титановой основой толщиной 10 мм и диаметром 40 мм. По данным спектральной электронной микроскопии было установлено, что в результате теплообмена «горячего» расплава продуктов горения с «холодной» основой происходило расплавление поверхностного слоя основы и его перемешивания с металлической фазой продуктов горения. После охлаждения и кристаллизация расплава наплавленный образец состоял из 3 зон: 1 – собственно покрытия из Mo–Ni–Ti–Si– B; 2 – переходной зоны, в которой концентрация Mo, Ni, Si и B падает до нуля, а концентрация Ti возрастает до 100%; 3 – титановой основы. Следует, отметить, что единственным источником титана в покрытии является титановая основа, а прочное соединение наплавленного слоя и титановой основы обеспечивает переходная зона.

С ростом перегрузки от 40 до 500g происходят заметные изменения химического, фазового состава и структуры покрытия (зона 1): содержание титана возрастает от 8 до 20 масс. %; в составе покрытия кроме твердого раствора на основе Mo и Ni формируются фазы Ni_3Ti и $NiTi_3$ и др.; увеличивается концентрация длинномерных дендритов.

1. Д.Е. Андреев, Ю.С. Вдовин, В.И. Юхвид, Н.В. Сачкова, Т.И. Игнатьева, И.Д. Ковалев. // Неорганические Материалы – 2020. Т. 56, № 12, С. 1336–1341.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.184

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ И АНАЛИЗ ФАЗ В ЯЧЕЙКЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ С АЛМАЗНЫМИ НАКОВАЛЬНЯМИ

Черткова Н.В.[1], Ефимченко В.С.[2], Спивак А.В.[1], Захарченко Е.С.[1,2], Литвин Ю.А.[1], Сафонов О.Г.[1], Мелетов К.П.[2], Бурова А.И.[3]

[1] *Институт экспериментальной минералогии им. Д.С. Коржинского РАН, г. Черноголовка, Россия,* nadezda@iem.ac.ru
[2] *Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
[3] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Геологический факультет, г. Москва, Россия*

Ячейка с алмазными наковальнями является инновационным инструментом для изучения фазовых переходов, изменения структурных, физических и химических свойств материалов при высоких давлениях, и совместима с целым рядом *in situ* аналитических методов исследования, включая оптическую спектроскопию, рентгеновские и нейтронные методы, а также спектроскопию ядерного магнитного резонанса [1-3].

В сотрудничестве с ИФТТ РАН осуществлена работа по проектированию и введению в эксплуатацию установки высокого давления с алмазными наковальнями типа “piston-cylinder DAC”, оснащенной системой внешнего нагрева, для проведения оптических наблюдений и спектроскопических исследований образцов в условиях высоких давлений и температур. Во время экспериментов фотографии и видео фазовых переходов снимаются на цифровую камеру, подключенную к микроскопу, а анализ сосуществующих фаз выполняется с помощью спектрометра комбинационного рассеяния (КР), с фокусировкой лазерного пучка в заданной точке образца. Разработанная методика впервые применена для исследования фазовых отношений в системе BH_3NH_3–SiO_2 при давлениях выше 2 ГПа.

Результаты проведенных испытаний показали, что предложенная методика КР измерений может быть успешно использована для анализа газообразных, жидких и твердых фаз в широком диапазоне давлений (до 6.5 ГПа) и температур (до 600 °C). Конфигурация установки принципиально позволяет осуществлять регистрацию инфракрасных спектров образцов, а также проводить рентгеноструктурный анализ непосредственно при заданных экспериментальных параметрах.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-77-00079) и частично в рамках государственного задания *АААА-А18-118020590140-7 Института экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского РАН.*

Bassett W.A. // Diamond anvil cell, 50th birthday. High Pressure Research. – 2009. – Т. 29. – № 2. – С. 163-186.
Besedin S.P., Makarenko I.N., Stishov S.M., Glazkov V.P., Goncharenko I.N., Somenkov V.A. // Diamond anvil cells for neutron diffraction. International Journal of High Pressure Research. – 1995. – Т. 14. – № 1-3. – С. 193-197.
Kantor I., Prakapenka V., Kantor A., Dera P., Kurnosov A., Sinogeikin S., Dubrovinskaia N., Dubrovinsky L. // BX90: A new diamond anvil cell design for X-ray diffraction and optical measurements. Review of Scientific Instruments. – 2012. – Т. 83. – № 12. – С. 125102.
Pravica M.G., Silvera I.F. // Nuclear magnetic resonance in a diamond anvil cell at very high pressures. Review of scientific instruments. – 1998. – Т. 69. – № 2. – С. 479-484.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.185

PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF OXYGEN-FREE GRAPHENE OBTAINED IN ORGANIC AND AQUA-ORGANIC MEDIA

Klimenko I.V.[1], Trusova E.A.[2], Afzal A.M.[2], Shchegolikhin A.N.[1], Jurina L.V.[1]

[1]Emanuel Institute of Biochemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, inna@deom.chph.ras.ru
[2]Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Among the new types of nanocarbon-based materials graphene and its derivatives attract huge interest when producing organic electronic devices for photovoltaics. Moreover, the unique properties of graphene such as high specific surface area, high electron mobility and optical transmittance due to its single-layer two-dimensional homogeneous structure formed from sp^2-hybridized carbon atoms bound with covalent bonds in regular hexagons with a length of 0.142 nm promote its use in such medical areas as photodynamic therapy (PDT) and diagnostics. However, to produce pure oxygen-free graphene used for biological and biomedical applications is a fundamental problem.

In this work, we demonstrate simple, but novel technique of oxygen-free graphene synthesis in liquid media [1,2]. Also, this study compares the morphology of graphene obtained by liquid phase ultrasonic exfoliation of graphene sheets from the surface of synthetic graphite in DMF and in its mixture with aqua as media.

Using TEM, dynamic light scattering, Raman, FTIR and optical spectroscopy methods and based on a comprehensive data analysis the presence of multilayer graphene in the resulting suspensions has been confirmed. The morphological features of graphene sheets obtained in two different media are described in detail. It was shown that the presence of aqua in the colloid leads to the predominant formation of three-dimensional graphene particles with larger linear dimensions than in pure DMF. Defectiveness of the graphene sheets obtained in pure DMF is significantly lower than in a mixture with aqua, while the edge defectiveness in both cases is rather low.

The mechanisms for the complexes formation including DMF, aqua, and graphene have been proposed. It was found that the optical properties of the suspensions depend on the liquid phase composition and are apparently determined by the nature of the interaction of graphene sheets with DMF and aqua molecules as well as the nature of the formed complex.

The work was carried out according to the state assignment of IBCP RAS (theme No. 01201253304) and government assignment no. 075-00328-21-00. Elena A. Trusova and Asya M. Afzal thank RFBR (grant no. 19-03-00554_a) for financial support of the research.

Trusova E.A., Kotsareva K.V., Kirichenko A.N., et al. // Adv. Mater. Sci. Eng. – 2018. – article ID 6026437. –P. – 11.

Klimenko I.V., Lobanov A.V., Trusova E.A., Shchegolikhin A.N. // Russ. J.of Phys. Chem. B. – 2018. – V. 13. – № 6. – P. 964-968.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.186

ГРАФИТАЦИЯ СТЕКЛОУГЛЕРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ СТУПЕНЧАТОГО УДАРНОГО СЖАТИЯ

Молодец А.М., Голышев А.А.

Институт проблем химической физики РАН,
г. Черноголовка, Россия, molodets@icp.ac.ru

Стеклоуглерод является одной из аморфных модификаций углерода. Исследования стеклоуглерода в области высоких давлений стимулируются возможностью получения новых углеродных структур за счёт необратимой sp2-sp3 гибридизации углеродных связей в стеклоуглероде при высоких давлениях и температурах. В последнее время в этом направлении выполнен ряд экспериментальных работ по разогретому до ~1000 К стеклоуглероду в условиях высоких статических давлений с использованием алмазных наковален. Так в [1] при высоких статических давлениях (~50 ГПа) и температурах (~1800 К) был синтезирован sp3 гибридизированный «аморфный алмаз», который сохранялся после снятия давлений и охлаждения до комнатных температур. Исследование структурных превращений стеклоуглерода при гигапаскальных давлениях ударного сжатия также представляют интерес, поскольку сильное ударное сжатие сопровождается значительным разогревом, что в итоге способствует возможным структурным превращениям стеклоуглерода при ударно-волновом нагружении. В данной работе с использованием техники [2] ступенчатого ударного сжатия и последующего сохранения образцов были исследованы структурные изменения первоначально порошкообразного стеклоуглерода Type I, состоящего из аморфных сферических частиц диаметром 200-400 мкм, производства Alfa Aesar. На Рис.1 показана вскрытая ампула сохранения, содержащая образец стеклоуглерода, испытавшего воздействие динамических давлений 60 ГПа. На Рис.2 показана дифрактограмма *1* исходного образца, содержащего «аморфные» гало (h_1, h_2) и дифрактограмма *2* этого же образца после взрывной обработки, содержащая новые «кристаллические» пики (*A*-*F*). Совместный анализ дифрактограмм *1* и *2* позволяет заключить, что ударно-волновое нагружение стеклоуглерода Type I до давлений 60 ГПа стимулирует его превращение в смесь аморфной составляющей с графитом и новой кристаллической фазой, ряд дифракционных рефлексов которой в области пиков *B, E, F* коррелируют с рефлексами гипотетической фазы алмаза R16 из [3]. В работе показано также, что графитация стеклоуглерода Type I начинается при давлениях ступенчатого ударного сжатия, превышающих 30-40 ГПа.

Рис.1

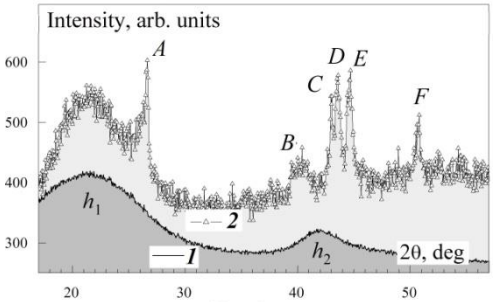


Рис.2

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-08-00237) с использованием оборудования АЦКП ИПХФ РАН и УНУ «Экспериментальный взрывной стенд»

Z. Zeng, et al., // Nature Communication.–2017. V.**8**, P.–322.
Молодец А.М., Голышев // ЖЭТФ. –2018. Т. 153.– вып. 6.– С. 930-938.
Zhen-Zhen Li et. al., // PRB.–2018. V.**98. P.** 094107

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.187

ОБРАЗОВАНИЕ КАРБИДОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ФУЛЛЕРЕНОВ С МЕТАЛЛАМИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Блантер М.С[1].,Борисова П.А[2].,Бражкин В.В[3].,Свиридова Т.А[4]., Филоненко В.П[3].

[1]МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия,
mike.blanter@gmail.com
[2]Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия,
borisovapa@mail.ru
[3] Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия,
brazhkin@hppi.troitsk.ru
[4] Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
tim-17@yandex.ru

В процессе механоактивации порошковых смесей фуллерена C_{60} с Fe [1] или с Ti [2] при комнатной температуре карбиды образуются после больших времен обработки, когда кристаллический фуллерен уже превратился в аморфную фазу. Однако в таких экспериментах невозможно разделить два фактора, определяющие образование: структуру углеродной фазы (кристаллический фуллерен или аморфная углеродная фаза) и длительность протекания процесса диффузии, достаточной для образования карбидов. Ранее мы показали [3], что при спекании при высоких давлениях 2-8 ГПа порошков кристаллических фуллеренов C_{60} или C_{70} с порошками Fe или Al существенно (на сотни градусов) повышается температура превращения фуллерена в разориентированный графит. В случае аморрфных фуллеренов такой эффект отсутствует и это дает возможность изучить образование карбидов при взаимодействие двух различных углеродных фаз - кристаллического фуллерена и полученного из него разориентированного графита-с металлами при одной и той же температуре и с одним времени выдержки. Такое исследование было проведено в настоящей работе.

Спекание порошков кристаллических и аморфных (полученных длительным помолом в шаровой мельнице при комнатной температуре) фуллеренов C_{60} и C_{70} с добавками металлов (7 ат,% Fe или Al по шихтовому составу) проводили в тороидальной камере высокого давления при давлении 2 и 8 ГПа и температурах 500-1100°C. Исследование структуры углеродных фаз (кристаллический фуллерен, аморфный фуллерен или разориентированный графит) и карбидов (Fe3C,Fe7C3 и Al_4C_3) проводили при комнатной температуре методом дифракции рентгеновских лучей. Было показано, что, за некоторым исключением, карбиды не образуются при взаимодействии Fe и Al с кристаллическими фуллеренами и образуются при взаимодействии с разориентированным графитом. Объяснение полученных результатов дается на базе известных представлений о повышении устойчивости молекул фуллерена при расположении внутри них атомов металлов, взаимодействующих с атомами углерода.

Работа поддержана РФФИ по гранту 19-02-00162.

Литература.

1.N.S.Larionova,R.M.Nikonova,A.L.Ul'yanov et al. J.All.Comp. 829 (2020) Art. no 154528.
2.Z.G.Liu,K.Tsuchiya,M.Umemoto. J.Mater.Sci.37 (2002) 1229-1235.
3.M.S. Blanter, P.A.Borisova, V.V.Brazhkin et al. Materials Letters 277 (2020) Art. no 128307.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.188

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ В ИК ДИАПАЗОНЕ СЛОЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК.

Сигалаев С.К., Бармин А.А., Сметюхова Т.Н., Ризаханов Р.Н., Матасов М.Д.

Государственный научный центр Российской Федерации – «Исследовательский центр имени М.В. Келдыша»,
г. Москва, Россия, matasov@kerc.msk.ru

Покрытия, представляющие собой слои углеродных нано трубок находят разнообразное применение в различных современных задачах науки и техники. В частности, в космической отрасли углеродные нанотрубки применяются для создания поверхности прибора Абсолютного Черного тела. Волокнистая структура покрытия из ориентированных нанотрубок провоцирует интенсивное поглощение падающего излучения, тем самым увеличивает коэффициент поглощения поверхности. Соответственно, знание спектра поглощения массива ориентированных нанотрубок представляет большой интерес для точного расчёта Бортового Черного тела.

Определение спектра поглощения в том или ином диапазоне определяется механизмами поглощения излучения. Для коротковолнового диапазона характерен корпускулярный механизм взаимодействия фотонов с материалом нанотрубок, для такого взаимодействия (поглощения, рассеяния) применимо описание фотона, используя волновую функцию фотона. В оптическом и ближнем ИК диапазоне взаимодействие излучение удовлетворяет скалярной теории дифракции. Распределение поглощенного и отраженного потока удовлетворяет принципу Гюйгенса -Френеля. В случае длинноволнового излучения, которое характерно для теплового излучения, наиболее перспективно описание взаимодействие излучения с углеродными нанотрубками, используя модель эквивалентной или эффективной среды. В такой подходе детально рассматривается взаимодействие падающей волны на практически однородный слой углеродных нанотрубок. Такое взаимодействие может быть описано решением системы уравнений Максвелла для эквивалентной диэлектрической проницаемости массива УНТ, либо детальное рассмотрение действия электрического поля падающей волны на атомы углерода, кристаллическую решетку, оперирую в рамках полуклассического приближение, используя упругие параметры решетки, а также коэффициенты поляризуемости отдельных молекул. Последний подход был выбран в качестве метода расчета спектра поглощения в дальнем ИК диапазоне.

H. Butt1, T. D. Wilkinson1, and G. A. J. Amaratunga. FEM MODELING OF PERIODIC ARRAYS OF MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES// Progress In Electromagnetics Research M. – 2012. – Vol. 22. – P. 1-12.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.189

ИЗНОСОСТОЙКОСТЬ ПОКРЫТИЙ ИЗ АЛМАЗОПОДОБНОГО УГЛЕРОДА, ОСАЖДЕННЫХ НА Ti-C СЛОИ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

С.А. Плотников, А.П. Рубштейн, А.Б. Владимиров

ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, ул.С.Ковалевской, 18, Россия, E-mail: sp555555@mail.ru

Покрытия из алмазоподобного углерода (a-C:H) толщиной 1,6 мкм наносили на подложки из стали Р6М5 через промежуточный Ti-C слой толщиной 0,1 мкм с содержанием титана от 10 до 90 ат.%. a-C:H осаждали методом деструкции ацетилена в плазме несамостоятельного разряда, генерируемой электронным пучком в смеси ацетилена и аргона. При осаждении Ti-C в сгенерированную углеродную плазму добавляли ионы титана, поступающие из дугового источника с титановым катодом.
Толщину покрытий и состав Ti-C определяли на сканирующем электронном микроскопе Quanta-200 с приставкой EDAX. Структуру Ti-C исследовали на просвечивающем электронном микроскопе JEM-200-CX. Износостойкость покрытий тестировали в струе твердых частиц в установке роторного типа. Частицы карбида кремния (SiC) со средним размером 100 мкм падали нормально к поверхности образцов со скоростью 10 м/с. Стойкость покрытий оценивали по скорости потери массы покрытия.
Показано, что состав промежуточного Ti-C слоя оказывает существенное влияние на стойкость a-C:H покрытий (рис. 1). Наибольшую износостойкость показало покрытие, осажденное на Ti-C слой с содержанием титана ~10 ат. %. При таком содержании титана в слое формируются частицы карбида титана размером около 2 нм. Повышение содержания титана приводит к увеличению размера частиц в Ti-C и снижению износостойкости покрытия в целом.

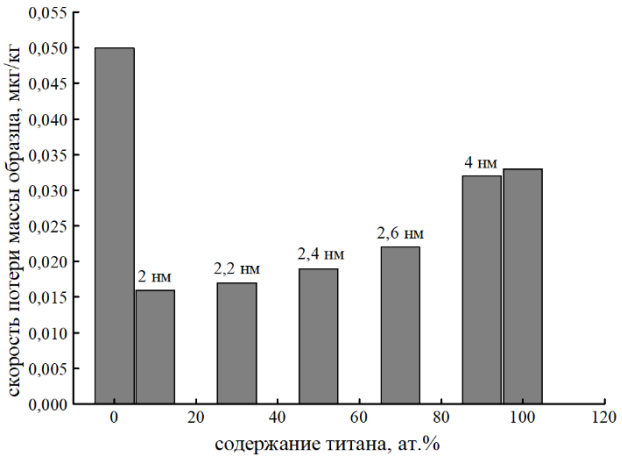


Рис. 1. Скорость изнашивания покрытий от содержания титана в Ti-C слое.Цифрами над столбцами указан размер кристаллитов вTi-C.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № АААА-А19-119012990095-0), при частичной поддержке РФФИ (проект № 20-48-660065).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.350

МИКРОТВЕРДОСТЬ И КОРОЗЗИОННАЯ СТОЙКОСТЬ МАГНИЕВОГО СПЛАВА WE43, ИЗМЕЛЬЧЕННОГО И ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Страумал П.Б.
Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва
pstraumal@imet.ac.ru

Одним из самых популярных медицинских магниевых сплавов, содержащий редкоземельные металлы (РЗМ), является сплав WE43. Легирование с помощью RЗМ улучшает его прочность и увеличивает коррозионную стойкость. Другим методом повышения прочностных характеристик является интенсивная пластическая деформация (ИПД), приводящая к образованию ультрамелкозернистой структуры (УМЗ) в магнии и его сплавах. УЗМ структура также обеспечивает существенное упрочнение, а также приводит к повышению коррозионной стойкости и уменьшению выделения газа. Ранее был успешно изготовлен композит из сплава WE43 и нанокристаллических пленок оксидов алюминия, цинка, магния и титана. Для нанесения этих пленок сплав измельчался, его частицы покрывались оксидом и далее композит компактировался и деформировался путем кручения под высоким давлением (КВД).

Целью представленной работы является исследовать наличие и степень влияния механического измельчения сплава WE43 перед КВД на процесс старения по сравнению с литым состоянием до КВД. Ранее наши коллеги выполнили работу в которой исследовали старение литого сплава WE43 после обработки КВД. Это дало нам возможность сравнить результаты для литого и измельченного состояния до КВД.

Сплав измельчали до стружки с размером частиц порядка 0,5-1 мм. После измельчения магниевого сплава, его подвергли ИПД путем КВД. Для этого стружку насыпали на нижний боек и прессовали, после чего повторяли операцию. После добавления 4 порции стружки образцы деформировались под давлением 6ГПа на 10 оборотов при скорости 1 об/мин.

Термическая стабильность микроструктуры сплава, подвергнутого КВД была исследована путем наблюдения за его микротвердостью и старением.

Механическое измельчение и последующая обработка путем КВД при комнатной температуре вызвала существенное упрочнение измельченного сплава WE43. Прочность подвергнутого КВД сплава WE43 была дополнительно повышена путем последующего старения. Было обнаружено, что термическая стабильность упрочнения, вызванного КВД сохранялась до 200°C. Было получено экстраординарно высокое значение микротвердости в 1557 ± 25 МПа.

Судя по более высокой электропроводности образцов по сравнению с исходно не измельченными образцами, эффект упрочнения обуславливается сегрегацией редкоземельных металлов на дополнительных поверхностях раздела, образованных поверхностями отдельных частиц измельченного сплава.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.351

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ СЕГМЕНТАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН

Кузнецов Н.В., Бедин С.А.

Московский педагогический государственный университет,
г. Москва, Россия, nikuznetsoff@gmail.com

Трековые мембраны (ТМ) – это тонкие полимерные плёнки толщиной 10–20 мкм с системой идентичных калиброванных пор от нескольких десятков нанометров до нескольких микрометров. Получают такие мембраны путём облучения полимерных плёнок на ускорителе с последующей физико-химической обработкой [1]. ТМ нашли применение в качестве высокоэффективных фильтров для очистки воды и шаблонов для синтеза наноструктур, которые используются для оптики и сенсорики [2]. В последнем случае необходимо точно знать плотность пор или пористость, чтобы считать локальные поля и коэффициенты усиления сигналов от биологических и химических веществ в наноконцентрациях.

На данный момент подсчёт плотности пор в основном ведётся вручную. Это является неэффективным способом, так как такой процесс затрачивает много времени и не позволяет набрать хорошую статистику данных. В данной работе предлагается использовать методы машинного обучения для получения масок изображений ТМ, которые можно использовать для расчёта интересующих параметров в автоматическом режиме.

В качестве данных для обучения модели были использованы фотографии с электронного микроскопа, маски которых были размечены вручную. Для реализации сегментации изображений использовалась архитектура U-Net [3]. По результату обучения качество получаемых масок составляло 90% исходя из меры Жаккара. Результатом работы программы становится чёрно-белая маска с изображением положения пор.

После обучения был произведён расчёт площади, занимаемой порами с помощью полученной модели, а также вручную для сравнения результата. В первом случае был получен результат $4.96 \cdot 10^{-7}$ см^2, а во втором - $6.45 \cdot 10^{-7}$ см^2. Эти данные можно в дальнейшим пересчитать в необходимые величины. Также планируется реализовать локализацию центров пор с помощью алгоритма эрозии.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках государственного задания МПГУ по теме «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике».

6. Apel P. Track etching technique in membrane technology // Radiation Measurements. – 2001. – Т. 34, № 1. – С. 559-566
7. Ion tracks and microtechnology: principles and applications. / Spohr R.: Reimar Spohr, 1990
8. Ronneberger O., Fischer P., Brox T. U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation // Medical Image Computing and Computer-Assisted Invention – MICCAI 2015

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.352

ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В СИСТЕМЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$

Абдуллаев Н.А. [1,2], Алигулиева Х.В. [1,3], Зверев В.Н.[4], Алиев З.С.[1], Амирасланов И.Р.[1,2], М.Б. Бабанлы[2,5], Н.Т. Мамедов[1]

[1]Институт физики НАН, г.Баку, Азербайджан,
[2]Бакинский Государственный Университет,г. Баку, Азербайджан,
[2]Сумгаитский Государственный Университет,г. Сумгаит, Азербайджан,
[4]Институт физики твёрдого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,
[5]Институт катализа и неорг. химии НАН, г.Баку, Азербайджан
e-mail: abnadir@maul.ru , xayala-firuza@mail.ru

Недавно было доложено о получении целого семейства новых магнитных топологических изоляторов семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_n$ ($n\geq0$) [1]. Нам удалось выделить из выращенного слитка образец соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$. По данным углового положения и интнсивностей рентгеновских рефлексов выявлено, что состав полученного образца примерно на 50% соответствует соединению $MnBi_2Te_4$ и на 50% - $MnBi_4Te_7$.

Ранее нами было установлено, что первый член этого семейства – монокристаллы $MnBi_2Te_4$ являются антиферромагнитными топологическими изоляторами с температурой Нееля T_N=25.4K [2], а $MnBi_4Te_7$ – с температурой Нееля T_N=13.2K [3]. Температурная зависимость удельного сопротивления $\rho_{xx}(T)$ соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ приведена на рис. 1. Наблюдается “металлический” характер зависимости $\rho_{xx}(T)$ с куполообразной особенностью при температурах ниже 30K (рис.1a). В приложенных внешних магнитных полях 1.5T (рис.1 b, кривая1) и 2T (рис.1 b, кривая2) наблюдаются особенности при T=12.5K и при T=22K, характерные для соединений $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_2Te_4$, соответственно.

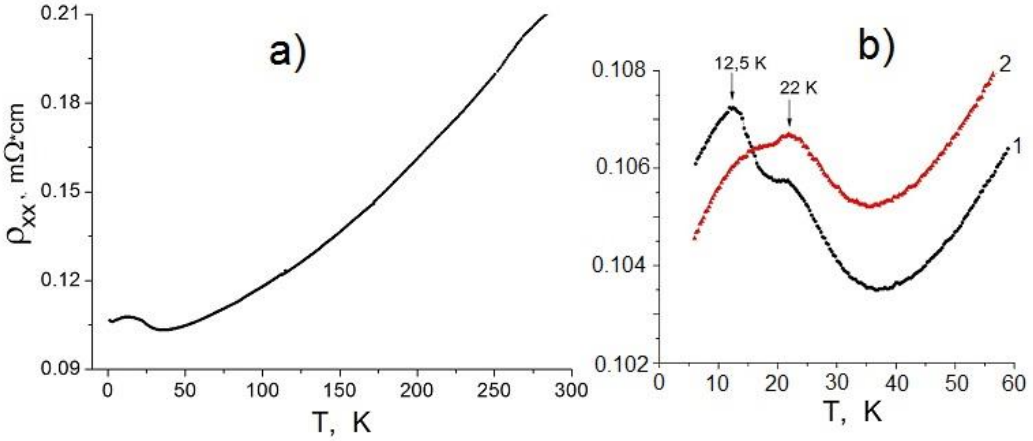


Рис.1. Температурные зависимости удельного сопротивления $\rho_{xx}(T)$ соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$: a) в широком температурном диапазоне 1.4-300K; b) и в диапазоне температур 5-60K при приложенных внешних магнитных полях 1.5T (кривая 1) и 2T (кривая 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке ФРН при Президенте Азерб. Респ. (гр. № EİF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02 и EİF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1).

9. Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, M.M. Otrokov, N.T. Mamedov, M.B. Babanly, E.V. Chulkov et al. // J. All. and Comp. – 2019. V.789. – P. 443–450.
10. M.M. Otrokov, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, M.B. Babanly, N.T. Mamedov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, E.V. Chulkov et al. // Nature. – 2019. V. 576. – P. 416–422.
11. Z.S. Aliev, M.B. Babanly, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, N.T. Mamedov, E.V. Chulkov et al. // npj Quantum Materials. – 2020. V. 5. – N. 54 (9p.).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.353

ИССЛЕДОВАНИЕ СОВЕРШЕНСТВА СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$

Снегирёв Н.И. [a], **Любутин И.С.** [a], **Куликов А.Г.** [a], **Золотов Д.А.**[a], **Ягупов С.В.** [b], **Могиленец Ю.А.**[b], **Селезнева К.А.** [b], **Стругацкий М.Б.**[b]

[a]*Институт кристаллографии им А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
[b]*Физико-технический институт ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского», Симферополь, Россия*
niksnegir@yandex.ru

Монокристаллы серии $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ являются твердыми растворами на основе бората железа $FeBO_3$, которые широко используются в качестве модельных объектов для исследований в области магнетизма. Особый интерес представляет использование кристаллов $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ в качестве рентгеновских фильтров синхротронного излучения. В этом случае введение Ga в структуру $FeBO_3$ позволяет управляемо понижать точку магнитного перехода и оптимизировать параметры работы предлагаемых монохроматоров. В настоящей работе изучено влияние диамагнитной примеси Ga на совершенство структуры монокристаллов на основе бората железа $FeBO_3$.

Серия кристаллов $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ синтезирована методом выращивая из раствора в расплаве**.** Установлено, что рентгеновские кривые качания, полученные в двухкристальной схеме, имеют тенденцию к уширению с увеличением концентрации диамагнитной примеси, что может быть связано с наличием деформаций, вызванных искажениями структуры за счет различности ионных радиусов Fe и Ga.

В качестве примера, на рисунке 1 показаны карты пространственного распределения разориентации по углу Брэгга в кристаллах $FeBO_3$ и $Fe_{0.95}Ga_{0.05}BO_3$. Для $FeBO_3$ контраст наблюдается лишь на краях кристалла, что связано с методикой крепления образца. Для $Fe_{0.95}Ga_{0.05}BO_3$ контраст несколько более существенен. Эти данные согласуются с результатами локальных измерений кривых качания и подтверждают влияние диамагнитной примеси на качество кристаллов $FeBO_3$.

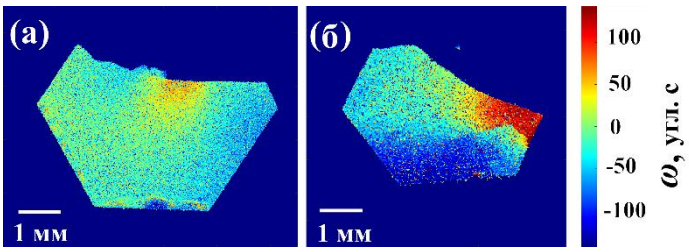


Рис. 1. Пространственное распределение разориентации по углу Брэгга для кристаллов $FeBO_3$ (а) и $Fe_{0.95}Ga_{0.05}BO_3$ (б). Цветовая палитра показывает величину разориентации.

Установлено, что для каждого из исследованных образцов существует значительная область, свободная от дефектов и напряжений. Учитывая возможности современной рентгеновской оптики, будет достаточно фокусировать синхротронный пучок на заранее определенной бездефектной области таких кристаллов - монохроматоров. Таким образом, некоторые искажения структуры в $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ по сравнению с кристаллами «чистых» фаз ($FeBO_3$ и $GaBO_3$) не должно стать ограничением для их использования в ядерно-резонансных синхротронных экспериментах.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016\20-мк, в части синтеза кристаллов и подготовки экспериментальных образцов.

Рентгеновские измерения проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника».

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.354

STRUCTURE OF GRAIN BOUNDARY PHASE IN NdFeB MAGNETS

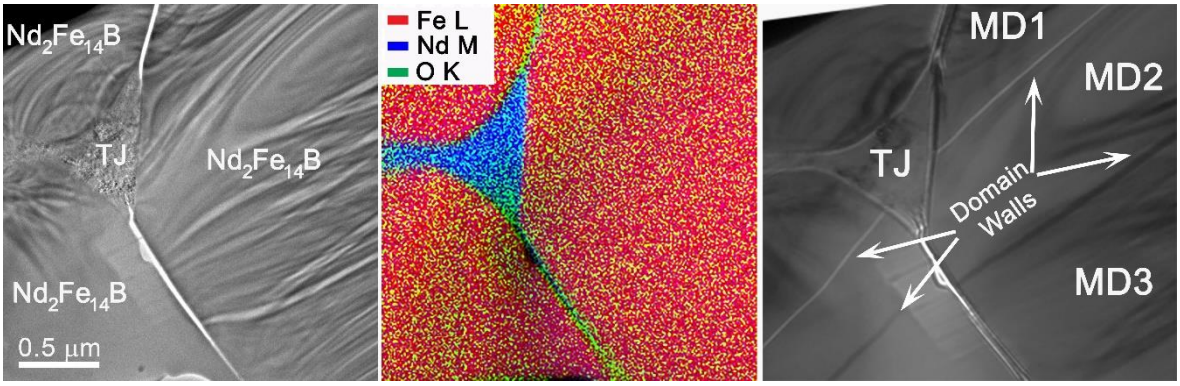
A. Mazilkin[1], B.B. Straumal[1], S.G. Protasova[1], A.B. Straumal[1], B. Barezky[2]

[1]Institute of Solid State Physics and Cheronogolovka Scientific Center of RAS, Chernogolovka, Russia, mazilkin@issp.ac.ru
[2]Karlsruhe Institute of Technology, Institute of Nanotechnology, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

Nd-Fe-B-based alloys remain the best ones among other permanent magnets with the highest magnetic energy product $(BH_c)_{max}$. Usually, the Nd-rich phase in grain boundaries (GBs) is responsible for magnetic decoupling of $Nd_2Fe_{14}B$ grains from each other. Nd-rich phase in GBs and triple junctions appears during the liquid-phase sintering of $Nd_2Fe_{14}B$ powder. It is generally believed nowadays that this Nd-rich phase is always formed by metallic Nd or Nd-rich compounds consisted of REMs and TMs. However, during the production, some oxygen is always present, and the easily oxidizing REMs form the oxides.

The goal of this work is to reconsider the GB layers of Nd-rich phase in NdFeB-based permanent magnets by means of HRTEM and analytical TEM techniques, like energy filtered TEM, in combination with qualitative TEM magnetic imaging.

EELS-based elemental analysis permitted to observe that some of GB layers contain not only neodymium, but also oxygen. More detailed analysis of such GBs with the HR TEM showed these GB layers are crystalline and have the lattice of neodymium oxide Nd_2O_3. In turn, the Lorentz micro-magnetic contrast in TEM permitted to observe that the Nd-oxide GB layers prevent the migration of domain walls from one $Nd_2Fe_{14}B$ grain to another during remagnetization. This finding proves that the GB oxide layers, similar to those of metallic Nd or Nd-rich intermetallic compounds, can ensure the magnetic isolation between $Nd_2Fe_{14}B$ grains needed for high coercivity. Therefore, the GB oxide layers can be used for further development of NdFeB-based permanent magnets.



Acknowledgements

The work was partially carried with partial support of the Scientific Facility Center at the Institute of Solid State Physics. We thank Karlsruhe Nano Micro Facility (KNMF), a Helmholtz Research Infrastructure at Karlsruhe Institute of Technology (KIT) for the support of TEM study.

1. T.T. Sasaki, Y. Takada, H. Okazaki, T. Ohkubo, T. Nakamura, T. Sato, A. Kato, Y. Kaneko, K. Hono // J. Alloys Compd. 790 (2019) 750–759

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.355

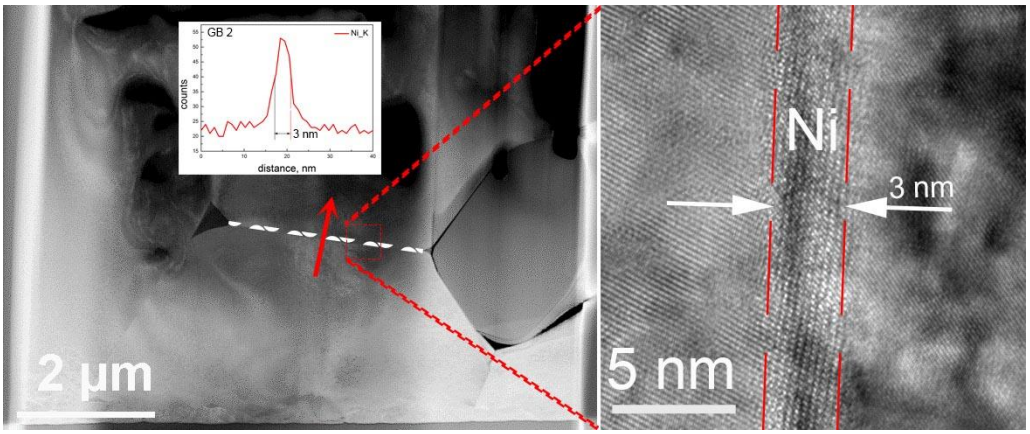
GRAIN BOUNDARY WETTING PHENOMENA IN W–Ni

S.G. Protasova, A.A. Mazilkin, B.B. Straumal

Institute of Solid State Physics and Cheronogolovka Scientific Center of RAS, Chernogolovka, Russia, sveta@issp.ac.ru

Pure W is expensive and difficult to machine and manufacture. Therefore, the heavy W-based alloys were developed containing about 90% or more tungsten with Ni, Fe, or Cu added which maintain some of the useful characteristics of tungsten, such as density and X-ray shielding capabilities. Exactly these additions ensure the high workability of W-based alloys. The distribution of Ni, Fe or Cu-rich binder in the W/W GBs is formed during the liquid-phase or activated sintering as well as post-sintering processing and is governed by the GB wetting phenomena.

One distinguishes the GB complete (CW) and partial (PW) or incomplete wetting [1]. However, in certain conditions the so-called pseudopartial (PPW) GB wetting appears in a phase diagram between complete and partial wetting [2]. In case of PPW GB wetting, the thin GB layer can coexist with large droplets of the wetting phase with a non-zero contact angle. The intergranular films formation driven by the pseudopartial GB wetting can drastically modify the properties of technologically important polycrystals, e.g., Fe–Nd–B-based hard



STEM HAADF image of the W–Ni alloy annealed at 1050°C. Arrow denote the direction of the elemental profile (insert); HRTEM image of the GB with3 nm thick Ni layer visible between two tungsten grains.

In the present study we showed the existence of intergranular films in the W–Ni alloys due to the PPW GB wetting. Namely, the channel of a Ni-rich solid solution in GB triple junction forms the non-zero dihedral contact angle with W/W GBs containing the ~ 3 nm uniformly thin Ni-rich layer.

Acknowledgements

The work was partially carried with partial support of the Scientific Facility Center at the Institute of Solid State Physics.

1. L.-S. Chang, E. Rabkin, B.B. Straumal, et al. // Defect Diff. Forum – 1998. – V. 159. – P. 135–146.
2. B.B. Straumal, A.A. Mazilkin, B. Baretzky// Curr. Opin. Sol. State Mater. Sci. – 2016. – V. 20. – P. 247–256.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.367

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ЛИТЕЙНОМ МАГНИЕВОМ СПЛАВЕ EZ33A

Страумал А.Б., Цой К.В.

Институт Физики Твердого Тела РАН, Черноголовка, Россия, a.str@issp.ac.ru

Уже многие годы одним из самых востребованных направлений в материаловедении является исследование свойств литейных сплавов. Это обусловлено широтой применения литья в технологических процессах и постоянным повышением требований к новым литейным материалам для выполнения все более сложных технических и производственных задач. Среди общеизвестных литейных материалов, таких как чугуны, стали, сплавы на основе меди, алюминия и цинка, особо выделяются сплавы на основе магния. Низкая плотность данных сплавов позволяет делать детали с малым весом и поэтому сплавы на основе магния широко используются в авиакосмической промышленности и машиностроении для литья массивных деталей, корпусов редукторов, роликов, колес. Магний также используется в медицине для производства остео-протезов для протезирования и стентов для шунтирования благодаря своей биосовместимости и тому, что со временем он растворяется в организме без следа.

Одним из широко известных литейных сплавов является сплав EZ33A. Этот сплав состоит в основном из магния и цинка. Для улучшения свойства в него добавлены цирконий, неодим, лантан и церий. Первые упоминания данного сплава относятся к 1960ым года, когда он использовался для литья корпуса для навигационного компьютера миссии Аполлон. Этот сплав обладает низкой микро-пористостью при отливке, хорошей жидко-текучестью, сопротивлением к ползучести до 250˚C, его можно использовать при литье как в постоянные формы, так и в песчаные, и он поддается сварке. Однако, высокая твердость сильно понижает пластичность сплава при комнатной температуре, а, следовательно, ограничивает перечень процессов по механической обработке, применимых при производстве деталей из данного сплава. Высокая твердость в литературе связывают с наличием на границах зерен очень твердой фазы интерметаллида. Действительно, твердость магниевой матрицы составляет порядка 40-50HV, тогда как твердость интерметаллида может варьироваться от 250 до 400HV. При слишком большой скорости охлаждения отливки структура затвердевающего сплава будет представлять структуру смачивания с 75% границ зерен заполненными твердой и хрупкой фазой интерметаллида. Поэтому при деформации могут образовываться трещины, которые будут легко распространяться по хрупкой фазе на границах зерен.

Однако при исследовании жидкометаллического смачивания в данном сплаве мы обнаружили еще один тип выделений в данном сплаве. Это мелкие выделения внутри зерен магния. Мы наблюдали их поначалу только в исходном состоянии образца. При высоких температурах данные выделения растворялись в магнии. Нами было сделано предположение, что подобные выделения могут вносить существенный вклад в механические свойства данного сплава. Возможно, именно по причине их выделения при низких температурах у EZ33A присутствует такое сопротивление ползучести до 250˚C, так как при низких температурах они задерживают продвижение дислокаций через зерна, а при высоких температурах растворяются в магнии.

Для подтверждения выдвинутых предположений был проведен низкотемпературный отжиг образца сплава EZ33A при 150˚C в течении 1884 часов для того, чтобы определить выделяются или растворяются данные выделения при низкой температуре. Было показано, что при данной температуре и времени отжига

эти выделения не только не растворяются, но и вырастают по сравнению с исходным состоянием. Было выделено два типа выделений. Большего размера частицы и мелкие частицы, которые как бы затуманивают объем магниевого зерна.

Образец был исследован методом сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, рентгеноспектрального микроанализа, рентгеновской дифракции и микро-твёрдости. Было показано, что более крупные выделения – это выделения цинка, а более мелкие – это выделения циркония.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-00243)

ДОКЛАДЫ УЧАСТНИКОВ МОЛОДЕЖНОЙ СЕССИИ

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.190

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТА, СОДЕРЖАЩИХ ЛЕГИРУЮЩИЕ КОМПОНЕНТЫ С ОЦК И ГЦК РЕШЕТКАМИ

Чиркова В.В., Волков Н.А., Абросимова Г.Е.
Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, valyffkin@issp.ac.ru

В аморфных сплавах на основе Co ранее было обнаружено образование нетипичной фазы с ОЦК решеткой в композиционной области существования ГЦК фазы [1]. Эта ОЦК фаза в нетипичной концентрационной области наблюдалась только в сплавах, легированных элементами с ОЦК решеткой.

Для понимания механизмов, приводящих к образованию ОЦК фазы, проведено исследование влияния легирующих компонентов с ОЦК и ГЦК кристаллическими решетками на кристаллизацию аморфных сплавов системы Co-Si-B. В качестве легирующих компонентов были выбраны Fe, Nb и Mn с ОЦК решеткой и Ni с ГЦК. Кристаллизация аморфных сплавов осуществлялась методом термической обработки. Термическая обработка представляла собой изотермический отжиг при температуре 550 ˚C в течение 1 часа. Исследование структуры аморфных сплавов после изотермического отжига проводилось с помощью рентгеноструктурного анализа.

Исследование показало, что ОЦК фаза (при данных концентрациях компонентов сплава) образуется только в сплавах с легирующими компонентами Nb и Fe. Хотя Mn имеет ОЦК решетку, он так же, как и Ni не приводят к образованию данной фазы даже при наличии в составе сплава Fe и Nb. Рентгенограммы сплавов с легирующими компонентами Fe, Nb и Mn представлены на Рисунке 1. В сплаве с Mn и Fe (Рис. 1а) наблюдается образование четырех кристаллических фаз: двух модификаций кобальта с ГЦК и ГПУ решетками (отражения на рентгенограмме помечены кружочками и треугольниками, соответственно), а также борида Co_3B и силицида Co_2Si кобальта (ромбики и квадратики). В сплаве с Nb и Fe (Рис. 1б) наблюдается образование одной ОЦК фазы (крестики).

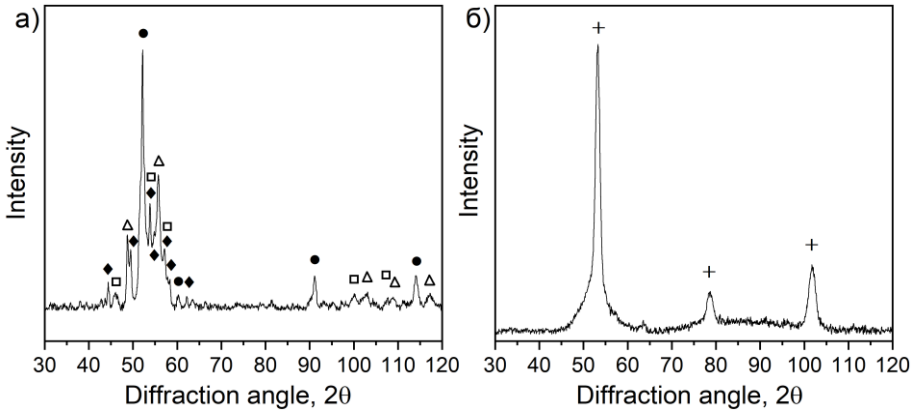


Рис. 1. Рентгенограммы сплавов а) $Co_{74}Si_{13}B_9Fe_1Mn_3$, б) $Co_{67}Si_{12}B_9Fe_7Nb_5$

Таким образом, показано, что кристаллическая решетка легирующих компонентов существенно влияет на кристаллизацию аморфных сплавов системы Co-Si-B.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН при частичной поддержке РФФИ (проект 19-02-00406).

1. Abrosimova G.E., Volkov N.A., Orlova N.N., Aronin A.S. // Mater. Lett. – 2018. – Vol. 219.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.191

ИЗГОТОВЛЕНИЕ И ИССЛЕДОВВАНИЕ Nb-TiO_x-Au ТУННЕЛЬНЫХ СТРУКТУР

Тризнова А.Д.[1], Баева Э.М.[2], Золотов Ф.И.[2], Кардакова А.И.[1,2], Гольцман Г.Н.[1,2]

[1]Московский Педагогический Государственный Университет,
Москва 119435, Россия
[2]Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики,
Москва 101000, Россия, sashatriznova@gmail.com

Структуры на основе туннельных переходов нормальный металл-изолятор-сверхпроводник (НИС) находят свое применение в таких устройствах, как высокоточные низкотемпературные термометры [1] и чувствительные болометры [2]. Значительных результатов достигли исследования контактов на основе Al с барьером из AlO_x [3]. В настоящее время предпринимаются попытки работы с материалами с более высокой критической температурой [1,4,5], одним из таких материалов являются пленки Nb. В настоящей работе продемонстрирована попытка создания туннельных структур на основе Nb с туннельным барьером из оксида титана TiO_x.

Тонкие пленки Nb были осаждены магнетронным методом на r-cut сапфировые подложки [6]. Затем на пленку Nb магнетронным распылением был осажден слой Ti *in situ*, впоследствии окисленный естественным образом в атмосфере. Толщина окисленного слоя TiOx составила 2 нм. Параметры полученных пленок Nb: толщина – 6 нм, сопротивление на квадрат R_s = 46 Ом/□, критическая температура $T_c = 7.4$ К. На основе изготовленных пленок Nb с пассивирующим верхним слоем диэлектрика TiO_x были сформированы структуры с туннельными Au-TiO_x-Nb переходами. Площадь исследуемого туннельного контакта составила A = 1.5·0.5 мкм^2. При температуре T_{bath} = 1.88 К были измерены вольт-амперные характеристики и получены следующие характеристики: отношение подщелевого сопротивления к нормальному R_d/R_n = 1.45, удельное сопротивление перехода $R_n \cdot A$ = 1.09 кОм·мкм^2, энергетическая щель V_g = 1.22 мВ.

Измеренные сверхпроводящие параметры близки к характеристикам туннельных устройств на основе Nb-Al-AlO_x-Cu [7], однако характеризуются на порядок меньшим сопротивлением туннельного перехода. Данные результаты могут быть интересны для исследования устройств с электронным термоохлаждением, а также для исследования подщелевого транспорта в таких структурах.

Благодарности Изготовление образцов и транспортные измерения были выполнены в рамках проекта РФФИ 19-32-60076.

1. M. R. Nevala, S. Chaudhuri, J. Halkosaari, J. T. Karvonen, and I. J. Maasilta, Appl. Phys. Lett. **101**, (2012).
2. P. J. Koppinen, T. Kühn, and I. J. Maasilta, J. Low Temp. Phys. **154**, 179 (2009).
3. F. Giazotto, T. T. Heikkilä, A. Luukanen, A. M. Savin, and J. P. Pekola, Rev. Mod. Phys. **78**, 217 (2006).
4. A. Torgovkin, S. Chaudhuri, J. Malm, T. Sajavaara, and I. J. Maasilta, IEEE Trans. Appl. Supercond. **25**, 2 (2015).
5. S. Chaudhuri, M. R. Nevala, and I. J. Maasilta, Appl. Phys. Lett. **102**, 1 (2013).
6. A. Samsonova, P. Zolotov, E. Baeva, A. Lomakin, N. Titova, A. Kardakova, and G. Goltsman, IEEE Trans. Appl. Supercond. 4 (2021).
7. S. Chaudhuri and I. J. Maasilta, Appl. Phys. Lett. **104**, 5 (2014).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.192

ФАЗА И КРИВИЗНА БЕРРИ ДЛЯ ПРОСТЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

Авакянц А.А.
Адыгейский государственный университет, г. Майкоп, Россия, artemavakyants1999@mail.ru

Рассматривается фаза Берри для двухуровневой системы и для релятивистской заряженной частицы во внешнем магнитном поле.
Показано, что простейшей моделью с ненулевой кривизной Берри является двухуровневая модель, описываемая гамильтонианом общего вида

$$H = \varepsilon l_2 + \vec{d} \cdot \sigma = \begin{pmatrix} \varepsilon + d_z & d_x - id_y \\ d_x - id_y & \varepsilon - d_z \end{pmatrix},$$

где l_2 – единичная матрица 2×2, $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$ – вещественный вектор длиной d, и σ – вектор матриц Паули.
Для релятивистской частицы в магнитном поле показано, что фаза Берри может состоять из двух частей, одна из которых, обусловленная скалярной частью волновой функции, формируется в процессе адиабатического движения, а другая определяется адиабатическим переносом вектора спина.

Список литературы.

Ralph D.C. Berry Curvature, Semiclassical Electron Dynamics, and Topological Materials: Lecture Notes for Introduction to Solid State Physics. Physics Department, Cornel University. 53 p.
Методы математической физики. Асимптотические методы в релятивистской квантовой механике: учебное пособие / В.Г. Багров, В.В. Белов, А.Ю. Трифонов. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2006. 218 с.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.193

УШИРЕНИЕ И СДВИГ ЭКСИТОННЫХ РЕЗОНАНСОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Батаев М.Н., Чукеев М.А., Варыгин Г.В., Игнатьев И.В., Вербин С.Ю., Михайловский В.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия, batae1996@gmail.com

В полупроводниковых наноструктурах оптической восприимчивостью в области экситонных переходов можно управлять с помощью электрического поля, поляризующего экситоны. Поляризованные экситоны могут взаимодействовать как диполи; следовательно, электрическое поле позволяет управлять взаимодействием экситонов и тем самым резонансной оптической нелинейностью[1].

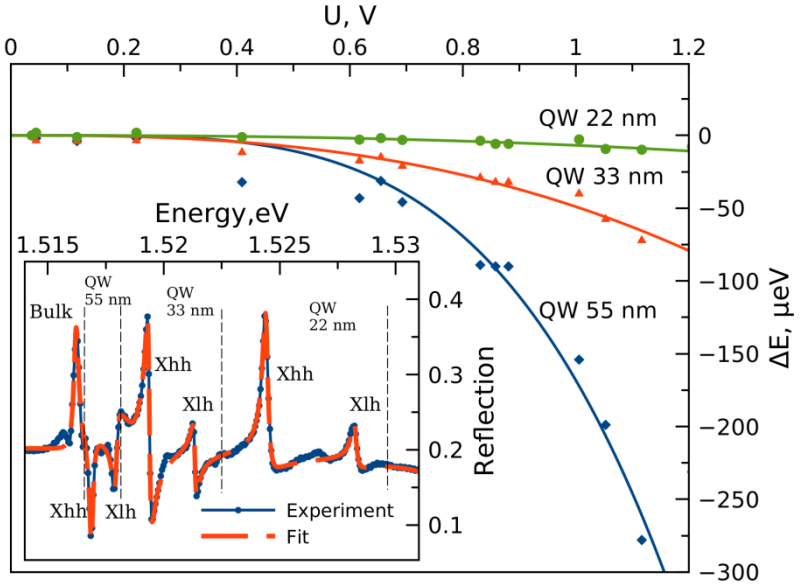


Рисунок 3. Зависимости сдвига энергии тяжелого экситона в квантовых ямах различной ширины от величины электрического поля. На вставке показан пример спектра отражения гетероструктуры с тремя квантовыми ямами. Пунктирной линией показана аппроксимация спектров отражения в рамках стандартной модели [2]

В работе исследованы спектры отражения гетероструктуры GaAs/AlGaAs с тремя квантовыми ямами (КЯ) шириной 22, 33 и 55 нм при T = 9 K. Гетероструктура выращена методом молекулярно-лучевой эпитаксии на n-легированной подложке GaAs. Электрическое смещение прикладывалось вдоль оси роста структуры к ITO-электроду. На вставке к рис. 1 показан пример спектра отражения гетероструктуры и его подгонка в рамках стандартной модели [2]. На основе подгонки определены зависимости параметров экситонного резонанса от электрического поля, такие как энергетический сдвиг, излучательное и безызлучательное уширение экситонных резонансов. Наблюдается красное смещение экситонных резонансов и их уширение с увеличением приложенного электрического поля. Наиболее сильное уширение и сдвиг наблюдается для КЯ 55 нм. Мы связываем сдвиг с эффектом Штарка, а увеличение уширения - с диполь-дипольным взаимодействием поляризованных экситонов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 19-72-20039.

S. I. Tsintzos, A. Tzimis, G. Stavrinidis, et al. // Phys. Rev. Lett. **121**, 037401 (2018).
E. L. Ivchenko, Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures (Springer, Berlin 2004).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.194

МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИОКСИДА ТИТАНА С ИМПЛАНТИРОВАННОЙ ПРИМЕСЬЮ КОБАЛЬТА

Бегишев Е.М.[1], Базаров В.В[2]., Вахитов И.Р.[1], Валеев В.Ф.[2], Гумаров А.И.[1,2], Лядов Н.М.[2], Хайбуллин Р.И.[2]

[1)] Казанский (приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия, begishev.evg@gmail.com

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

Диоксид титана (TiO_2) со структурой рутила, легированный магнитными 3d-элементами, является перспективным материалом для применения в полупроводниковой спинтронике. В нашей работе ионы кобальта с энергией 40 кэВ были имплантированы в (100)- и (001)-ориентированные монокристаллические пластинки рутила с дозой $1{,}5\times10^{17}$ ион/см^2 при комнатной (300 К) или повышенной (900 К) температуре облучаемой подложки. Целью данной работы являлось установление влияния температуры мишени во время имплантации кобальта в рутил на его магнитные и электрические свойства. Магнитные и электрические свойства имплантированных пластинок рутила исследовались методами вибрационной магнитометрии и путем измерения электросопротивления четырех-контактным способом на постоянном (или низкочастотном переменном) токе в широком температурном интервале 4-300 К на многофункциональном приборе PPMS, соответственно. Магнитные и электрические исследования были поддержаны структурными методами: сканирующей электронной микроскопией (СЭМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией (РФЭС).

В результате магнитных исследований выявлено, что все имплантированные кобальтом пластинки TiO_2 проявляют ферромагнитные свойства при комнатной температуре. Азимутальные (*in-plane*) угловые зависимости остаточной намагниченности и коэрцитивного поля показали, что (100)-ориентированные пластинки рутила имеют 2-ух кратную симметрию магнитного отклика. Пластинки с ориентацией (001) проявляют 4-х кратную (в случае имплантации при температуре 300 К) или изотропную (в случае имплантации при температуре 900 К) *in-plane* симметрию ферромагнитного отклика. Исследования полярных (*out-of-plane*) угловых зависимостей вышеназванной характеристики показали, что все образцы проявляют анизотропию формы по типу “легкая плоскость”, типичную для тонких магнитных пленок. Намагниченность насыщения пластинок рутила имеет значение 1,5 μ_B/атом Co (имплантация при 300 К) и 1 μ_B/атом Co (имплантация при 900 К), где μ_B – магнетон Бора. Структурные исследования и анализ температурной зависимости электросопротивления показали, что в случае имплантации при комнатной температуре большая часть примеси кобальта находится в форме наночастиц металлического кобальта, когерентно встроенных в кристаллическую структуру TiO_2, и образцы проявляют полуметаллический тип проводимости. В случае имплантации при повышенной температуре формируется полупроводниковый твердый раствор замещения - двухзарядные ионы Co^{2+} в низко спиновом S=1/2 состоянии замещают катионы Ti^{4+} в матрице TiO_2. Для этих образцов при температурах ниже 50 К наблюдается сначала экспоненциальный рост электросопротивления до значений >10 МОм (предел измерения на PPMS), а затем резкое снижение вплоть до “отрицательных” опять же мегоомных значений. Мы связываем это с процессами “зарядки - разрядки” донорных уровней примеси кобальта и с перемещением кислородных вакансий под действием электрического поля (мемристорный эффект).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.195

АКТИВИРОВАННЫЙ УГОЛЬ ИЗ КРАХМАЛА ДЛЯ ЭЛЕКТРОДОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Берестов В.В., Кречетов И.С., Лепкова Т.Л., Астахов М.В.
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Россия, vberestov97@gmail.com

Развитие возобновляемых источников энергии значительно повышает спрос на высокопроизводительные устройства для хранения энергии, которые могут быстро накапливать и отдавать большое количество энергии. Электрохимические суперконденсаторы (СК) – устройства для накопления электрического заряда, характеризующиеся сочетанием высоких плотностей мощности и запасаемой энергии со стабильностью параметров при длительном сроке службы (до 10^4 – 10^6 циклов заряда-разряда). СК считаются одними из наиболее перспективных электрохимических устройств для хранения электрической энергии и широко используются в силовой электронике, электромобилях, электросетях и т.д. Материалы на основе углерода привлекают все большее внимание для создания высокоэффективных СК из-за того, что они обладают высокой проводимостью, большой площадью поверхности и отличной устойчивостью к коррозии, что делает актуальным поиск недорого и качественного сырья для их получения. Крахмал – это один из самых дешевых биополимеров и многообещающее возобновляемое сырьё для получения пористого углерода. Цель данной работы состояла в получении активированного угля (АУ) из крахмала и исследовании электрохимических свойств материала для электродов двойнослойного СК на его основе.

Для получения углеродного материала проводили нагрев сырья в трубчатой печи от комнатной температуры до 900 °C в токе аргона, затем при этой температуре проводили активацию в токе углекислого газа. Полученный АУ измельчали, смешивали с техническим углеродом и водной суспензией политетрафторэтилена в присутствие этилового спирта до получения однородной массы, которую прокатывали для получения ленты толщиной не более 200 мкм. Из ленты вырезали электроды, которые пропитывали электролитом – водным раствором 1 М KNO_3 – и использовали для сборки симметричных двухэлектродных ячеек СК в галетных корпусах типоразмера CR2016 из нержавеющей стали. Были проведены ресурсные испытания ячеек методом гальваностатического заряда-разряда (ГЗР) удельным током 1,22 А/г в течение 900 000 циклов, при этом перед началом ресурсных испытаний, а также через каждые 100 000 циклов ячейки исследовали методами циклической вольтамперометрии (ЦВА) и ГЗР с разными скоростями развёртки и удельными токами соответственно.

При невысоких скоростях развёртки (до 10 мВ/с) кривые ЦВА имеют очень близкую к прямоугольной форму вне зависимости от того в какой момент ресурсного испытания они были получены. Максимальная достижимая ёмкость 70 Ф/г достигается при ГЗР удельным током 0,024 А/г до начала ресурсного испытания. При увеличении удельного тока ёмкость снижается до значений 49 Ф/г при токе 2,45 А/г. Падение ёмкости с увеличением плотности тока становится более выраженным по мере увеличения количества проведённых в ходе ресурсного испытания циклов ГЗР. КПД по заряду практически не зависит от удельного тока, не меняется в ходе ресурсного испытания и остаётся около 100 %. Уменьшение ёмкости при токе 1,22 А/г, при котором проводили ресурсные испытания, составляет около 10 % за 900 000 циклов. При этом при удельном токе 0,024 А/г снижение ёмкости составило примерно 3 %, а при удельном токе 2,45 А/г – около 39 %.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.196

ФАЗОВЫЕ РЕАКЦИИ В СИСТЕМЕ SiO_2-TiO_2-FeO-MgO-H_2O ПРИ 6 ГПа

Бурова А.И. [1,2], Черткова Н.В. [1], Спивак А.В.[1], Захарченко Е.С. [1,3], Бобров А.В.[1,2]
[1] *Институт экспериментальной минералогии РАН имени академика Д.С.Коржинского, г.Черноголовка, Россия, setkova@iem.ac.ru*
[2] *Геологический факультет,Московсий государственный университет им. М.В.Ломоносова, г.Москва, Россия*
[3]*Институт физики твердого тела РАН, г.Черноголовка. Россия*

Изучение минеральных фазовых отношений, как природных, так и синтетических аналогов, даёт возможность выявить наиболее эффективные механизмы, среды и термобарические условия их кристаллизации с целью приложения этих природных характеристик в современных технологических процессах, оценить возможность синтеза тех или иных фаз и оценить перспективность их применения.

Недавние находки льда-VII среди минеральных включений (ильменит и ильменит совместно с оливином) в алмазах показали, что остаток водной жидкости, присутствующей в алмазообразующей среде и захваченный во время роста алмаза, кристаллизуется при подъеме вмещающих алмазов[1]. В связи с этим, определение фазовых реакций в системе ильменит-оливин-вода при *PT*-параметрах отвечающих условиям верхней мантии представляет особый интерес для изучения алмазообразующих систем и алмазообразования в целом.

Эксперименты по изучению фазовых отношений в системе SiO_2-TiO_2-FeO-MgO-H_2O проводились на установке высокого давления типа наковальня с лункой при 6 ГПа и температуре 1300 ºС. Стартовые смеси имели переменный состав Mg_2SiO_4=80-x, $FeTiO_3$= x, H_2O=20 мол.%, где x=80, 60, 40, 20. Экспериментальные образцы изучались методами электронной микроскопии и КР-спектроскопии.

В экспериментальных образцах установлены следующие фазы: ильменит, оливин и пироксен. В образце с составом $(FeTiO_3)_{80}H_2O_{20}$ происходит перекристаллизация ильменита. С добавлением 20 мол% Mg_2SiO_4 в межзерновом пространстве ильменита обнаружено мелкозернистые образования силикатного вещества. Эти два состава соответствуют составам включений в верхнемантийных алмазах, где среди минеральных включений ильменита и оливина была обнаружена вода в виде льда-VII . С возрастанием содержания Mg_2SiO_4 компонента в системе среди продуктов получены кристаллы оливина и пироксена со значительным содержанием железистого компонента, при этом в силикатных фазах присутствует титан в качестве примеси.

Благодарности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-77-00079) и частично в рамках государственного задания АААА-А18-118020590140-7 Института экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского РАН.

9. Tschauner O., Huang S., Greenberg E., Prakapenka V.B., Ma C., Rossman G.R, Shen A.H., Zhang D., Newville M., Lanzirotti A., Tait K.// Science. – 2018. – 359. P. – 1136-1139.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.197

Микроструктура и диэлектрические свойства тонких поликристаллических плёнок pzt с неоднородным распределением состава по толщине

[1,2]Валеева А.Р., [3]Старицын М.В., [4]Долгинцев Д.М., [1]Немов С.А.

[1]Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия, ravilka834@gmail.com
[2]ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия,
[3]НИЦ «Курчатовский институт» - НИИ Конструкционных материалов «Прометей» им. И.В. Горынина, г. Санкт-Петербург, Россия,
[4]Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, г. Санкт-Петербург, Россия

Тонкие пленки PZT являются одним из наиболее перспективных материалов для микроэлектромеханических (MEMS) приложений [1]. С целью оптимизации структуры и получения тонких слоев PZT с заданными физическими параметрами, были сформированы и исследованы слоистые структуры с неоднородным распределением атомов свинца по толщине. Двухслойные структуры были изготовлены на установке ВЧ магнетронного распыления методом варьирования давления рабочего газа, Рис. 1 [2].

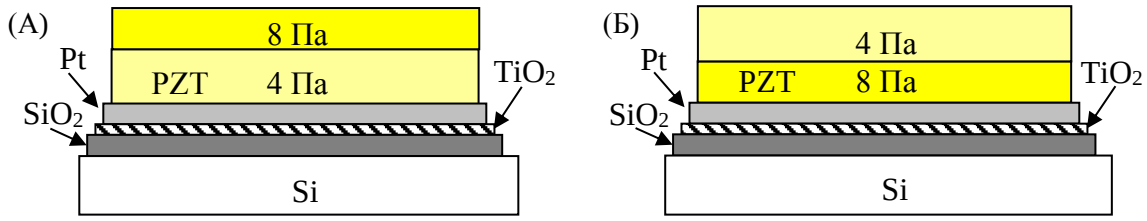


Рис. 1 Двухслойные структуры PZT.

Исследование микроструктуры и состава тонких слоев проводилось с помощью РЭМ (TESCAN LYRA3). Выявлено изменение механизма роста фазы перовскита в тонких слоях. Установлено, что уменьшение элементной неоднородности при кристаллизации фазы перовскита происходит в результате диффузии атомов свинца в область, обедненную свинцом (Таблица 1). Показано, что очередность осаждения слоёв определяет диэлектрические свойства сформированных PZT структур. Проведен анализ влияния очередности слоев на микроструктуру, неоднородность состава, величины внутреннего поля и самополяризации (являющихся важными параметрами MEMS-систем).

Таблица 1. Элементное содержание Pb/(Zr+Ti) в зависимости от глубины травления.

Структура	Глубина травления, нм							
	0	115	230	345	460	575	690	805
А	1,207	1,205	1,189	1,125	1,021	0,974	0,956	0,904
Б	0,994	0,995	0,997	0,997	1,000	1,065	1,189	1,164

10. Muralt P. // J. Am. Cer. Soc. – 2008. – V. 91 – № 5. – P. 1385-1396.
11. Вольпяс В.А., Козырев А.Б., Тумаркин А.В., Долгинцев Д.М., Пронин В.П., Каптелов Е.Ю., Сенкевич С.В., Пронин И.П. // ФТТ. – 2019. – Т. 61 – № 7. С. – 1282-1286.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.198

ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ТГЦ ИНТЕРФЕРОМЕТР

Горбенко И.В., Качоровский В.Ю., Шур М.С.

ФТИ им. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
gorbenko.ilya.v@gmail.com

Одна из задач современной наноэлектроники – разработка компактных и перестраиваемых ТГц приборов. Они могут быть использованы в области плазменной интерферометрии с множеством областей практического применения. Скорость плазменной волны в 2D материалах как правило на порядок больше, чем дрейфовая скорость электронов и намного меньше скорости света. Следовательно, плазменные интерферометры субмикронных размеров на основе 2D материалов, как ожидается, будет эффективно работать в ТГц диапазоне. [1] С помощью напряжения на затворе V_g возможно управлять плазменной скоростью, а значит прибор является перестраиваемым.

В предыдущих работах было исследовано влияние внешнего ТГц излучения с циркулярной поляризацией на 2D электронный газ с затвором. Было продемонстрировано, что разность фаз между ТГц сигналами, подаваемыми на исток и сток полевого транзистора (TeraFET), индуцирует постоянный ток, поддерживаемый плазмонами, который резко усиливается вблизи плазменных резонансов. [2] Фазовый сдвиг между плазменными волнами, чувствительный к поляризации, может быть достигнут с помощью асимметричной конфигурации антенн. На этой основе была предложена схема фазочувствительного гомодинного детектора, работающего в режиме фазовой асимметрии. [3]

Оказалось, что фотоотклик такого интерферометра содержит два резонасных вклада: симметричный (относительно инверсии знака $\delta\omega$) поляризационно-нечувствительный вклад и асимметричный, меняющий знак при изменении радиационной плотности. Следовательно, «фазовый» вклад в фотоотклик можно легко выделить из обычного симметричного вклада, не чувствительного к поляризации излучения. Этот результат может непосредственно использоваться для создания чувствительных к фазе ТГц спектрометров и интерферометров. Такой асимметричный поляризационно-чувствительный вклад наблюдался экспериментально. [4]

Благодарности.
Работа Г.И.В. и К.В.Ю. поддержана проектом РНФ 20-12-00147 «Транспорт, теплоперенос и шум в одномерных топологических системах».

1. Dyakonov, M.; Shur, M. Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current. Phys. Rev. Lett. 1993, 71, 2465−2468.
2. Gorbenko, I. V.; Kachorovskii, V. Y.; Shur, M. Terahertz plasmonic detector controlled by phase asymmetry. Opt. Express 2019, 27, 4004−4013.
3. Gorbenko, I. V.; Kachorovskii, V. Y.; Shur, M. S. Plasmonic Helicity-Driven Detector of Terahertz Radiation. Phys. Status Solidi RRL 2018, 1800464.
4. Matyushkin, S. Danilov, M. Moskotin, V. Belosevich, N. Kaurova, M. Rybin, E. Obraztsova, G. Fedorov,I. Gorbenko, V. Kachorovskii, S. Ganichev // “Helicity sensitive plasmonic terahertz interferometer”, NanoLetters 2020, https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c02692Y

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.199

ДИЛАТАЦИОННАЯ НИТЬ В КЛИНЕ СО СВОБОДНЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ

Гудкина Ж.В., Гуткин М.Ю., Красницкий С.А., Аргунова Т.С.

Санкт-Петербургский Политехнический университет им. Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия,
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия
gudkinazhanna@mail.ru

Поиск упругих полей, вызванных дилатационными включениями различных форм в упругом теле со свободными угловыми границами, является важной задачей в теории упругости. Такую границу можно рассматривать как клиновидный вырез или выступ с произвольным углом раскрытия. В этом случае элементарным включением может служить бесконечно тонкая дилатационная нить, обладающая собственной трехмерной дилатацией и с такими же упругими модулями, как и в окружающей матрице. Зная решение для такой нити, можно простым интегрированием получать аналогичные решения для длинных включений с поперечным сечением произвольной формы.

Известно, что для решения граничных задач эффективно применять метод виртуальных дефектов, основанный на методе поверхностных дислокаций [1]. Этот метод оперирует упругими полями распределенных виртуальных источников упругих полей для формирования граничных интегральных уравнений, решение которых является решением граничной упругой задачи. В настоящей работе методом виртуальных поверхностных дислокаций (ВПД) найдено решение задачи для дилатационной нити в клине со свободными поверхностями. Аналогичные задачи решались для краевых дислокаций в однородных [2] и композитных [3] телах клиновидной формы и винтовых дислокаций, расположенных вблизи тройного стыка различных клиновидных фаз [4]. В рамках такого подхода можно представить искомое поле напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ в виде $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{\infty} + \boldsymbol{\sigma}^{v}$, где $\boldsymbol{\sigma}^{\infty}$ — известное поле напряжений дилатационной нити в бесконечной упругой среде [5], а $\boldsymbol{\sigma}^{v}$ – дополнительное поле напряжений ВПД, которое обеспечивает выполнение граничных условий на угловой границе тела. В такой постановке задача сводится к отысканию четырех функций распределения ВПД из граничных условий, которые дают систему четырех интегральных уравнений. Эта система с помощью интегрального преобразования Меллина сводится к системе алгебраических уравнений для определения образов Меллина функций распределения ВПД. В результате дополнительное поле $\boldsymbol{\sigma}^{v}$ получается в интегральном виде – в форме найденных образов Меллина функций распределения ВПД и обратного преобразования Лапласа-Меллина от произведений известных образов Меллина напряжений отдельных ВПД. Анализ полученного решения проводился численно с использованием карт напряжений дилатационной нити.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 19-29-12041.

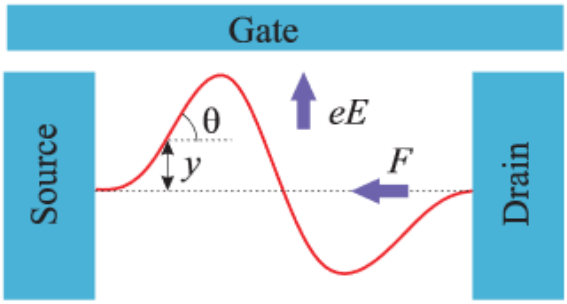
1. Louat N. // Nature (London). – 1962. - 196 1081.
2. Hecker M., Romanov A.E. // Phys. Stat. Sol. – 1992. – A 130. P. 91-101.
3. Hecker M., Romanov A. E. // Mater. Sci. Eng. – 1993. – A 164. P. – 411-414.
4. Gutkin M.Yu., Romanov A.E., Aifantis E.C. // Phys. Stat. Sol. – 1996. A 153. P. – 65-75.
5. Колесникова А.Л., Сорока Р.М., Романов А.Е. // Mater. Phys. Mech. – 2013. – №13. С. – 71-91.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.200

ОДНОЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНЗИСТОР С УПРУГОЙ СТЕПЕНЬЮ СВОБОДЫ

Евсеев С.С., Бурмистров И.С., Тихонов К.С., Качоровский В.Ю.

ИТФ им. Л.Д. Ландау, ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Сколтех, evseev.ss@itp.ac.ru



Одноэлектронный транзистор на основе подвешенной углеродной нанотрубки или нанопроволоки может демонстрировать эффекты, связанные с сильной корреляцией электронных и механических степеней свободы. Один из наиболее интересных режимов реализуется вблизи Эйлеровской неустойчивости (ЭН), индуцированной продольной силой, сжимающей нано-трубку. В таком режиме даже малое изменение сжимающей силы резко меняет вольтамперные характеристики транзистора. Одним из интересных свойств такой системы является существование щели: ток не течёт через транзистор при $V < \Delta_v$ и всех затворных напряжениях, при этом Δ_v имеет острый пик в области ЭН [1].

В этой работе мы исследуем поведение такой системы в присутствии беспорядка в упругих свойствах трубки. Естественно ожидать, что вблизи ЭН упругие свойства трубки оказываются особенно чувствительны к такому беспорядку. Мы развили простой метод расчета, позволяющий явно вычислить функцию распределения изгиба нанотрубки с учётом электронной и механической степеней свободы. Главные результаты состоят в следующем: получено явное выражение для тока через такой одноэлектронный транзистор в предположении малости изгиба нанотрубки; показано, что беспорядок приводит к двум эффектам: размытию щели Δ_v и увеличению области ненулевого тока в переменных V_g, V. Таким образом, вопреки наивным ожиданиям, беспорядок может приводить к усилению тока через систему.

Благодарности.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-52-12019 ННИО_а

1. Guillaume Weick, Felix Von Oppen, and Fabio Pistolesi, Euler buckling instability and enhanced current blockade in suspended single-electron transistors, Phys. Rev. B 83, 035420 (2011)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.201

УПРУГИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТОГО СЛОЯ ПОДЛОЖЕК SIC-3C(111)/SI(111)

Еремеев Ю.А.

СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова

г. Санкт-Петербург, Россия, iuriyeremeev528@gmail.com

Эпитаксиальные плёнки карбида кремния синтезируют на подложках кремния методом замещения атомов [1]. Получаемые гибридные подложки SiC/Si позволяют выращивать как тонкие плёнки твёрдых растворов AlGaN различного состава, так и объёмные монокристаллические слои. Механизм роста AlGaN зависит от остаточных упругих напряжений в подложках SiC/Si, содержащих пористый слой. Относительно небольшое количество работ посвящено механизмам релаксации упругих напряжений в структуре SiC/Si-пористый/Si. Телятник в работе [2] определил остаточные упругие деформации в слое SiC путём измерения кривизны подложки при различных температурах (2×10^{-3}, что соответствует остаточным напряжениям около 1 GPa). Однако, реальная структура пористого слоя не рассматривалась в этой работе. Упругие константы пористого слоя кремния как функция пористости были определены в работе [3] на основе модели сферических пор. Данная работа продолжает исследования упругих свойств пористого кремния на основе модели октаэдрических пор с учётом тонкого слоя SiC на границах пор.

Расчёт матрицы упругих констант пористого кремния проведен методом конечных элементов. Минимизировано влияние трех источников ошибок: ошибка, связанная с ограниченностью области моделирования, дискретизация, статистическая погрешность [3]. В модели рассмотрен куб кремния, в который добавлены сферические поры заданного радиуса R с тонким слоем SiC (tSiC) на границах. Также построена модель для октаэдрических пор с высотой пирамиды, равной R. Грани октаэдра лежат в эквивалентных (111) плоскостях. Грань куба превышает размер элементарной поры R в 5 и более раз.

Расчёты показывают, что пористый кремний имеет три независимые упругие константы. Получена зависимость биаксиального модуля упругости M_{111} от пористости (рисунок 1). При изменении геометрии поры со сферической на октаэдрическую, значение M_{111} снижается (заполненные круги и кресты соответственно). Результат с учётом тонкого слоя SiC значительно увеличивает значение биаксиального модуля упругости.

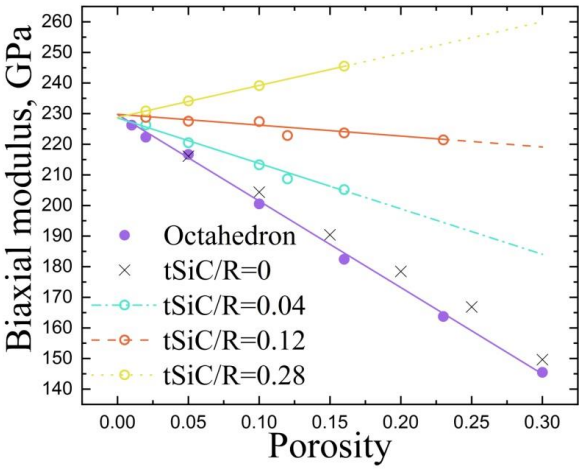


Рисунок 1. Зависимость M_{111} от пористости слоя кремния. Результаты, полученные в модели октаэдрических пор, показаны заполненными кругами. Пунктирные линии - это экстарполяция данных для tSiC/R=0.04, 0.12 и 0.28 до 30% пористости. Данные, полученные для сферических пор без слоя SiC на границе обозначены крестами [3].

Благодарности.

Исследование выполнено в рамках проекта Российского научного фонда № 20-12-00193

[1]. Kukushkin S.A., Osipov A.V. and Feoktistov N.A. // PSS – 2014. – № 1. С. – 1507-1535

[2]. Telyatnik R.S., Osipov A.V. and Kukushkin S.A. //PSS – 2015. – №. 1. С. – 162-172.

[3]. Koryakin A.A., Eremeev Yu.A., Osipov A.V. and Kukushkin S.A. – 2021. – №. 2.С. 126-129.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ СИСТЕМЕ SiO_2-Al_2O_3-

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.202

GeO_2-Ga_2O_3-H_2O ПРИ 6 ГПа

Квас П.С. [1,2], Спивак А.В.[1], Сеткова Т.В.[1], Захарченко Е.С. [1,3], Боровикова Е.Ю.[2]
[1] *Институт экспериментальной минералогии РАН имени академика Д.С.Коржинского, г.Черноголовка, Россия, algiz116@mail.ru*
[2] *Геологический факультет,Московсий государственный университет им. М.В.Ломоносова, г.Москва, Россия*
[3]*Институт физики твердого тела РАН, г.Черноголовка. Россия*

Получение новых фаз - структурных аналогов природных минералов, определение зависимостей между составом и структурой, выявление эффективных сред, условий и механизмов образования этих фаз с целью синтеза перспективных минералоподобных материалов, а также разработка концепции их формирования в природных условиях, является актуальным направлением на стыке наук о Земле и материаловедения.
Геохимическое сходство алюминия с галлием и кремния с германием позволяет использовать систему Ga_2O_3-GeO_2-H_2O в качестве высокобарных моделей для изучения фазовых соотношений в алюмосиликатных системах. Химические деформации, которые могут возникнуть в структурах алюмосиликатных фаз при вхождении в них более крупных катионов Ga и Ge, эквивалентны изменениям структур под воздействием высокого давления. Задачи данной работы: (1) экспериментальное изучение фазообразования в системе SiO_2-Al_2O_3-GaO_2-Ge_2O_3-H_2O; (2) определение химического состава полученных фаз; (3) изучение структурных особенностей полученных кристаллов методом КР-спектроскопии при нормальных условиях.
Эксперименты по изучению фазовых отношений в системе SiO_2-Al_2O_3-GaO_2-Ge_2O_3-H_2O проводились на установке высокого давления типа наковальня с лункой при 6 ГПа и температуре 750 ^oC. В качестве стартовых смесей были приготовлены граничные составы системы $[(SiO_2)_{50}(Al_2O_3)_{50}]_{80}H_2O_{20}$ и $[(Ga_2O_3)_{50}(GeO_2)_{50}]_{80}H_2O_{20}$, а также $[(SiO_2)_{25}(Al_2O_3)_{25}(Ga_2O_3)_{25}(GeO_2)_{25}]_{80}H_2O_{20}$. Экспериментальные образцы изучались методами электронной микроскопии и КР-спектроскопии.
Кристаллы коесита и кианита являются продуктами эксперимента со стартовым составом $[(SiO_2)_{50}(Al_2O_3)_{50}]_{80}H_2O_{20}$, что соответсвует фазовой диаграмме алюмосиликатной системы [1]. В другой граничной системе $[(Ga_2O_3)_{50}(GeO_2)_{50}]_{80}H_2O_{20}$ происходит образование двух галлий германиевых фаз с составами Ga_2O_3/GeO_2 □5/95 и 80/20 вес.%. В многокомпонентной системе $[(SiO_2)_{25}(Al_2O_3)_{25}(Ga_2O_3)_{25}(GeO_2)_{25}]_{80}H_2O_{20}$ кристаллизуются фазы по химическому составу соответствующие твердому раствору Ga,Ge-содержащего кианита $(Al_{1.83}Ga_{0.29})(Si_{0.69}Ge_{0.22})O_5$. Требуется дополнительные исследования структурных характеристик для новообразованных фаз.

Благодарности.
Работа выполнена в рамках государственных заданий АААА-А18-118020590140-7 и АААА-А18-118020590140-5 Института экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского Российской академии наук.

Dobrzhinetskaya L.F., Green H.W. // J. metamorphic Geol. – 2007. – 25. – P. 83-96.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.203

SERS-АКТИВНЫЕ ПОДЛОЖКИ С ОПТИМИЗИРОВАННЫМИ ДЕНДРИТНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Кожина Е.П.[1,2], Бедин С.А. [1,3], Долуденко И.М.[3], Андреев С.Н.[1,4], Наумов АВ[1]

[1]Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия
[2]Московский физико-технологический институт, Москва, Россия
[3]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
[4]Московский Политех, Москва, Россия

ivanov@maul.ru

Области концентрации высокоинтенсивных локальных электрических полей вблизи наноструктурированных поверхностей, так называемые «горячие точки», возникают на шероховатых металлических поверхностях, а также в зазорах между соседними наноструктурами (НС) [1]. Также, высокое локальное электрическое поле объясняет большие коэффициенты усиления сигналов, наблюдаемые экспериментально в SERS-спектроскопии (SERS (англ.) - усиленное поверхностью рамановское рассеяние), где сигнал комбинационного рассеяния пропорционален - в первом приближении - четвертой степени нормированной амплитуды электрического поля [2].

В данной работе мы предлагаем изготовление подложек с дендритными наноструктурами, сформированными на вершинах серебряных нанопроволок (НП), используя метод шаблонного синтеза на основе трековых мембранах (ТМ). В результате использования ТМ ветви дендритных НС образуются равномерно по поверхности шаблона и не перекрывают друг друга, сохраняя уникальный рисунок распределения «горячих точек» на поверхности.

Подложки с дендритными наноструктурами, образующихся на вершинах серебряных НП были изготовлены методом шаблонного синтеза на основе ТМ толщиной 12 мкм, диаметром пор 100 нм и поверхностной плотностью пор 108 см-2. Поры в ТМ электрохимически заполняли серебром. В качестве электролита использовался йодистый электролит серебрения. Используя реверсивное осаждение, при малом значении тока (2-3 мА) добивались равномерного заполнения пор ТМ, затем увеличивали ток до 10-30 мА на 15-20 секунд, в результате чего на вершинах НП образовывались дендритные структуры. Ветви дендритов разветвлялись с увеличением подаваемого тока.

Моделирование показало, что наличие пространственного эффекта между остриями и осью ветви дает больший вклад, чем концентрация напряженности поля на остриях. Также, локальное поле вблизи разветвленной ветви на порядок больше, чем для дендритов, которые росли при низком токе и имели круглую форму. SERS-спектры красителя малахитовый зеленый также зависели от формы дендритов на подложке.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках государственного задания МПГУ по теме «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике» и государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

1. Etchegoin P. G., Le Ru E. C. A perspective on single molecule SERS: current status and future challenges // Phys Chem Chem Phys. – 2008. – Т. 10, № 40. – С. 6079-89.
2. Langer J., Jimenez de Aberasturi D., et.al. Present and Future of Surface-Enhanced Raman Scattering // ACS Nano. – 2020. – Т. 14, № 1. – С. 28-117.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.204

НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ МИКРОСТРУКТУР РИБОФЛАВИНА РАЗЛИЧНОЙ ИЕРАРХИИ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Крикунова П.В., Бибикова Д.Г., Архарова Н.А., Каримов Д.Н., Хайдуков Е.В., Толордава Э.Р., Бородина Т.Н.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия, krikunova.pv@gmail.com

Рибофлавин является природным фотосенсибилизатором (ФС) [1], который способен генерировать больше синглетного кислорода, чем многие синтетические ФС, например, фотофрин [2]. Благодаря своим фотохимическим свойствам и способности нарабатывать активные формы кислорода при облучении ультрафиолетовым и синим светом, была показана эффективность рибофлавина для противоопухолевой [3] и антибактериальной [4] терапии.
Рибофлавин известен, как необходимый компонент питания и играет ключевую роль в процессе выработки энергии. Он служит прекурсором флавинмононуклеотида (ФМН) и флавинаденинуклеотида (ФАД). Нативный рибофлавин кристаллизуется в форме желтых, горьких на вкус иголок, разрушается под действием света, плохо растворяется в воде и спирте. По данным рентгеноструктурного анализа кристаллы коммерчески доступного рибофлавина относятся к типу А [5]. Целью данной работы являлось получение микроструктур рибофлавина различной иерархии путем его перекристаллизации из различных растворителей, изучение его структуры и морфологии, а также оценка антибактериальной активности с целью дальнейшего биологического применения.
Новые микроструктуры рибофлавина были получены путем осаждения исходного из щелочного раствора при добавлении различных кислот (соляная, азотная, уксусная). Полученные микроструктуры были исследованы с помощью оптической микроскопии, конфокальной лазерной сканирующей микроскопии (КЛСМ), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), динамического рассеяния света, а также рентгеноструктурного анализа. Обнаружено, что в зависимости от вида кислоты наблюдается перекристаллизация рибофлавина в микроструктуры различной иерархии. По данным рентгеноструктурного анализа можно предположить, что при перекристаллизации рибофлавина под действием кислот происходит образование преимущественно кристаллогидратов типов В и С (короткие иголки, собранные в пучки или шарики). Полученные иерархиченские структуры были успешно модифицированы полимерными оболочками методом электростатической адсорбции полиэлектролитов, что было подтверждено изменением заряда их поверхности. Антибактериальная активность полученных микроструктур рибофлавина была продемонстрирована по отношению к золотистому стафилококку (Staphylococcus aureus).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 20-04-60357 Вирусы.

1. Entsch B., Ballou D.P. // Encyclopedia of Biological Chemistry. – 2013. – 309-313.
2. Baier J, Maisch T, Maier M, Engel E, Landthaler M, Bäumler W. // Biophys J. – 2006. – 15. – 91(4). –1452-9.
3. Akasov R.A., Sholina N.V., Khochenkov D.A., Alova A.V., Gorelkin P.V., Erofeev A.S.et al. // Sci. Rep. – 2019. – 9. – 9679.
4. Makdoumi K, Goodrich R, Bäckman A. // Acta Ophthalmol. – 2017. – 95(5). –498-502.
5. Mohnicke M. // Shaker Verlag Gmbh, Germany. – 2007. – 104.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.205

МИКРОТВЕРДОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ $CaMoO_4$

Крупнова Е.Д.[1], Козлова Н.С.[1], Забелина Е.В.[1], Бузанов О.А.[2]

[1]*Испытательная лаборатория «ИЛМЗ» НИТУ «МИСиС», Москва, Россия,*
lenakrupnova12@yandex.ru, kozlova_nina@mail.ru, zabelina.ev@misis.ru
[2]*АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия,* buzanov@newpiezo.com

Твердость определяется как свойство материала сопротивляться нарушению целостности его поверхностного слоя (резанию, царапанию или вдавливанию индентора) или нарушению формы. Твердость определяется, в первую очередь, прочностью соединений элементов структуры, типом структуры и природой химических связей. [1, 2]. На практике величина микротвердости важна для диагностики материалов, используется на производстве при создании технологий обработки кристаллов и порядка обращения с ними [1-3].

Монокристаллический молибдат кальция $CaMoO_4$, группа симметрии 4/m, является известным материалом [3], однако, данные по его микротвердости в литературе представлены скупо и существенно различаются.

Целью данной работы является исследование микротвердости $CaMoO_4$.

Измерения проводились на поверенном микротвердомере «DM 8 B» Aaffri при нагрузках 3, 5, 10, 25 г. Точность измерений не превышает 10%. Монокристаллы молибдата кальция были выращены и образцы подготовлены в АО «Фомос-Материалы». Образцы представляли собой ориентированные кубики с гранью 10 мм. Исследовались образцы в исходном состоянии и после высокотемпературных отжигов разной продолжительности.

Получены первые результаты измерения микротвердости $CaMoO_4$. Показано, что данный материал является чрезвычайно хрупким, балл хрупкости составляет 4,5. Наблюдалась анизотропия микротвердости: на z-срезах при нагрузке 10 г микротвердость отожженных образцов выше, чем для x-срезов. Аналогичная зависимость наблюдалась и для образцов в исходном состоянии, однако, для таких образцов измерения удалось провести только при 5 г, так как при 10 г наблюдалось полное разрушение отпечатка.

Благодарности.
Исследования проведены в МУИЛ Полупроводниковых материалов и диэлектриков «Монокристаллы и заготовки на их основе» (ИЛМЗ) НИТУ «МИСиС».

1. С.И. Лебедева «Определение микротвердости материалов» -М.: Изд. АН СССР, 1963. - 122 с.
2. М.П. Шаскольская «Кристаллография: Учеб. пособие для ВТУЗов.» – М.: Высш. шк., 1984. – 376с.
3. А.А. Блистанов «Кристаллы квантовой и нелинейной оптики» - М.: Изд. МИСиС, 2000. – 358 с.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.206

ВЛИЯНИЕ АЗОТНОЙ ПЛАЗМЫ ПРИ СИНТЕЗЕ МЕТОДОМ МПЭ НА СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА INGAN НАНОСТРУКТУР

Лендяшова В.В., Сошников И.П., Котляр К.П., Гридчин В.О., Резник Р.Р., Драгунова А.С., Пирогов Е.В., Крыжановская Н.В., Цырлин Г.Э.

СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия, erilerican@gmail.com

Перспективными объектами для оптоэлектроники являются наноструктуры InGaN [1,2]. В частности, интеграция InGaN с высоким составом по In с кремнием открывает широкие возможности для реализации устройств, работающих от ультрафиолетовой до ближней инфракрасной области спектра [3]. Такие структуры могут быть выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) с плазменной активацией азота [4]. Поскольку их синтез мало исследован, влияние особенностей ростового процесса на свойства материала представляет большой интерес.

В данной работе было исследовано влияние азотной плазмы на завершающей стадии роста методом МПЭ на физические свойства наноструктур InGaN. Исследуемая серия образцов была синтезирована на подложках Si(111) при температуре 540°C в обогащенных азотом условиях. В процессе остывания после окончания роста часть образцов дополнительно подвергалась обработке азотной плазмой. Структурные и оптические свойства выращенных образцов были исследованы методами растровой электронной микроскопии, фотолюминесценции и рентгеновской дифрактометрии.

Образцы представляли собой частично сросшиеся InGaN наноструктуры со средней высотой массива порядка 2 мкм. Исследования с помощью метода рентгеновской дифрактометрии показали наличие в образцах вюрцитной и сфалеритной фаз вне зависимости от плазменной обработки. При этом состав по In образцов, выращенных без обработки азотной плазмой, однородный и соответствует x_{In}~0.35±0.07, в то время как на дифракционных спектрах образцов, подвергавшихся обработке плазмой, фиксировались два пика: x_{In}~0.20±0.07 и x_{In}~0.9±0.1. Исследуемые структуры при комнатной температуре демонстрировали пики фотолюминесценции в диапазоне от 472 до 485 нм, однако интенсивность люминесценции образцов, подвергавшихся обработке плазмой, была в 2-5 раз меньше.

Таким образом, показано, что обработка образцов на завершающей стадии роста в азотной плазме приводит к формированию областей с высоким составом по In. Это позволяет управлять оптическими свойствами синтезированных структур.

1. Дубровский В.Г., Цырлин Г.Э., Устинов В.М. // Semiconductors. – 2009. – № 43. – 1539.
2. Резник Р.Р., Котляр К.П., Хребтов А.И., Крыжановская Н.В., Цырлин Г.Э. // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – № 1410. – 012052.
3. Soto Rodrigues P.E.D. et al. // J. Appl. Phys. – 2013. – № 102. – 173105.
4. Li S., Waag A. // J. Appl. Phys. – 2012. – № 111. – 071101.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.207

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ОТРАЖАЮЩЕГО ПОКРЫТИЯ ВНУТРИВАКУУМНОГО ЗЕРКАЛА ТОКАМАКА ИТЭР К ВОЗДЕЙСТВИЮ АВАРИЙНОГО ВЫБРОСА ПАРА

Марчий Г. В.[1], Самсонов Д. С.[1], Терещенко И. Б.[1], Мухин Е. Е.[1], Губаль А. Р.[2], Филимонов В. В.[1], Комаревцев И. М.[1]

[1]*ФТИ им. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,* georgiy.marchiy@metalab.ifmo.ru
[2]*Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

Собирающие системы оптических диагностик ИТЭР должны обладать долговременной оптической стабильностью в условиях значительных вибрационных, радиационных, тепловых и прочих нагрузок. Внутривакуумная часть собирающей оптики диагностических систем может содержать 4–6 отражений, что предъявляет требования к коэффициенту отражения каждого зеркала ~92-95% в спектральном диапазоне от 500 до 1100 нм. На отражательную способность зеркал, находящихся не в прямой видимости плазмы, влияют многократный циклический нагрев до 250–300 С и аварийный выброс пара. При выбросе пара зеркало около 10 суток находится под воздействием высокой влажности, а также несколько часов при температуре более 250°С и высокой влажности.

Для одновременного достижения стойкости к пару, термоциклированию и требуемой отражательной способности зеркал выбрана конструкция покрытия NiV/Ag/NiVNx/(SiNx/SiOx)n/SiNx на подложке из стали SS316L(N)-IG. Слой Ag обеспечивает высокое отражение в широкой полосе спектра, а чередующиеся тонкие слои SiNx/SiOx создают барьер для коррозионных агентов (S, Cl, O), содержащихся в паре. Слои NiV и NiVNx служат для улучшения адгезии.

Для проверки работоспособности данной конструкции изготовлена и подвергнута испытаниям на стойкость к пару партия образцов с различными количеством защитных слоёв. Некоторые образцы до экспозиции в паре отжигались. Спектральная характеристика, морфология и элементный состав покрытия после экспозиции в паре исследовались методами оптической и электронной микроскопии, РСМА и спектрофотометрии.

После экспозиции в паре отражение всех образцов равномерно уменьшилось на 5–12%, а плотность и характер дефектов покрытия сильно отличались. При этом отражение образцов, предварительно прошедших отжиг, деградировало в среднем на 1,5% больше.

В результате анализа экспериментальных данных выдвинуты гипотезы, объясняющие полученные изменения отражения: увеличение диффузного отражения из-за увеличения шероховатости; доступ коррозионных агентов из пара к серебру путём диффузии через поры либо случайные проколы в защитном слое; деградация оптического пропускания защитных слоев при взаимодействии с паром и его компонентами.

Проверка перечисленных гипотез проводится путём моделирования роста пленки и воздействий на неё методом молекулярной динамики, оценки возможности протекания реакций с водой и коррозионными агентами с точки зрения термодинамики и электрохимии.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.208

КОМПОЗИТНЫЕ КАПСУЛЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ, АКТИВИРУЕМЫЕ НИЗКОЧАСТОТНЫМ ПЕРЕМЕННЫМ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Михеев А.В.[1,2], Бурмистров И.А.[2], Зайцев В.Б.[1], Веселов М.М.[1], Клячко Н.Л.[1], Букреева Т.В. [2,3], Трушина Д.Б.[2,4]

[1] Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, РФ, mikheev.av16@physics.msu.ru
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, РФ
[3] НИЦ «Курчатовский институт», Москва, РФ
[4] Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Москва, РФ

Перспективный подход, основанный на использовании внешних магнитных полей для доставки и управляемого высвобождения лекарственных препаратов, требует включения парамагнитных или суперпарамагнитных наночастиц в носители лекарств [1, 2]. Релаксация магнитного момента однодоменных магнитных наночастиц в переменном низкочастотном магнитном поле (НЧМП) происходит по Брауновскому механизму (нано-магнито-механический эффект) без выделения тепла [3], а возникающие в результате движения магнитных наночастиц деформации могут влиять на скорость высвобождения инкапсулированных веществ.
Основной целью работы является изучение влияния НЧМП на высвобождение декстрана, меченного изоцианатом тетраметилродамина (ТРИТЦ-декстран), из модифицированных магнитными наночастицами полиэлектролитных капсул, состоящих из комплекса полиаллиламин гидрохлорид/полистиролсульфонат. Для этого были синтезированы наночастицы Fe_3O_4, характеристики которых изучены методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, динамического рассеяния света, рентгеновской дифракции, магнитометрии и мессбауэровской спектроскопии. Композитные капсулы подвергали воздействию НЧМП интенсивностью 100мТл с частотами в диапазоне 30-160 Гц. Изучены временные зависимости поглощения суспензии композитных капсул под воздействием НЧПМП, по которым анализировали количество высвобожденного ТРИТЦ-декстрана. Содержание модельного соединения в оболочке капсул и в супернатанте определяли также с помощью флуоресцентной конфокальной микроскопии и спектрофотометрии. В результате сделан вывод об оптимальной длительности воздействия и частоте магнитного поля, при которых достигается наибольшее высвобождение ТРИТЦ-декстрана из капсул.

Авторы выражают благодарность Артёмову В.В. и Хмеленину Д.Н. за изучение образцов методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, Старчикову С.С. за анализ образцов методом мессбауэровской спектроскопии. Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-1109.2021.1.3.

Список литературы:

1. Li L., Yang W.W. and Xu D.G. // J. Drug Target. – 2019. – 27. Pp.423–33.
2. Torchilin V.P. // Fundamentals of Stimuli-responsive Drug and Gene Delivery Systems Fundamentals of Stimuli-responsive Drug and Gene Delivery Systems. – 2018. Pp.1-32.
3. Головин Ю.И, Жигачев А.О., Головин Д.Ю., Грибановский С.Л., Кабанов А.В., Клячко Н.Л. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020. – Т. 84. – С. 988–93.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.209

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ОБЪЕМНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИКАХ МЕТОДОМ ЛОКАЛЬНОГО ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОЭДС И СОПРОТИВЛЕНИЯ

Мозговой П.С., Новиков. С.В., Пшенай-Северин Д.А.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Росси, pasha.mozgovoi.989@mail.ru.

Термоэлектричество находит все большее применение в науке и технике. Это подталкивает к разработке новых материалов для более эффективного преобразования энергии в заданном интервале температур.

Разработка новых материалов, как правило, связана с получением большого числа объемных образцов. Серии образцов имеют различный состав, концентрацию легирующих примесей, наличие дополнительных фаз. Полученные образцы в дальнейшем исследуются структурными методами для уточнения состава и производится измерение транспортных свойств: удельного сопротивления, коэффициента термоэдс и теплопроводности.

Полученные результаты позволяют выбрать путь дальнейшей оптимизации образцов для получения максимальной термоэлектрической эффективности в заданном температурном интервале.

Современные методы производства объемных термоэлектриков не способны полностью избежать образования случайного локализованного дефекта (поры, трещины и т.п.). Поэтому возникает необходимость проверки полученных объемных образцов на их однородность неразрушающим методом.

В качестве метода проверки было выбрано сканирование термоэдс и сопротивления вдоль образца. В основе метода лежит измерение электрических параметров материала в отдельных точках при наличии градиента температуры.

В режиме измерения термоэдс ток через образец отсутствует, а между противоположными гранями поддерживается постоянный температурный градиент. Значение термоэдс снимается между зондом, перемещаемым вдоль образца, и одним из торцов образца. В режиме измерения сопротивления, через образец пропускается электрический ток и измеряется разность потенциалов.

В данной работе был выполнен теоретический расчет работы сканера. С помощью программного пакета Comsol были созданы модели объемного термоэлектрического материала с различными дефектами. В качестве дефектов были рассмотрены: поры, трещины, неоднородность состава, наличие посторонних фаз в объеме материала.

Было показано, что сканирование электрических параметров достаточно точно выявляет наличие неоднородностей вдоль образца. Полученные данные указывают на возможность определять размер и локализацию дефекта.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.210

ВЛИЯНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИИ НА СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА FE_7SE_8

Мозговых С. Н.[1*], Селезнева Н. В.[1], Шишкин Д.А.[1,2], Баранов Н.В.[1,2]

[1]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия*
[2]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*
[*]*e-mail: Stepan.Mozgovykh@urfu.ru*

Известно, что свойства слоистого ферримагнитного соединения Fe_7Se_8 с дефектной структурой типа NiAs существенно зависят от упорядочения вакансий, что определяется способом получения образцов. В зависимости от скорости охлаждения и упорядочения вакансий соединение Fe_7Se_8 образует сверхструктуры с утроенным (3C) или учетверенным (4C) периодом вдоль оси *c* относительно 1C гексагональной структуры NiAs. В обоих случаях в соединении реализуется спин-переориентационный переход с поворотом намагниченности от плоскости лёгкого намагничивания (плоскость *ab*) при комнатной температуре к оси лёгкого намагничивания (ось *c*) при температурах ниже 100 К. В структуре типа 4C этот переход сильно размыт по температуре и осуществляется в диапазоне от 100 до 250 К, тогда как в структуре 3C он происходит резко при температуре около 120 К путем фазового перехода 1-го рода и сопровождается гистерезисом [1]. Природа этого магнитного перехода остается невыясненной.

Целью исследования данной работы являлось выяснить, как отклонение от стехиометрии влияет на температуру магнитного упорядочения T_C, на критическую температуру и характер спин-переориентационного перехода в соединениях $Fe_{7\pm\delta}Se_8$. Образцы получали из высокочистого селена (99,999) и железа (99,98) в вертикальной градиентной печи, по методу Бриджмена. Аттестация образцов проводилась с помощью рентгеновской дифракции на дифрактометре Bruker D8 Advance, а также сканирующей электронной микроскопии. Измерения магнитных свойств проводились в температурном интервале от 80 до 550 К в полях до 17 кЭ на вибромагнетометре 7407 VSM (Lake Shore, USA). Установлено, что изменение параметров элементарной решётки образцов $Fe_{7\pm\delta}Se_8$ при $\delta < 0.15$ не превышает 1%. Обнаружено, что наибольшую зависимость от состава проявляет температура спиновой переориентации $T_{СП}$, тогда как температура магнитного упорядочения T_C практически не чувствительна к отклонению от стехиометрии и для всех изученных составов составляет около 450 К. Показано, что температура спиновой переориентации даже при $\delta = -0.1$ смещается почти на 30 К в сторону меньших температур. При этом род перехода так же меняется, он становится более размытым по температуре. При большем уменьшении железа размытие перехода существенно увеличивается; в соединении $Fe_{6.85}Se_8$ спиновая переориентация при охлаждении начинается при температуре ~150 К и при 80 К еще не заканчивается. Полученные результаты указывают на сильную зависимость спин-переориентационного перехода от концентрации и распределения вакансий в кристаллах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

Kawaminami M. Neutron diffraction study of Fe_7Se_8 II / M. Kawaminami, A. Okazaki // Journal of the Physical Society of Japan/ – 1970. – V. 29. – P. 649 – 655.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.211

КИНЕТИКА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ВНЕШНИМ ПОЛЕМ СТЕКЛОПОДОБНОГО СОСТОЯНИЯ В $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$

А.Ю. Молоков [1], А.Ф. Вакуленко [1], Е.Ю. Королева [2], С.Б. Вахрушев [2]

[1] *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *ФТИ имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
antonmol@mail.ru

Магнониобат свинца (PMN) – модельный сегнетоэлектрик – релаксор, обладает гигантским значением диэлектрической проницаемости в широком температурном диапазоне и активно исследуется уже много лет, однако природа его низкотемпературного стеклоподобного состояния до сих пор остается не ясной. Известно, что приложением внешнего электрического поля можно перевести магнониобат свинца в сегнетоэлектрическое состояние. [1-3]. Исследование процессов переключения в PMN в различных режимах приложения поля даст дополнительную информацию о природе стеклоподобной неэргодичной фазы PMN. В работе было исследовано влияние внешнего поля на диэлектрический отклик монокристалла PMN на измерительной частоте 1 Гц при двух температурах: 246 К и 220 К (рис).

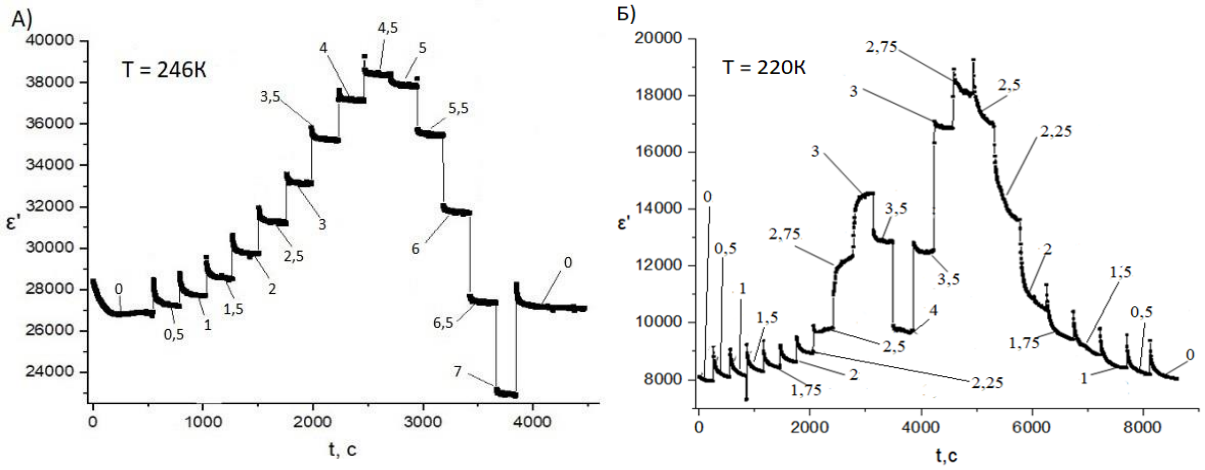


Рис. Зависимость ε' от времени при разных внешних полях при температурах 246К и 220К на частоте 1 Гц. Числа на графиках - величина внешнего электрического поля в кВ/см.

В определенном интервале электрических полей нам удалось пронаблюдать рост диэлектрической проницаемости при приложении поля, то есть положительный C-V эффект. Определен гистерезис фазового перехода из неэргодичного стекольного состояния в сегнетоэлектрическое состояние по полю на температуре 220К и уточнена E-T фазовая диаграмма PMN.

[1] Calvarin, G., Husson, E., & Ye, Z. G. (1995). X-ray study of the electric field-induced phase transition in single crystal Pb(Mg1/3Nb2/3)O3. Ferroelectrics, 165(1), 349–358.
[2] Е.В. Колла, С.Б. Вахрушев, Е.Ю. Королева, Н.М. Окунева. Свойства индуцированной полем сегнетоэлектрической фазы в монокристалле магнониобата свинца. ФТТ 38, 7, 2183 (1996).
[3] Pirc, R., Tadić, B., & Blinc, R. (1994). Nonlinear susceptibility of orientational glasses. Physica B: Condensed Matter, 193(2), 109–115.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.212

ГОМОГЕНИЗАЦИЯ ПОРОШКОВ АЛЮМИНИЯ И УПРОЧНЯЮЩИХ ДОБАВОК Al_2O_3 и SiC

Нарзуллоев У.У., Кутжанов М.К., Корте Ш., Ковальский А.М., Штанский Д.В.

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия, umedjon.20129798@gmail.com

Одним из методов повышения механических свойств алюминия (Al) является создание на его основе композиционных материалов (КМ) путем введения дисперсно-упрочняющих добавок. Разработка новых КМ на основе Al с дисперсно-упрочняющими добавками оксидов (Al_2O_3, SiO_2, TiO_2 и т. д.) и карбидов (SiC, WC, TaC, TiC и т. д.) позволяет расширять области их использования в машиностроительной, автомобильной и аэрокосмической промышленности. Так, благодаря высокой прочности при повышенных температурах, низкой плотности и коррозионной стойкости, КМ на основе Al с наночастицами Al_2O_3 и SiC применяются в производстве высокотемпературных, огнеупорных, износостойких и абразивных материалов. В настоящей работе, на основе предварительных теоретических расчетов [1] и экспериментальной обработки нанопорошков Al, предложена оптимизация методики гомогенизации порошковых смесей для синтеза КМ на основе различных металлов (Al, Ni, Cu и др.) с дисперсным включением керамических наночастиц Al_2O_3 и SiC.

В качестве исходного материала для работы использовался нанопорошок Al (d=100-150 нм) и керамические нанопорошки Al_2O_3 (d=80-150 нм) и SiC (d=40-90 нм). Были исследованы процессы смешения порошков Al и керамик с содержанием керамической фазы 5, 10 и 30 вес.%. Процесс гомогенизации порошков является одним из важнейших этапов подготовки материала, в значительной степени способствующим повышению физико-механических свойств КМ. Предварительно подготовленные и взвешенные в соответствующих соотношениях компоненты и загружались в размольные стаканы высокоскоростной шаровой мельницы (ВШМ) E_{max} (Retsch GmbH, Германия). Механоактивация смесей нанопорошков проводилась в интервале скоростей от 400 до 800 об/мин. в течение 20-60 минут.

Контроль результатов гомогенизации порошков проводился путем исследования структуры и элементного состава материалов после обработки в ВШМ методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и рентгеноспектрального микроанализа (ЭДС) на приборе JSM-7600F (JEOL Ltd., Япония). Результаты СЭМ исследования показали, что в смесях Al + керамика после перемешивания в ВШМ в течение 60 мин образовались агломераты частиц размером порядка 60-100 мкм, а при обработке в течение 20 минут отдельные частицы порошков сохранили свои исходные размеры. ЭДС исследование материалов путем картирования распределения элементов показало, что наночастицы SiC равномерно распределены по поверхности частиц Al. Хорошая корреляция распределения алюминия и кислорода по участкам образца Al-Al_2O_3 объясняется постоянным присутствием оксидной пленки на частицах алюминия и высокой устойчивостью фазы Al_2O_3. Структурный анализ материалов также показал, что после гомогенизации порошков в шаровой мельнице наблюдается плотный контакт между частицами Al и керамическими наночастицами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-33-90110.

Kvashnin, D.G., et al., Mechanical Properties of the Interface of Al/SiC Heteroparticles and Their Composites: a Theoretical and Experimental Study//Tech. Ph. Let., 2020. p. 342-345.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.213

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ АЦЕТОНОМ НА МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМОРФНОГО МАГНИТОМЯГКОГО СПЛАВА Co-Ni-Fe-Cr-Mn-Si-B

Некрасов Е.С., Денисов Н.Д., Скулкина Н.А.
Уральский федеральный университет, Россия, Екатеринбург,
ntesla2016@yandex.ru

Ленты быстрозакаленного аморфного магнитомягкого сплава АМАГ-172 (Co-Ni-Fe-Cr-MnSi-B) находят применение в магнитном экранировании, поскольку обладают высокими значениями максимальной магнитной проницаемости (μ_{max}). Ацетон широко используется для обезжиривания поверхностей материалов, в том числе и лент аморфных магнитомягких сплавов, 55входит в состав лаков, красок, клеев. В присутствии катализатора имеют место реакции окисления и гидрирования ацетона. Катализаторами этих реакций являются переходные металлы и их оксиды, которые присутствуют на поверхности лент исследуемых сплавов. В настоящей работе представлены результаты исследования влияния обработки ацетоном на магнитные характеристики ленты аморфного магнитомягкого сплава Co-Ni-Fe-Cr-Mn-Si-B в состояниях с положительной и отрицательной константами магнитострикции, так как грамотное использование ацетона способствует предотвращению нежелательных последствий ухудшения магнитных свойств, а также получению корректных результатов исследования. Длительности обработки выбирали соизмеримыми с длительностью полимеризации клея БФ-2 при комнатной температуре вследствие низкой скорости реакций ацетона с элементами поверхности ленты и варьировали от 20 до 46 часов. Исследования проводили на образцах в форме полос размерами 100x10x0.020 мм в закаленном состоянии и после термообработок (ТО) на воздухе, формирующих состояния с разными знаками константы магнитострикции: ТО 380 ^{o}C, 40 мин (λ_s>0). и ТО 370 ^{o}C, 10 мин (λs<0) [1]. Объем доменов с ортогональной намагниченностью ($V_{орт}$) определяли с помощью авторской методики [1,2]. В таблице 1 приведены результаты влияния обработки ацетоном поверхности образцов после термообработок.

Таблица 1. Влияние обработки ленты ацетоном на магнитные характеристики

Состояние ленты	μ_{max}	$V_{орт}$, %	η
Исходное, λ_s>0	430000	7,0	1,54
Обработка ацетоном	430000	7,8	2,77
Исходное, λs <0	540000	13,4	2,71
Обработка ацетоном	640000	11,7	1,63

Видно, что обработка поверхности ленты ацетоном способствует перераспределению намагниченности в ленте и оказывает противоположное воздействие на магнитные характеристики в состояниях с разными знаками константы магнитострикции. Это может быть следствием преимущественно плоских анизотропных сжимающих напряжений, индуцируемых в результате каталитического окисления и гидрирования ацетона.

1.Н.А.Скулкина, О.А.Иванов, А.К.Мазеева, П.А.Кузнецов, Е.А.Степанова, О.В.Блинова, Е.А.Михалицына, Н.Д.Денисов, В.И.Чекис, ФММ **118**, **12**, 1248 (2017).
2.Н.А.Скулкина, О.А.Иванов, Е.А.Степанова, Изв. АН, сер. физ. **65**, **10**, 1483 (2001).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.214

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $Fe_xTiS_{1.7}Se_{0.3}$

Носовец В.С., Шерокалова Е.М., Селезнева Н.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия, vadim.nosovets@urfu.ru

Предыдущие исследования показали, что внедрение железа в матрицу дихалькогенидов титана $TiCh_2$ (Ch = S, Se, Te) позволяет получать соединения с богатым разнообразием магнитных и электрических свойств, интересных как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Например, в системе $Fe_{0.5}Ti(S,Se)_2$ наблюдается магниторезистивный эффект до 27% для состава $Fe_{0.5}TiS_2$ и коэрцитивная сила до 56 кЭ для состава $Fe_{0.5}TiS_{1.7}Se_{0.3}$ [1]. Одним из барьеров для практического применения этих соединений является низкая температура магнитного упорядочения. Увеличение концентрации катионов и замещение по анионной подрешетке, позволяет управлять характеристиками этих материалов, например, увеличивать температуру магнитного упорядочения и изменять его тип.

В данной работе были получены поликристаллы $Fe_xTiS_{1.7}Se_{0.3}$ с концентрацией железа x = 0.66, 0.75, 0.85. Для синтеза использовали метод твердофазного ампульного синтеза в три стадии. Сперва получали матрицу $TiS_{1.7}Se_{0.3}$, затем внедряли в неё железо до состава $Fe_{0.5}TiS_{1.7}Se_{0.3}$ и, наконец, повторно внедряли железа до интересующей концентрации. Перед проведением всех измерений образцы проходили аттестацию на порошковом дифрактометре Bruker D8 Advance, затем в программном пакете FullProf уточняли их кристаллическую структуру. Для изучения магнитных свойств использовали вибрационный магнитометр LakeShore VSM 7407. С его помощью были измерены температурные зависимости намагниченности в диапазоне температур 80 К – 1000 К и полевые зависимости намагниченности в полях до 17 кЭ.

Полученные соединения имеют структурный тип дефектного NiAs. Железо в составах с x = 0.66 и 0.75 упорядочено внутри катионных слоёв, их структура является моноклинной сверхструктурой матрицы. У состава с x = 0.85 железо внутри катионных слоёв неупорядоченно, так что он обладает структурой матрицы $TiS_{1.7}Se_{0.3}$. Температура магнитного упорядочения для всех составов составляет около 120 К, она не увеличивается, несмотря на увеличение концентрации железа. В системе $Fe_xTiS_{1.7}Se_{0.3}$ с ростом концентрации железа выше $x > 0.66$ наблюдается переход из антиферромагнитного состояния в ферримагнитное, чего трудно ожидать при распределении железа только в железных слоях. Эффективный магнитный момент на ионе Fe^{2+} составляет ~ $4\mu_Б$, что ниже чисто спинового значения. Поэтому, учитывая результаты предыдущих исследований, можно ожидать наличие в этих соединениях большой магнитной анизотропии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. Baranov N.V. et al., Physical Review B **100**, 024430 (2019).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.215

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ РАСТЕКАНИЯ И ПРОПИТКИ ПОРИСТОГО ЖЕЛЕЗА РАСПЛАВОМ СЕРЕБРА

Жевненко С.Н., Петров И.С.
Национальный исследовательский технологический университет МИСиС,
г. Москва, Россия, ioannespetrovus@gmail.com

В докладе представлены результаты исследования капиллярных взаимодействий расплава серебра и твердого железа. В работе было проведено измерение кинетики растекания и контактного угла смачивания железа расплавом серебра методами падающей капли и методом пластинки Вильгельми. Пропитку изучали на пористых образцах, которые были получены путем спекания железного порошка чистотой 99,99 вес. % Fe в атмосфере водорода. Пористость образцов составляла 0,4–0,5. В качестве расплава было использовано серебро чистотой 99,999 вес. % Ag. Измерения были проведены в температурном интервале 1000-1150°C, в высоком вакууме 10^{-5} мм.рт.ст., методом прямого наблюдения с помощью высокоскоростной съемки с частотой до 10000 к/с на оборудовании, описанном в статье [1]. Снимки лежащей или впитывающейся капли, а также мениска при окунании пластинки в расплав обрабатывали с помощью программных комплексов ImageJ и DropShape. Скорость пропитки была определена по изменению объема перенесенной капли расплава на пористое при постоянном диаметре. Измерения капиллярных сил были проведены с помощью датчика веса, на котором была подвешена железная пластина, погружаемая в расплав. Были построены кинетические и температурные зависимости диаметра капли и контактного угла смачивания, а также скорости впитывания расплава. Анализ кинетических кривых впитывания проводили в рамках модели Дарси и термодинамической теории поверхностных явлений [2].

Работа выполнена в рамках гранта Президента Российской Федерации, проект № МД-1161.2020.2

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. – 2020. – С. 157886.
2. Попель С. И. Поверхностные явления в расплавах. – 1994.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.216

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВА $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{41,8}Cu_8$ В УСЛОВИЯХ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ВЫДЕРЖКИ

Пчельников П.А.[1], Демидова Е.С.[1], Беляев С.П.[1], Реснина Н.Н.[1], Шеляков А.В.[2]

[1]Санкт-Петербургский Государственный Университет, г. Санкт-Петербург, Россия
[2]Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ» (Московский инженерно-физический институт), Москва, Россия
st073586@student.spbu.ru

К настоящему моменту показано, что в ряде сплавов на основе TiNi возможно изотермическое образование мартенситной фазы в условиях выдержки при температурах, близких к температуре начала прямого превращения. Более того, обнаружено, что изотермическое образование мартенсита под действием постоянной нагрузки сопровождается изменением обратимой деформации. Показано, что в сплаве $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{44,8}Cu_5$ изотермическая деформация растет со временем выдержки до насыщения, величина которого немонотонным образом зависит от температуры выдержки и напряжения. Максимум изотермической деформации 3,5 % наблюдали в условиях выдержки при температуре $M_н^σ$ - 6 °C под нагрузкой 160 МПа. В то же время остается неясным, как изотермическая деформация зависит от температуры выдержки и напряжения в сплавах с другим соотношением никеля и меди. В связи с этим, целью работы явилось исследование изменения деформации в сплаве $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{41,8}Cu_8$ в условиях изотермической выдержки под нагрузкой внутри температурного интервала прямого перехода.

В качестве объекта исследования был выбран сплав $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{41,8}Cu_8$, испытывающий изотермический мартенситный переход. Образец охлаждали под нагрузкой до температуры выдержки, выдерживали в течение 60 минут и нагревали. Температуры выдержки выбирали внутри температурного интервала прямого перехода, напряжение меняли от 160 до 400 МПа.

Полученные результаты показали, что в сплаве $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{41,8}Cu_8$ наблюдается изотермическое изменение деформации, как и в сплаве $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{44,8}Cu_5$. Максимальная изотермическая деформация составила 3 % и была получена в условиях выдержки при температуре $M_н^σ$ – 6 °C под нагрузкой 240 МПа. Таким образом, можно заключить, что увеличение концентрации меди от 5 до 8 ат.% в четырехкомпонентном сплаве $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{49,8-x}Cu_x$ не подавляет изотермического изменения деформации и не влияет на температуру выдержки, при которой накапливается максимальная деформация. Однако напряжение, при котором достигается максимум изотермической деформации увеличивается, а сама деформация уменьшается. Вместе с тем, ресурс обратимой деформации в обоих сплавах одинаков и составляет 8 %. Таким образом, можно заключить, что напряжение по-разному влияет на кинетику изотермического перехода в сплавах $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{41,8}Cu_8$ и $Ti_{40,7}Hf_{9,5}Ni_{44,8}Cu_5$, что и приводит к тому, что максимум обратимой изотермической деформации различен и наблюдается при разных напряжениях.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-19-00226)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.217

МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ АСИММЕТРИЧНОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ.

Ракицкий М.А., Денисов К.С., Рожанский И.В., Аверкиев Н.С.

СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия, mixrak@gmail.com

В настоящее время большой интерес вызывают эффекты в полупроводниковых структурах, появляющиеся в присутствии спин-орбитального взаимодействия и нарушения симметрии к инверсии времени. Такие эффекты изучаются спинтроникой, и могут послужить основой для создания новых приборов для хранения и обработки информации. Наиболее известными эффектами в этой области являются аномальный и спиновый эффекты Холла.

В работе рассматривался объемный полупроводник с решеткой типа цинковой обманки, а также двумерная гетероструктура со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Симметрия к инверсии времени может быть нарушена за счет присутствия парамагнитных примесей или спиновой поляризации носителей заряда. Теоретическое исследование асимметричного рассеяния электронов на короткодействующем потенциале, содержащем скалярную и магнитную части, позволило обнаружить в объемном полупроводнике новый механизм аномального эффекта Холла, проявляющийся даже в отсутствие спиновой поляризации носителей заряда. С помощью кинетического уравнения Больцмана были найдены аналитические выражения для поперечного тока и холловского угла. Проведены численные оценки для нескольких материалов и предложен эксперимент по наблюдению изученного эффекта [1].

Также было рассмотрено асимметричное рассеяние дырок на короткодействующем потенциале. Обнаружено, что несмотря на обычно более сильную роль спин-орбитального взаимодействия для дырок, в рамках гамильтониана Латтинжера выражение для темпа рассеяния не содержит первых угловых гармоник, и асимметричное рассеяние для дырок отсутствует. Для его появления необходимо учитывать подмешивание других зон.

1. Ракицкий М.А., Денисов К.С., Рожанский И.В., Аверкиев Н.С. // Applied Physics Letters – 2021. https://doi.org/10.1063/5.0038288

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.218

АНАЛИЗ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ AL-MG СПЛАВА ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Гэн Я.[1,2,3], Панченко И.А.[1], Чэнь С.[2,3], Иванов Ю.Ф.[4], Розенштейн Е.О.[2], Коновалов С.В.[2,3]

[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия, i.r.i.ss@yandex.ru*
[2]*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, г. Самара, Россия, ksv@ssau.ru*
[3]*Университет Вэньчжоу, Вэньчжоу, Китай, chenxizhang@wzu.edu.cn*
[4]*Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия, yufi55@mail.ru*

Целью работы являлся анализ механических свойств образцов Al-Mg сплава ER 5356, изготовленных методом холодного переноса металла (ХПМ), после обработки поверхности импульсным электронным пучком. Испытания на растяжение осуществляли на плоских пропорциональных образцах в соответствии с ГОСТ 1497-84. Деформацию образцов осуществляли путем одноосного растяжения на установке Instron 3369 (скорость испытаний 2 мм/мин; температура 297 К). Результаты механических испытаний, полученные при растяжении образцов, изготовленных методами 3D-технологий после различных обработок поверхности импульсным электронным пучком, приведены на таблице 1. Можно наблюдать уменьшение предела прочности при растяжении (с 235 МПа до 214 МПа) с увеличением плотности энергии электронного пучка. Когда плотность энергии электронного пучка Es составляет 5 или 10 Дж/см^2, почти нет разницы в пределе прочности на растяжение. Когда Es составляет 15 Дж/см^2, наблюдается большое уменьшение предела прочности на разрыв. Предел текучести, когда Es превышает 5 Дж/см^2, снижается до 113 МПа. Модуль упругости при плотности энергии = 10 Дж/см^2 имел относительно высокое значение. Следует отметить, что значения относительного удлинения (24% ~ 28%) увеличиваются с увеличением Es. Однако наблюдается падение, когда Es составляет 15 Дж/см^2, что означает, что обработка поверхности электронным лучом может улучшить пластичность сплава Al-Mg, полученного аддитивным способом, но снизить жесткость.

Таблица 1. Результаты, полученные при растяжении образцов в изготовленных методами 3D-технологий после различных обработок поверхности электронным пучком

Плотность энергии Es, Дж/см^2	Преде прочности, МПа	Предел текучести, МПа	Относительное удлинение, %
0	235	127	24,1
5	229	122	28,6
10	228	114	28,2
15	214	113	25,1

Благодарности.
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-79-00194).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.219

ИЗМЕНЕНИЕ РЕЗИСТИВНЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТВЕРДОГО РАСТВОРА $(Pb_zSn_{1-z})_{0.8}In_{0.2}Te$ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОДЕРЖАНИЯ СВИНЦА.

Рудоминский А. Е., **Денисов Д. В.**, **Михайлин Н. Ю.**, **Шамшур Д. В.**

Физико-Технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия, sarudom97@gmail.com

В серии полупроводниковых твердых растворов $(Pb_zSn_{1-z})_{1-x}In_xTe$, при содержании индия, превышающем x > 0,02 наблюдается переход в сверхпроводящее (СП) состояние. Критические параметры СП перехода (температура T_c и магнитное поле H_{c2}) на порядок больше значений для известных полупроводниковых соединений со сравнимой концентрацией носителей заряда и достигают $T_c < 4.7$ К и $H_{c2}(0) < 40$ кЭ [1, 2]. Увеличенные критические параметры связаны с пиннингом положения уровня Ферми в примесной полосе индия на фоне непрерывного спектра сложной валентной зоны соединения. Т. к. критические параметры сверхпроводящего перехода увеличиваются при росте содержания индия в твердом растворе, для исследования были отобраны образцы с концентрацией In x = 0.2 (в пределах его растворимости в $(Pb_zSn_{1-z})_{1-x}In_xTe$). Отметим, что при низких температурах соединения могут проявлять свойства топологического изолятора [2].

На рисунке показаны температурные (T = 300 - 0.4 К) зависимости удельного сопротивления ρ(T) поликристаллических образцов $(Pb_zSn_{1-z})_{0.8}In_{0.2}Te$ с содержанием свинца $0.1 \leq z \leq 0.9$. Для составов с $z = 0.1 \div 0.4$ зависимости характеризуется металлическим ходом удельного сопротивления, с дальнейшим переходом в СП состояние. T_c соединения увеличивается с ростом содержания свинца $T_c = 2.9 - 4.1$ К. В $(Pb_zSn_{1-z})_{0.8}In_{0.2}Te$ с $z = 0.6 \div 0{,}9$ при $T < 150$ К наблюдается выраженный экспоненциальный рост удельного сопротивления, изменяющийся в соответствии с законом $\rho = \rho_0 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right)$. Энергия активации возрастает с увеличением z $E_A = 3.1 - 9.7$ мэВ. В области низких температур T < 4 К в образцах с z = 0.6 ÷ 0.9 наблюдается уменьшение сопротивления $(Pb_zSn_{1-z})_{0.8}In_{0.2}Te$, которое может быть вызвано переходом от объемной проводимости к проводимости по поверхностным состояниям. Отметим, что образец с z = 0.5 демонстрирует слабый экспоненциальный рост удельного сопротивления с $E_A = 0.7$ мэВ, с последующим СП переходом, характеризующимся наибольшими для исследуемой серии критическими параметрами $T_c = 4.1$ К и $H_{c2}(0) = 40$ кЭ.

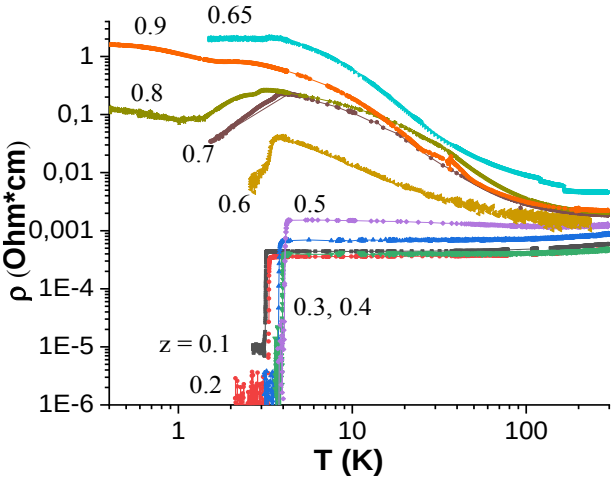


Рис. Температурные зависимости удельного сопротивления в $(Pb_zSn_{1-z})_{0.8}In_{0.2}Te$, содержание свинца z = 0.1 – 0.9 указано около кривых

1. R.V Parfenev, D.V. Shamshur, S.A Nemov, Phys. Solid State 43 (2001) 1772.
2. R. Zhong, J. Schneeloch, Q. Li, W. Ku, J. Tranquada, G. Gu, Crystals 7 (2017) 55.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.220

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАЗОРИЕНТАЦИИ ЗЁРЕН В МУЛЬТКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ КОНТРАСТА ИЗОБРАЖЕНИЯ СЭМ

Пещерова С.М.[1], Непомнящих А.И.[1], Павлова Л.А.[1], Чуешова А.Г.[1], Зубрицкий С.М.[2], Рыбьяков М.Ю.[2], Довченко Л.К.[2]

1 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук
2 Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет»
г. Иркутск, Россия, spescherova@mail.ru

Границы зёрен в мультикристаллическом кремнии являются протяжёнными дефектами, обуславливающими его электрофизические свойства. Способность к сегрегации примесей и аккумулированию дислокационных кластеров, выполняющих роль центров рекомбинации, во многом зависит от строения границы. А именно, в соответствии с кристаллографическими параметрами зёрен, образующих границу, она характеризуется определёнными значениями угла разориентации и осью вращения [1]. Кроме того, границы зёрен подразделяются на случайные (R, со случайным углом разориентации) и специальные (CSL, с решёткой совпадающих узлов). В зависимости от типа границы способны проявлять различную степень рекомбинационной активности [2]. Соответственно, важно понимать, как и какие условия кристаллизации влияют на формирование межзёренных границ [3]. Использование таких методов анализа структуры, как дифракция обратно-рассеянных электронов (EBSD) и сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), позволяет анализировать межзёренные границы и их геометрические особенности, а также устанавливать некоторые взаимосвязи с условиями кристаллизации. В электронных сканирующих микроскопах новейшего поколения (TESCAN MIRA 3 LMH) за счёт катода Шоттки, обеспечивающего высокую интенсивность электронов, падающих на образец, наблюдается ориентационно-чувствительный контраст изображения на полированных поверхностях образцов мультикристаллического кремния (Рис. 1).

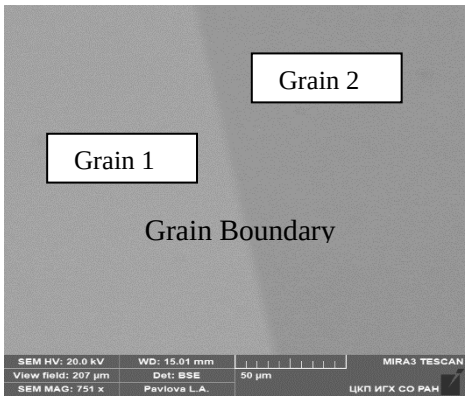


Рис. 1. Контрастное изобра-жение СЭМ в обратно-рассеянных электронах (TESCAN MIRA 3 LMH).

Алгоритм идентификации специальных границ наклонного типа, основанный на сопоставлении и анализе контрастных изображений СЭМ и соответствующих им изображений EBSD, является оригинальным и значимым для постановки и решения задач материаловедения [3].

Исследование проведено в рамках выполнения гос. задания по Проекту № 0284-2021-0004 «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол».

Литература:

1. A. Morawiec, Applied Crustallography 44 p. 1152-1156 (2011);
2. K. Adamczyk, R. Søndena, G. Stokkan, E. Looney, M. Jensen, B. Lai, M. Rinio, and M. Di Sabatino, Journal of applied Physics 123, 055705 (2018);
3. S. Canovic, T. Jonsson and M. Halvarsson, Journal of Physics: Conference Series 126 (2008) 012054.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.221

СТРУКТУРНЫЙ АСПЕКТ ИНДУЦИРОВАННОГО ДАВЛЕНИЕМ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В КРИСТОБАЛИТЕ SIO2

Савин А.В.
Санкт-петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия, **alekssavin97@gmail.com**

Кристобалит – одна из полиморфных модификаций кремнезема SiO_2. Многочисленными экспериментами было установлено, что под давлением тетрагональный α-кристобалит (основное состояние, устойчивое при нормальных условиях) превращается в моноклинный кристобалит-II. Можно показать, что обе структуры могут быть получены из кубической структуры (β-кристобалит) путем RUM (rigid unit mode) деформаций, но комбинации RUM, приводящие к тетрагональной и моноклинной структурам, существенно различны. Как следствие, между группами симметрии этих фаз нет соотношения группа-подгруппа. Следовательно, применение к описанию данного фазового перехода теории Ландау требует определения структуры промежуточной фазы, группа симметрии которой может быть либо общей подгруппой, либо общей супергруппой.
В ходе работы были выполнены неэмпирические расчёты в рамках теории функционала плотности:

1. Исследованы структурные параметры α, β и II-фаз кристобалита;
2. Рассчитаны фононные спектры, теоретически определены спектральные кривые комбинационного рассеяния и ИК-поглощения этих фаз;
3. Исследована эволюция структуры и спектров α и II-фаз кристобалита под действием внешнего давления;
4. Проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными.

Хорошее совпадение экспериментальных данных с результатами расчета позволило подтвердить адекватность выбранного метода расчёта.
На втором этапе работы была определена структура с группой симметрии, которая является общей подгруппой групп симметрии α и II кристобалитов. Это моноклинная структура с пространственной группой $P2_1$. Представление структур α-кристобалита и кристобалит-II в установке группы $P2_1$ позволило определить схему корреляции фононных состояний и определить моды, конденсация которых может запускать структурное превращение при α → II переходе.

Благодарности.
Автор благодарит своих научных руководителей М.Б. Смирнова и Е.М. Рогинского за помощь в постановке задачи и освоении методов исследования, а также ресурсный центр СПбГУ за предоставленные возможности проведения расчетов.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.222

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛИКАПИЛЛЯРНОЙ ЛИНЗЫ ДЛЯ МОДЕЛЬНЫХ XAFS ИЗМЕРЕНИЙ НА ВЭППП-3

Дарьин Ф. А., Светохин С. С., Скляров А. Н., Ракшун Я. В., Чернов В. А.
Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск, Россия,
S.G.U@yandex.ru
Кривенцов В. В.
Институт катализа имени Г. К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск, Россия,

Метод XAFS спектроскопии позволяет избирательно исследовать локальную структуру вещества и его валентное состояние. Особенно это актуально для разнообразных наноразмерных систем, в частности, для нанесенных катализаторов. Отдельную задачу представляет собой проведение исследований каталитических реакций в режиме in situ. Как правило, процентное содержание нанесенного активного компонента катализаторов, используемых в реальных каталитических процессах, весьма низкое (менее 1%). Вполне очевидно, что применение других физико-химических (рентгеноструктурных) методов для получения информации об изменениях состояния и локальной структуры, в процессе работы катализаторов весьма проблематично.

С целью решения данной задачи на экспериментальной станции EXAFS спектроскопии накопителя ВЭПП-3 был проведен модельный эксперимент по регистрации спектров поглощения и флуоресценции внутри капилляра, заполненного веществом. При этом, монохроматизированное синхротронное излучение фокусировалось внутрь капилляра с помощью поликапиллярной линзы для того, чтобы локально поднять плотность потока, возбуждающего излучения. В качестве модельного вещества была взята медь (99%) и металл-углеродный композит, на основе нанесенной платины, с содержанием активного компонента менее 1%. По результатам исследования установлено, что полученные данные пригодны для дальнейшего анализа.

Работа проводилась в рамках проекта РФФИ 19-05-50046. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.223

ОСОБЕННОСТИ ДВУХСТОРОННЕЙ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ОПТИЧЕСКИХ ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПЛАСТИН

Сагателян Г.Р., Бобков А.В. Дубовик Н.Н. Сладков Д.П.

Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана. г. Москва, Россия, bauman@bmstu.ru

С каждым годом требования к плоскопараллельности сторон оптических деталей повышаются. В современных технологиях требуются отклонения от плоскопараллельности не более 1 мкм. Для исследования возможностей получения оптических пластин с требуемыми параметрами в МГТУ им. Н.Э. Баумана был разработан, спроектирован и изготовлен настольный плоскодоводочный станок эксцентрикового типа СО-2 для двухсторонней доводки оптических деталей.

Для изучения особенностей двухстороннего полирования и шлифования было принято решение о проведении серии экспериментов, в которых в качестве образцов были использованы кварцевые пластины различных форм и размеров. Были проведены испытания с использованием связанного и свободного абразива, а также с различными сепараторами. Сепараторы были использованы для контроля положения деталей в установке. Некоторые сепараторы позволяли деталям совершать дополнительное вращение. В ходе экспериментов были найдены оптимальные условия обработки заготовок в лабораторных условиях. Также была замечена тенденция к большему съему материала по краям заготовок. Был выдвинут ряд гипотез о причинах подобной тенденции. Одна из них, проблема разнотолщинности деталей. Использование полученных данных позволило поднять качество получаемых изделий на порядок.

Благодарности.

1. Сагателян Г.Р. Бобков А.В. Бобков А.В. Новый станок эксцентрикового типа для двухсторонней доводки оптических плоскопараллельных пластин

2. Кондратенко В.С., Сагателян Г.Р., Бобков А.В. Двухстороннее шлифование оптических деталей связанным алмазно-абразивным инструментом. - Российская научно-техническая конференция с международным участием. Инновационные технологии в электронике и приборостроении [Электронный ресурс]: Сборник докладов конференции «Инновационные технологии в электронике и приборостроении» Физико-технологического института РТУ МИРЭА. Секция 9. — М.: РТУ МИРЭА, 2020. — Т. 2. С. 38-43.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.224

ОПТИЧЕСКОЕ ВЫСТРАИВАНИЕ И ОПТИЧЕСКАЯ ОРИЕНТАЦИЯ ЭКСИТОНОВ В АНСАМБЛЕ КОЛЛОИДНЫХ НАНОПЛАТЕЛЕТОВ

Смирнова О.О.[1,2], Родина А.В.[2]

[1]*Национальный исследовательский университет ИТМО,*
г. Санкт-Петербург, Россия, smirnova.olga248@gmail.com
[2]*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия*

Обменное взаимодействие электрона и дырки в коллоидных нанокристаллах, усиленное благодаря эффекту размерного квантования и диэлектрическому контрасту, приводит к расщеплению уровней светлого и темного экситона на энергию порядка 2-5 мэВ [1]. Анизотропия формы наноплателетов (двумерных нанопластин) в плоскости понижает симметрию и приводит к дополнительному расщеплению спиновых подуровней тонкой структуры. Последнее влияет на поляризационные свойства исследуемых структур, позволяя оценивать энергетические расщепления между уровнями и соотношения характерных времен в системе. При оптическом возбуждении экситонов линейно поляризованным светом возникает линейная поляризация регистрируемой фотолюминесценции (ФЛ) – эффект оптического выстраивания. Возбуждение циркулярно поляризованным светом может приводить к циркулярно поляризованному излучению. Недавно данные эффекты наблюдались экспериментально в ансамбле коллоидных наноплателетов CdSe с оболочкой из CdS.

В представленной работе теоретически изучается влияние внешних параметров - температуры и магнитного поля в геометрии Фарадея - на эффекты оптического выстраивания и оптической ориентации в коллоидных наноплателетах CdSe/CdS, произвольно ориентированных на подложке. Предложена модель, учитывающая взаимодействие двухуровневых подсистем светлого и темного экситона, а также их внутреннюю релаксацию. Рассмотрено резонансное поляризованное возбуждение светлого экситона с последующей передачей поляризации в нижние по энергии уровни темного экситона. Излучательная рекомбинация темного экситона активируется благодаря подмешиванию светлых состояний. Увеличение населенности состояний светлого экситона с повышением температуры приводит к возрастанию его относительного вклада в интенсивность ФЛ. Однако, итоговая поляризация ФЛ уменьшается с ростом температуры вследствие ускорения релаксации между подуровнями как светлого, так и темного экситона. Активация переходов из темного экситона в светлый с ростом температуры дополнительно влияет на поляризацию светлого экситона.

Магнитное поле в геометрии Фарадея смешивает линейно поляризованные диполи и превращает их в эллиптически, а в больших полях – в циркулярно поляризованные компоненты. Это приводит к подавлению линейной поляризации в случае линейно поляризованной накачки, повороту плоскости поляризации и появлению циркулярно поляризованного излучения. Анизотропные расщепления светлого и темного экситонов сильно отличаются по величине, что позволяет различать их контуры (широкий и узкий) в зависимости эффекта выстраивания от величины магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-52-12064).

Shornikova E.V. et al. // Nanoscale. – 2018. – 10. – 646.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.225

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ ТОНКИХ ПЛЁНОК NBN МЕТОДОМ ШУМОВОЙ ТЕРМОМЕТРИИ

Солдатенкова М.Д.[1], Баева Э.М.[1,2], Тризнова А.Д.[1] Золотов Ф.И.[1,2], Кардакова А.И.[1,2], Гольцман Г.Н.[1,2]

[1]Московский Педагогический Государственный Университет, Москва 119435, Россия
[2]Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва 101000, Россия, soldatenkova.mariya.99@mail.ru

Определение сценария тепловой релаксации – важнейшая задача для оптимизации различных детекторов и устройств, работающих при низких температурах. [1]. Экспериментальные результаты, связанные с изучением теплового транспорта в низкотемпературном режиме, обычно описываются различными моделями [2-4], которые включают в себя электрон-фононное взаимодействие в металлах и тепловое сопротивление Капицы. Однако некоторые эксперименты, связанные с изучением тепловых свойств низкотемпературных устройств, создают дополнительные интригующие вопросы. Например, наблюдаемое время ухода фонона в подложку, которое ограничивает отклик сверхпроводящих детекторов одиночных фотонов [5-7], намного больше, чем время пролёта баллистических фононов. Недавно несколько исследований [9-11] объяснили этот эффект, рассматривая дополнительные механизмы ограничения тепла. В работе [11] показано, что узкое горло может возникать из-за небольшой длины свободного пробега фонона lph в подложке. Тем не менее, тепловые свойства устройств на кристаллической подложке с большой величиной lph всё еще остаются под вопросом. В данной работе исследуется механизм теплового транспорта в металлических плёнках NbN разной толщины на кристаллических подложках (Al2O3, Si, and GaN) методом шумовой термометрии в температурном диапазоне 15-50K. Мы наблюдаем, что измеряемая теплоотдача в образцах отлична от ожидаемого электрон-фононного механизма и не может быть интерпретирована в рамках акустического рассогласования, которое подразумевает баллистический пролёт фонона в подложку. Наши результаты актуальны для различных электронных устройств, работающих при низких температурах.

Благодарности.
Шумовые измерения выполнены в рамках РНФ проекта 19-72-10101

[1] Giazotto F, Heikkila T, Luukanen A, Savin A M, Pekola J P 2006 Rev. of Modern Physics 78 217
[2] Krause S, Mityashkin V, Antipov S et al. 2016 IEEE Trans. on Ter. Sci. Technol. 7 1 53-59
[3] Baghdadi et al 2020 Phys. Rev. Applied 14 054011
[4] Nozdrin Yu N, Levichev M Yu, Okomel'kov A V et al. 2020 J. Phys. D: Appl. Phys. 53 395301
[5] Annunziata A J, et al. 2010 Journal of Applied Physics 108 084507
[6] Marsili F, Najafi F, Herder C and Berggren K K 2011 Appl. Phys. Lett. 98 093507
[7] Zhang L et. all. 2019 Appl. Phys. Lett. 115 132602
[8] Sidorova M et al 2020 Phys. Rev. B 102 054501
[9] Sidorova M et al 2018 Phys. Rev. B 97 184512
[10] Baeva E M et al 2020 JETP Letters 111 2 104-108
[11] Baeva E M et al 2021 arXiv/3563012

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.226

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ ТОНКИХ ИНДИЕВЫХ НАНОПРОВОЛОК В КАМЕРЕ ПЭМ

Степанов М.Е.[1], Карабулин А.В.[1,2], Матюшенко В.И.[3], Ходос И.И.[4]

[1]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка,* stepanov_me@mail.ru
[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва*
[3]*Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук в г. Черноголовке*
[4]*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка*

Предметом исследования являлись нанопроволоки из индия диаметром ~10 нм, полученные с помощью импульсной лазерной абляции индиевой мишени в объеме сверхтекучего гелия. Данный метод позволяет продуктам абляции конденсироваться в виде трёхмерных сетей, состоящих из нанопроволок с высоким (10-100) характеристическим отношением. В настоящем исследовании нанопродукты осаждались на поверхности стандартной сеточки для просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), после чего переносились в камеру микроскопа JEOL JEM-2100. Первоначально электронная дифракция образцов показала наличие только ГЦК поликристаллического индия, как это видно из Рисунка 1a (объемный индий кристаллизуется в тетрагональной решетке, но уплотнение упаковки не является редкостью для наноструктур). Однако уже через несколько минут (время получения снимков, представленных на Рисунке 1b-d), картина дифракции образца претерпела качественные изменения – на ней возникли линии, соответствующие оксиду In_2O_3. При этом, как отчетливо видно из Рисунка 1, удалось зафиксировать in situ продольное движение фронтов кристаллизации (окисления), происходящее за минутные времена наблюдения.

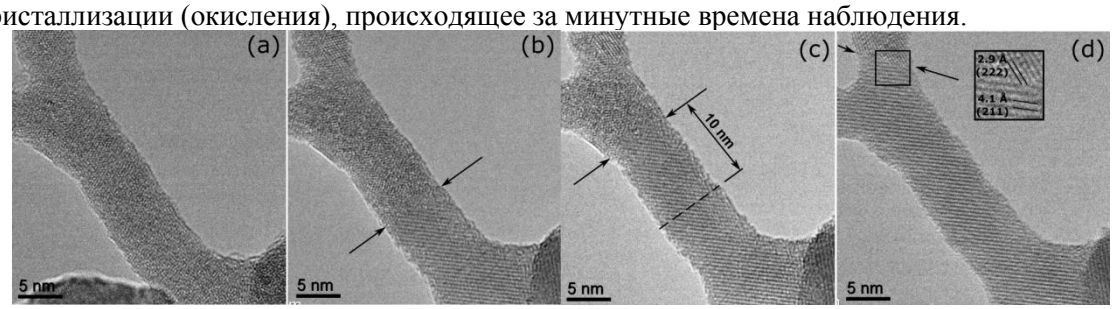


Рисунок 1. ПЭМ-изображения участка In нанопроволоки, полученные в последовательные (от (a) до (d)) моменты времени с задержкой ~1 мин. Стрелками обозначено положение фронта окисления.

Как показывают оценки, сделанные на основании молекулярно-кинетической теории газов, наблюдаемая скорость движения оксидного фронта не может быть объяснена в рамках воздействия на проволоку одного только окружающего кислорода из камеры ПЭМ (давление в камере 10^{-4} Па). Для поддержания наблюдаемой скорости окисления необходимы дополнительные источники кислорода, в роли которых могут выступать как поверхность проволок, так и межзёренные границы внутри проволок.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.227

Теоретические и вычислительные аспекты фазовых переходов в двумерных халькогенидах

Р. С. Степанов [1], Ю. Сайто [2], П. Фонс [3], А. В. Колобов [1,2]

[1]*Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена*

[2]*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan)*

[3]*Keio University (Japan)*

тел: (995) 600-4912, эл. почта: step-rom-serg@mail.ru

Динамика фазовых переходов в индуцированных топологическими изменениями материалах представляется интересной и перспективной теоретической задачей. Особенно интересно рассматривать фазовые переходы в двумерных системах. Первой теорией, описывающей фазовые переходы, стала теория Ландау, в ней впервые было введено понятие параметра порядка [1]. Дальнейшее развитие теория получила в работах Таулеса, Костерлица и Березинского [2-5], она позволила объяснить возможность существования сверхтекучести в тонких слоях жидкого гелия. Кроме того, данная теория применима для описания магнитных свойств двумерных материалов. Значительных результатов добилась теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Гальперина-Нельсона-Янга [7,8], в которой утверждается, что плавление происходит путем диссоциации дислокационных пар, которые могут являться топологическими дефектами. К сожалению, работ, в которых рассматривались бы фазовые переходы реальных двумерных материалов с различной природой межатомных взаимодействий, в настоящее время довольно мало. Наша работа стремится дать представление о топологических изменениях, которые приводят к фазовому переходу. В работе представлен анализ вычислительных экспериментов по плавлению MoS2, Sb2Te3 и InSe. С учетом природы сил взаимодействия выясняется модель, согласно которой происходит фазовый переход.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-52-50012).

Литература

[1] Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 7 (1937), 627; Собрание трудов, Т. 1, Наука, М., 1937, 253; Landau L., Phys. Z. Sowjetunion, 11 (1937), 545

[2] Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids.(Application of dislocation theory) //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1972. – Т. 5. – №. 11. – С. L124.

[3] Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1973. – Т. 6. – №. 7. – С. 1181.

[4] Kosterlitz J. M. The critical properties of the two-dimensional xy model //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1974. – Т. 7. – №. 6. – С. 1046.

[5] Kosterlitz J. M. Kosterlitz–Thouless physics: a review of key issues //Reports on Progress in Physics. – 2016. – Т. 79. – №. 2. – С. 026001.

[7] Halperin B. I., Nelson D. R. Theory of two-dimensional melting //Physical Review Letters. – 1978. – Т. 41. – №. 2. – С. 121.

[8] Nelson D. R., Halperin B. I. Dislocation-mediated melting in two dimensions //Physical Review B. – 1979. – Т. 19. – №. 5. – С. 2457.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.228

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОБРАЗЦОВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА С ДОБАВКАМИ NI

Степанова К.А., Катаев В.А.
Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия, novask98@mail.ru

Магнитомягкие сплавы на основе железа типа Finemet (Fe-Cu-Nb-Si-B) с нанокристаллической структурой показывают высокий уровень магнитных свойств и низкие магнитные потери. Вариация состава сплавов позволяет оптимизировать магнитные характеристики изделий из этих материалов, а учет влияния температуры прогнозировать изменение характеристик в процессе эксплуатации [1].

В данной работе исследовали влияние замещения Fe на Ni от 0 до 15 мас.% в составе ленты, а также температуры в диапазоне от 19 до 100 °C на изменение магнитных свойств образцов в области слабых полей. Исследование проводили на тороидальных образцах, прошедших термообработку для формирования нанокристаллической структуры. Магнитные свойства определяли в статическом режиме на измерительно-вычислительном комплексе ММКС-05. Погрешность измерения магнитной индукции и напряженности магнитного поля не превышала ± 3% и ± 2%.

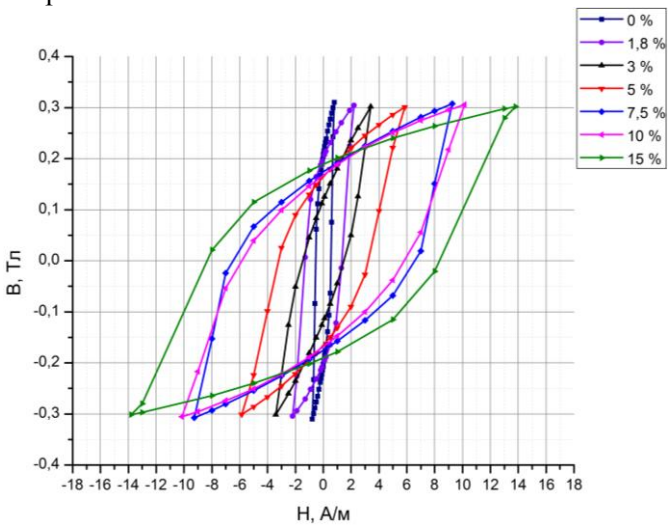


Рисунок 4 – Петли магнитного гистерезиса (B_m = 0,3 Тл) образцов с различным содержанием Ni

Как видно из рис. 1 с увеличением содержания Ni потери на гистерезис и коэрцитивная сила растут. Замещение Fe на Ni в сплаве приводит к изменению состава твердого раствора нанозерен, и соответствующему изменению констант магнитной анизотропии, а также, возможно, к образованию новых фаз при повышенном содержании Ni. Это может приводить к изменению соотношения между процессами вращения намагниченности и смещения ДГ [1]. Потери при смещении ДГ связаны с микровихревыми токами в процессе скачков Баркгаузена, поэтому свой вклад может вносить изменение электросопротивления.

Как показали температурные измерения для образцов с различным содержанием Ni потери на гистерезис при повышении температуры от 19 до 100 °C в среднем снижаются на 20 %. Для образцов с 15 % Ni потери уменьшают на 38 %. Поскольку с повышением температуры возрастает электросопротивление [2], то этот результат указывает на существенную роль вихревых токов в формировании магнитных потерь в данных сплавах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, тема № FEUZ-2020-0051. Авторы благодарны Ю.Н. Стародубцеву за предоставленные образцы сплавов.

1. Kataev V.A., Starodubtsev Yu.N., and Bessonova K.O., J. Phys.: Conf. Ser., vol. 1389, 012120 (2019).

2. Лившиц Б.Г., Крапошин В.С., Линецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1980. 320 с

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.229

ОСАЖДЕНИЕ СЛОЕВ ОКСИДА ГАЛЛИЯ НА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ПОДЛОЖКИ МЕТОДОМ СУБЛИМАЦИИ

Тарванен Д.А.[1,2], Крымов В.М.[1], Николаев В.И.[1]
[1]ФТИ им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия
[2] СПбПУ им. Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия,
d_tarvanen@mail.ru

Оксид галлия (III) является самым широкозонным среди прозрачных полупроводниковых оксидов. Край оптического поглощения всех полиморфов Ga_2O_3 находится в области глубокого ультрафиолета (УФ-С). При легировании кремнием и оловом Ga_2O_3 приобретает значительную электропроводность n-типа и имеет при этом высокое напряжение пробоя [1]. Ввиду этих качеств материала, все больше внимания уделяется не только изучению его свойств, но и развитию технологии его получения для дальнейшего практического применения.

В настоящее время объемные кристаллы β-Ga_2O_3 выращивают методами кристаллизации из расплава при температурах ~1800°C [1]. Тонкие пленки оксида получают эпитаксиальными методами при температурах 500-1000°C [2]. Исходя из того, что оксид галлия возгоняется, начиная уже с 1000°C, есть возможность получения слоев и кристаллов оксида галлия методом сублимации [3].

Эксперименты были проведены на установке «ГРАНАТ-2М» с резистивным нагревателем. В качестве источника использовался порошок оксида галлия чистоты 99,999% помещенный в сапфировый тигель. В ряде экспериментов в качестве дополнительного источника добавляли небольшое количество металлического галлия весом до 0,3 Г.

Осаждение из паровой фазы производилось на подложки сапфира и карбида кремния базисной ориентации через диафрагму диаметром 5 мм, расположенную наверху сапфирового тигля. В ходе проведения экспериментов ~~от образца к образцу~~ варьировались следующие технологические параметры: давление внутри камеры, рабочая температура, длительность осаждения.

Полученные образцы представляют собой тонкие оптически полупрозрачные пленки с оттенком белого, толщиной в несколько единиц микрон. Состав пленок, оцененный с помощью энергодисперсионной спектроскопии, подтвердил, что пленки соответствуют Ga_2O_3. На рентгеновских дифрактограммах всех слоев, выращенных при температурах 1250-1400С, как и ожидалось, присутствуют характерные пики для высокотемпературной β-Ga_2O_3. Вместе с тем есть и широкие пики, которые требуют дополнительного исследования. Интересным оказался результат исследования спектров оптического пропускания. Край оптического поглощения не соответствует β-Ga_2O_3, сдвинут в коротковолновую область.

Данная работа – одна из немногих, где рассмотрено поведение оксида галлия при температурах 1250-1400С.

Список литературы

1. H. Aida, K. Nishiguchi, H. Takeda, N. Aota, K. Sunakawa, Y. Yaguchi // Japanise Journal of Applied Physics, 47(11), 2008, 8506
2. V.I. Nikolaev, S. I. Stepanov, A.I. Pechnikov, S.V. Shapenkov, M.P. Scheglov, A.V. Chikiryaka, O.F. Vyvenko // ECS Journal of Solid State Science and Technology, 2020, 9, 045014
3. В.Н. Маслов, В.И. Николаев, В.М. Крымов, В.Е. Бугров, А.Е. Романов, ФТТ, 2015, том 57, вып. 7, 1315-1319

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.230

ПРИМЕСНАЯ ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК CdHgTe: ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ВАКАНСИИ РТУТИ И ФЛУКТУАЦИИ ПОТЕНЦИАЛА

Уаман Светикова Т.А.[1,*], Иконников А.В[1]

[1] МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Российская Федерация

**aurelia8002@gmail.com*

Твердые растворы $Cd_xHg_{1-x}Te$ (кадмий — ртуть — теллур, КРТ) активно используются для создания детекторов среднего инфракрасного (ИК) диапазона [1]. Варьируя долю кадмия в растворе, можно менять ширину запрещенной зоны полупроводника. Существенное влияние на характеристики оптоэлектронных приборов оказывают примесно-дефектные центры, которые значительно уменьшают времена безызлучательной рекомбинации. Наиболее распространенной примесью в твёрдых растворах КРТ является вакансия ртути — двухвалентный акцептор [2].

В данной работе измерялись спектры фотопроводимости (ФП) и гальваномагнитные характеристики узкозонных твёрдых растворов КРТ при различных температурах (4.2 – 100 К). Исследуемые образцы выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs (013) и имели дырочный тип проводимости после специального отжига[3]. В спектрах ФП были идентифицированы особенности, связанные как с межзонным поглощением, так и с ионизацией примесно-дефектных состояний. Обсуждается природа возникновения особенностей и влияние флуктуаций потенциала на температурные зависимости их интенсивностей.

В спектрах ФП наблюдается ряд субщелевых особенностей (см. рис. 1). Особенности на 10 и 18 мэВ связываются с ионизацией вакансии ртути, являющейся двухзарядовым акцептором. Пронаблюдав температурную эволюцию данных примесных полос ФП и сравнив с теоретическими расчетами, можно сделать вывод, что данные особенности связаны с переходом дырок на мелкие возбужденные уровни вакансии ртути с последующей термической активацией. Кроме того, существование максимума температурной зависимости при 7-9 К, их сдвиг при разной скорости охлаждения образца и сильное различие термической и оптической ширин запрещенной зоны для некоторых образцов может говорить о наличии дополнительного барьера для носителей заряда. Роль такого барьера могут играть флуктуации потенциала, возникающие при отжиге структур.

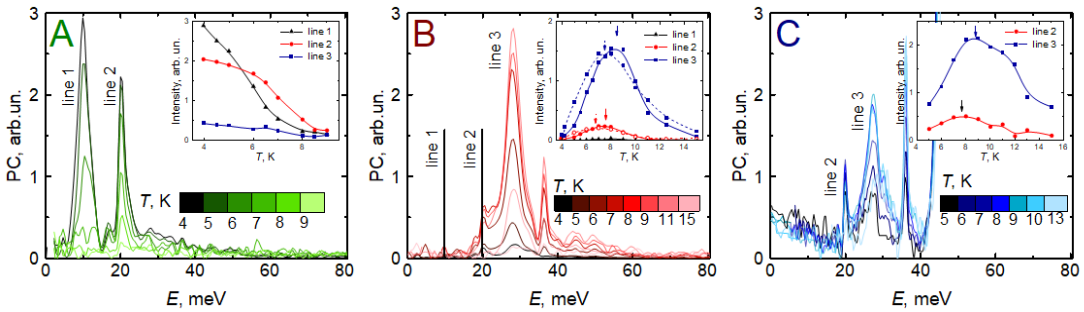


Рисунок 1 Спектры примесной фотопроводимости характерных образцов. На вставках: температурные зависимости интенсивности примесных линий. Сплошными линиями для медленного охлаждения, пунктирными – для быстрого.

1. A. Rogalski // Opto-Electron. Rev. 20, 279 (2012).
2. V. V. Rumyantsev et. al // Semicond. Sci. Technol. 32, 095007 (2017)
3. Козлов Д.В. и др.// ФТП 9, 53 (2019)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.231

ГАДОЛИНИЙ-АЛЮМИНИЙ-ГАЛЛИЕВЫЙ ГРАНАТ И ЕГО ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Фролов А.С.[1], Забелина Е.В.[1], Касимова В.М.[1], Козлова Н.С.[1] Бузанов О.А.[2]

[1]*Испытательная лаборатория «ИЛМЗ» НИТУ «МИСиС», Москва, Россия,*
artem160797@gmail.com, zabelina.ev@misis.ru, kasimova.vm@misis.ru, kozlova_nina@mail.ru
[2]*АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия*, buzanov@newpiezo.com

$Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$:Ce (GGAG:Ce) − сцинтилляционный кристалл, впервые был синтезирован в 2011 г. Сцинтилляторы применяются для преобразования энергии высокоэнергетических квантов и частиц в видимый свет. В настоящее время GGAG:Ce применяется в оборудовании систем досмотра и рассматривается для применений в ядерной медицине. С целью оптимизации и управления свойствами данного кристалла для конкретных применений необходимо установить природу его дефектной структуры. Дефекты в кристаллах существенно влияют на электрофизические свойства. К настоящему времени данных по исследованию электрофизических свойств GGAG:Ce в литературе не найдены. Гранаты сходного состава $Gd_3Ga_5O_{12}$ представляют собой высоомные материалы[1-3]. Измерение электрофизических свойств высокоомных материалов требует создания специальных установок, в силу того, что должны регистрироваться очень низкие токи до ~10^{-16} А и высокие сопротивления ~10^{16} Ом. Одной из существенных проблем является подбор материала токопроводящего покрытия для высокотемпературных испытаний, поскольку деградация токопроводящих покрытий может начинаться уже при комнатных температурах, а с повышением температуры эти процессы усиливаются.

Целью данной работы являлась разработка экспериментального комплекса для измерения температурных зависимостей электрофизических параметров высокоомных материалов, отработка методики измерений, измерения температурных зависимостей электрофизических параметров GGAG:Ce.

Разработана высокотемпературная установка для измерения электрофизических параметров высокоомных диэлектрических материалов до температур 1000 ºС. Отработана методика измерений. Проведена аналитическая работа по подбору материала токопроводящего покрытия. Получены первые результаты исследований электрофизических параметров кристаллов GGAG:Ce. Методами оптической микроскопии и спектрофотометрии исследовано состояние токопроводящих покрытий после температурных измерений.

Благодарности.
Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания (фундаментальные исследования, проект № 0718-2020-0031). Исследования проведены в МУИЛ Полупроводниковых материалов и диэлектриков «Монокристаллы и заготовки на их основе» (ИЛМЗ) НИТУ «МИСиС».

1. Donaghey L.F // J. Physics and Chemistry of Solids.– 1973.– LBL–2244, p. 1–23.
2. Krishan Lal e.a. //Proc. of Int. Symp. on Solid State Physics. – 1978. – 52A. – P. 433–439.
3. Hartmann E. // Phys.stat.sol. – 1984. – 86 – P. 401–404.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.232

PLASMON RESONANCE PHOTODETECTION IN A TWO-DIMENSIONAL ELECTRONIC SYSTEM IN THE CORBINO GEOMETRY

M.E. Khavronin, A.S. Petrov, D. A. Svintsov

Moscow Institute of Physical and Technology, Russia, 16021998meh@gmail.com

The problem of detecting terahertz radiation is attracting great interest. The low sensitivity of traditional optical devices in the terahertz range requires the creation of new ideas for detection that is effective in this range. Excitation of plasmons in radiation detectors provides a convenient tool for increasing absorption and therefore increasing sensitivity. The conceptual scheme of a THz detector with plasmon amplification based on a two-dimensional electron system (DES) was proposed by Dyakonov and Shur in [1] and implemented decades later using heterostructures based on GaAs [2] and graphene [3] and shows good theoretical and experimental sensitivity values of about 1 kV / W. However, in this scheme, an almost symmetric geometry is proposed, which does not allow edge effects to manifest themselves. We consider a transistor THz radiation detector in the Corbino geometry, when a DES is connected to extended cylindrical contacts of the source and drain, and the photo signal from the THz antenna is applied between the source and the gate. Within the framework of the local electrostatics model for a plasmon - resonant detector, we found the distribution in the channel of a linear response to an external field and a rectified signal between the contacts. In this model, two signal rectification mechanisms are obtained - hydrodynamic, due to the inertness of carriers, and diode, due to the simultaneous dependence of the local concentration and velocity of carriers on the incident signal. The obtained expressions show the presence of plasma resonance. It was shown that this signal actually increases with a decrease in the radius of the internal contact, and at low damping, the main contribution is made by hydrodynamic rectification, the dependence on the internal radius of which is $1/(r0 \ln(r0))^2$. The exact solution for electrical oscillations in the Corbino geometry is based on the expansion of the electric potential into the basis functions of the Laplace operator, which satisfy zero boundary conditions at the contacts; for it, there also remains a singularity of the field near the contact, leading to an increase in sensitivity [4]. We observe that the sensitivity of the detector in the Corbino geometry exceeds the sensitivity of the "rectangular" field-effect transistor of Dyakonov and Shur by more than an order of magnitude, especially in the vicinity of the lowest resonance (Fig. 1). Since the sensitivity of the originally proposed circuit has been measured in many studies and exceeds 1 kV / W, the estimate for the proposed configuration exceeding 10 kV / W looks realistic. The results of the work were published in PHYSICAL REVIEW APPLIED in the article Singularity-Enhanced Terahertz Detection in High-Mobility Field-Effect Transistors.

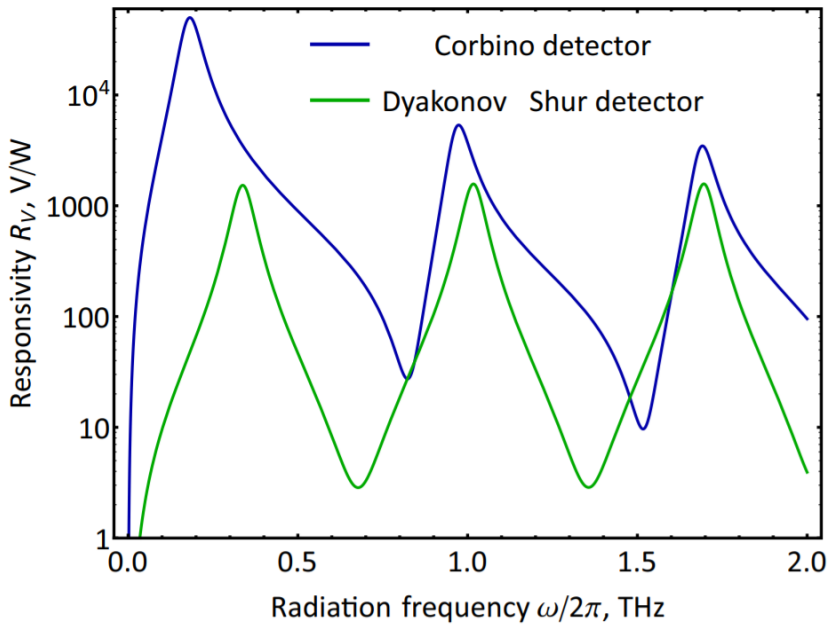


Fig.1Responsivities of Corbino (blue line) and "rectangular" (Dyakonov and Shur) (green line) detectors versus radiation frequency at $n_s = 10^{12}$ cm^2, d = 50 nm, ε = 12.9, τ_p = 2.3 ps, $r_0 = 0.03\ R_0$, antenna resistance Z_a = 100 Ohm. Source-drain separations in Corbino and "rectangular" devices are equal and taken to be L = R_0 = 1 mum

[1] M. Dyakonov and M. Shur, IEEE Transactions on Electron Devices 43, 380 (1996)
[2] V. Giliberti, A. Di Gaspare, et al Phys. Rev. B 91, 165313 (2015).
[3] D. A. Bandurin, D. Svintsov, et al., Nature Communications 9, 5392 (2018)
[4] M. Khavronin, A. Petrov, A.E. Kazantsev, et al Phys. Rev. Applied 13, 064072 (2020)

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.233

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТОЯНИЯ ГЕТЕРОСИСТЕМЫ Ge_xSi_{1-x}/Si(001) С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ Ge В ПЛЕНКЕ

[1*]Хохлова Т.Н., [2]Пчеляков О.П., [2]Дерябин А.С., [2]Колесников А.В.

[1]Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева, г. Красноярск, Россия
[2]Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СОРАН, г. Новосибирск, Россия, *tanya.xo.xo03@gmail.ru*

Основой современной микро-, опто- и наноэлектроники является кремниевая технология. В настоящее время реализация данной технологии для получения полупроводниковых приборов на основе качественных гетероструктур GeSi/Si является одной из самых перспективных и востребованных на рынке современных технологий.
В данной работе представлены исследования гетероэпитаксиальных слоев твердого раствора (ТР) Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с различным содержанием Ge в зависимости от несоответствия параметров решетки гетеросистемы (ГС). С помощью метода низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и применением низкотемпературного буферного слоя кремния (LT-Si) были получены ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с различной долей *x*.
В результате изучения рельефа поверхности ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) был сделан ряд предположений о зарождении и распространение пронизывающих дислокаций (ПД) в пленке. Следует вывод о том, что основным источником дислокаций несоответствия (ДН) становятся точечные дефекты. Это осуществляется в присутствии поля напряжений растущего псевдоморфного слоя ТР, что способствует упорядочению первичной сетки ДН и, в конечном счете, приводит к снижению плотности ПД. Данная работа подтверждает, что при осуществлении пластической релаксации напряженной пленки ГС Ge_xSi_{1-x}/Si(001) возникают зарождения ДН, относящиеся к внутренним дислокациям. Такие ДН связаны, в основном, с загрязнениями подложки Si[1,2].
Следует вывод, что наблюдаемый рельеф поверхности является следствием действия фундаментальных механизмов, к которым относится упругая релаксация напряжения, возникшая за счет появления шероховатостей на поверхности напряженной пленки. Так же к фундаментальным механизмам относится образование ступеней из-за пересечения поверхности ПД в процессе пластической релаксации напряженной ГС. Это подтверждает тот факт, что при росте и релаксации гетероэпитаксиальных слоев Ge_xSi_{1-x}/Si(001) с x~(0,2-0,3) основной вклад в зарождение ДН вносит поверхность растущего слоя [2]. Полученные результаты соответствуют предположениям о том, что именно возникновение наблюдаемого рельефа на поверхности пленки является причиной появления концентраторов напряжений, которые являются источниками ДН. Тем самым ограничивается рост пленок GeSi, релаксирующих с приемлемой плотностью ПД, где величина доли Ge не превышает 0,3 [1,2].

1. Блоховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Гутаковский А.К., Ревенко М.А., Соколов Л.В. // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40. – № 3.
2. Блоховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Гутаковский А.К., Пчеляков О.П., Соколов Л.В.. // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – №. 1.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.234

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ НА МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПОРИСТОМ СПЛАВЕ TiNi, ПОЛУЧЕННОМ МЕТОДОМ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

[1]Чепела Д.В., [1]Реснина Н.Н., [2]Рубаник В.В. мл., [1]Беляев С.П., [2]Рубаник В.В., [2]Кулак М.М., [1]Калганов В.Д.

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия,
[2]Институт технической акустики Национальной академии наук Беларуси, Витебск, Белоруссия
daniil.chepela@yandex.ru

Одним из основных способов получения пористого сплава TiNi с памятью формы является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС). Вместе с тем, структура полученного пористого сплава является неоднородной, что влияет на мартенситные превращения в этом материале. В настоящей работе впервые предложено синтезировать пористый сплав TiNi методом СВС с одновременным наложением ультразвуковых колебаний и изучить влияние параметров ультразвуковых колебаний (материала и формы волновода, амплитуды колебаний и времени их приложения) на мартенситные переходы.
Смесь порошков титана и никеля в соотношении 50 на 50 ат. % засыпали в кварцевую трубку диаметром 30 мм, которую устанавливали на ультразвуковом волноводе в камере СВС. В камеру нагнетали аргон с избыточным давлением 1 атм, и нагревали до температуры 350 ºС. После этого смесь поджигали раскаленной вольфрамовой спиралью. Ультразвуковые колебания подавали по двум режимам: в первом режиме ультразвуковые колебаний прикладывали сразу после того, как волна горения проходила через смесь порошков. Во втором режиме ультразвуковые колебания подавали одновременно с инициированием реакции синтеза. Во всех случаях после прохождения волны горения ультразвуковое воздействие на образец продолжалось ещё в течение 20 секунд. Амплитуду ультразвуковых колебаний варьировали от 10 до 35 мкм. Волновод был выполнен из стали или титана и имел форму либо сплошного цилиндра, либо форму гриба. После синтеза образцы разрезали методом электроэрозионной резки и исследовали мартенситные переходы с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии.
Полученные результаты показали, что действие ультразвука приводит к существенному увеличению доли сплава, испытывающей мартенситные переходы при высоких температурах. Различия в результатах, полученных при использовании разных режимов озвучивания, не обнаружено. Это объясняется тем, что ультразвуковые волны сильно затухают при распространении в порошковой смеси и основное влияние колебания оказывают на уже скомпактированную заготовку.

Работа выполнена в рамках совместного проекта РФФИ-БФФИ (РФФИ № #20-58-00025, БФФИ # Т20Р-377*)*

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.235

ОПТИМАЛЬНАЯ АСИММЕТРИЯ ДЕТЕКТОРОВ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТРАНЗИСТОРОВ С ДВУМЕРНЫМ КАНАЛОМ

Шабанов А. В.

Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия,
Shabanov.av@phystech.edu

В последнее время полевые транзисторы нашли новое применение в качестве выпрямителей терагерцового излучения с высокой скоростью детектирования и низким уровнем шумов. Одним из подходов в детектировании является использование транзисторов с антенной, подключенной между истоком и затвором, что было рассмотрено в статье Дьяконова и Шура [1]. В то же время известно, что для возникновения фотоотклика в системах без напряжения смещения необходимо существование асимметрии детектора. При этом геометрически рассматриваемый Шуром транзистор симметричен. Мы задаемся вопросом о возможности увеличения фотоотклика с помощью введения новой асимметрии в схему.

Мы рассматриваем транзисторный детектор с двумерным каналом и затвором, частично покрывающем канал, и ищем оптимальное положение затвора при различных характеристиках детектора для максимизации выпрямленного напряжения между истоком и стоком при подаче между истоком и затвором терагерцового излучения. В рамках уравнения Эйлера с граничными условиями Дьяконова-Шура рассмотрены три вклада в выпрямленное напряжение: гидродинамический, резистивный и термоэлектрический. Гидродинамический возникает вследствие закона сохранения энергии из которого, при уменьшении скорости носителей повышается их потенциальная энергия. Резистивное смешивание возникает вследствие того, что изменение потенциала в канале влияет одновременно и на концентрацию носителей и на их скорость. Термоэлектрический вклад в выпрямленное напряжение возникает вследствие дрейфа носителей из более нагретой области вблизи истока в холодную окрестность стока. Рассматривалось поведение системы вдали от плазмонного резонанса. Из полученных выражений видно, что оптимальное положение затвора зависит от соотношения длины канала и длины затухания плазмона. При малой длине канала наблюдается квадратичный зависимость величины резистивного отклика от расстояния между истоком и затвором при почти постоянном гидродинамическом. В то же время при больших длинах канала по отношению к длине затухания плазмона величина гидродинамического вклада растет при приближении затвора к истоку обратно пропорционально квадрату расстояния между затвором и истоком. Термоэлектрический вклад проявляет зависимости от расстояния между истоком и затвором подобные таковым у гидродинамического. По дальнейшим экспериментам с транзисторами с разной длиной канала можно будет установить какой из эффектов вносит наиболее весомый вклад.

Согласно результатам предварительных экспериментов, проведенных Георгием Федоровым, Максимом Маскотиным, Всеволодом Белосевичем и Яковом Матюшкиным при частоте излучения 129 ГГц и длине канала порядка 10 мкм величина выпрямленного напряжения растет при сдвиге затвора к истоку.

Благодарности.

3. Дьяконов М. И., Шур М. С. // IEEE Transactions on Electron Devices 43, 3, Mar 1996

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.236

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРИСТОГО УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА ИЗ ОТХОДОВ ТЕКСТИЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА ДЛЯ ЭЛЕКТРОДОВ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Шибенков А. В., Лепкова Т. Л., Кречетов И. С., Астахов М. В.
Национальный исследовательский технологический университет МИСиС
г. Москва, Россия, futurabox@gmail.com

Целью работы являлось получение и изучение свойств углеродных материалов (УМ) с развитой пористой поверхностью для электродов суперконденсаторов (СК).

Разработка высокоэффективных и стабильных накопителей энергии необходима для дальнейшего развития и продвижения возобновляемых источников питания.

В качестве материала для работы был использован хлопковый пух.

Исходные образцы пуха, предварительно пропитанные водными растворами ортофосфорной кислоты различной концентрации (1 %, 5 %, 10 %, 15 %), карбонизировали в кварцевом реакторе горизонтальной муфельной печи при температуре 900 °С в инертной атмосфере аргона с последующей активацией углекислым газом в течение 40 минут. Методом прокатки на основе полученных УМ были созданы электроды, собраны лабораторные ячейки СК с органическим электролитом 1 моль/л 1,1–диметилпирролидонтетрафторборат в ацетонитриле. Исследование было проведено с помощью метода гальваностатического заряда-разряда (ГЗР) и метода циклической вольтамперометрии (ЦВА). В результате расчетов было показано, что образцы, предварительно пропитанные 5 % раствором фосфорной кислоты, обладают наибольшими значениями удельной электроемкости по сравнению с остальными.

Для равномерности процесса активации по всему объему УМ был применен метод механического перемешивания в вертикальной печи. Исследования методом БЭТ показали увеличение удельной поверхности УМ с 1692 $м^2/г$ до 3520 $м^2/г$. Удельная электроемкость углеродного материала, полученного данным методом, выросла до 118 Ф/г по сравнению с аналогичной величиной 104 Ф/г без использования механического перемешивания.

Таким образом, активация УМ в вертикальной печи с использованием механического перемешивания привела к увеличению удельной электроемкости электродного материала на 13 %.

Предложенный метод активации УМ может быть использован в дальнейшем для создания электродного материала полноразмерных ячеек СК.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.237

ФОНОННАЯ ДИНАМИКА В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ КИТАЕВА

Ширалиева А.Ш., Прокошин А.В., Перкинс Н.Б.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, Россия, ayselshiralieva@gmail.com

Предпосылки. Исследование модели Китаева на решетке гиперсот является динамически развивающейся областью современной физики, поскольку модель точно решаема и имеет нетривиальные свойства квантовой спиновой жидкости (например, отсутствие магнитного порядка при низких температурах).
Кроме того, модель имеет дробные возбуждения, характеризуемые майорановскими фермионами. Материалы с такой решеткой, в которых китаевское взаимодействие вносит лидирующий вклад в гамильтониан, воплощены в реальных веществах, например, в оксидах 5d переходных металлов.
Постановка задачи. В данной работе мы исследовали дробные возбуждения китаевских материалов, а также их связь с колебаниями решетки. Мы вычисляем коэффициент затухания звука, обусловленный распадом фонона при рассеянии на паре майорановских фермионов.
Профессиональное значение. Как известно, затухание звука за счет фермион-фононного взаимодействия широко используется для изучения фундаментальных свойств коррелированных материалов и фазовых переходов.
Этапы исследования. Наше исследование состоит из четырех этапов. На первом этапе находим майорановский фермионный спектр и выводим соответствующее выражение для линии нулевых энергий. На втором этапе мы численно рассчитываем продольные и поперечные моды для фононов. Затем мы исследуем симметрийные вклады в фермион-фононном члене гамильтониана. Далее мы считаем мнимую часть поляризационного пузыря, чтобы найти коэффициент затухания звука.
Полученные результаты. Если рассматривать результаты поэтапно, то был получен спектр майорановских фермионов и найдено аналитическое выражение для линии нулевых энергий. Далее мы численно рассчитали фононные моды, скорости и векторы поляризации. Кроме того, при анализе спинфононного взаимодействия были найдены симметрийные вклады в гамильтониан и вычислены вершины. Результаты были разложены вблизи линии нулевых энергий, поскольку нас интересуют низкоэнергетические возбуждения, и мы рассматриваем акустические фононы (т.е. фононы с низкой энергией).
Ожидаемые результаты. Наша основная цель - рассчитать коэффициент звукопоглощения и изучить его свойства. Есть два типа процессов, которые вносят вклад. Частично-дырочный процесс происходит только при конечных температурах, когда майорановский фермион уже возбужден, а фонон дает ему дополнительную энергию, процесс частица-частица, кроме того, происходит при нулевых температурах, потому что фонон создает два майорановских фермиона из вакуума. Все эти процессы с учетом законов сохранения необходимо исследовать.

Благодарности.

Kitaev, A. // Annals of Physics – 2006. – 321 № 1. С. – 1-111.
Ye, M., Fernandes, R., Perkins, N. // Phys. Rev. Research– 2020. – 2, 033180– Т. 02. – № 3.

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.238

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ $Mo_4Ga_{20}Sb$ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО КВАДРУПОЛЬНОГО РЕЗОНАНСА

Ярыгина Д.А.[1], Журенко С.В.[2], Ткачев А.В.[3], Гунбин А.В.[2], Мазитова Д.И.[4], Верченко В.Ю.[5], Гиппиус А.А.[6]

Студент, МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, iarygina.da17@physics.msu.ru

Аспирант, ФИАН им. П.Н. Лебедева, Москва

С. н с., к.ф.-м.н., ФИАН им. П.Н. Лебедева, Москва

Аспирант, Сколковский институт науки и технологий, Москва

С. н. с., к.х.н., МГУ им. М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва

Профессор, д.ф.-м.н, МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва,

Данная работа посвящена исследованию поликристаллического образца интерметаллического сверхпроводника $Mo_4Ga_{20}Sb$. Это соединение представляет интерес, так как свойства его сверхпроводящего состояния отклоняются от предсказаний теории БКШ ($2\Delta(0)/(k_BT_c) = 3.65$ вместо 3.52). Также для $Mo_4Ga_{20}Sb$ характерны сильная электрон-фононная связь и, по некоторым данным, многощелевая сверхпроводимость [1, 3]. Соединение $Mo_4Ga_{20}Sb$ удобно для исследования, так как из всего семейства галлидов молибдена у него наблюдается наибольшая критическая температура $T_c = 6.6$ К. [2]

В качестве основной методики использовалась спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). Для соединения $Mo_4Ga_{20}Sb$ метод ЯКР является оптимальным для исследования сверхпроводящего состояния, так как второе критическое поле для этого соединения мало ($H_{C2} = 0.7$ Тл [2]).

Были проведены измерения спектров ЯКР ^{69}Ga и ^{71}Ga в $Mo_4Ga_{20}Sb$ при T = 4.2 К и измерения скорости спин-решеточной релаксации в диапазоне температур 1.9-300 К. Спектр ЯКР $^{69,71}Ga$ $Mo_4Ga_{20}Sb$ содержит 4 пары линий, соответствующих 4 неэквивалентным позициям изотопов Ga. Отношения частот в каждой паре соответствует отношению квадрупольных моментов $Q_{69Ga}/Q_{71Ga} = 1.6$. Выше T_c скорость релаксации прямо пропорциональна температуре, величина $1/T_1T = 2.63\ (c\cdot K)^{-1}$. Отношение Корринги $S = 2.9\cdot10^{-4} << 1$, что соответствует антиферромагнитным корреляциям в системе. Ниже T_c наблюдается четко выраженный интенсивный Гебель-Сликтеровский пик. Экспериментальное наблюдение этого пика свидетельствует о том, что для данного соединения характерна сверхпроводимость s-типа без точек или линий зануления в k-пространстве (full gap s-type). Аппроксимация по теории БКШ дает значение щели $\Delta = 12.7 \pm 1.4$ К. Эта оценка хорошо согласуется с оценкой 12.045 К [2], полученной из скачка теплоемкости.

Следует отметить, что поведение спин-решеточной релаксации несколько сложнее, чем дает однощелевая модель БКШ, что, возможно, указывает на существование второй щели.

Список литературы:

1. V.Y. Verchenko et al., Strong electron-phonon coupling in the intermetallic superconductor Mo_8Ga_{41}, Phys. Rev. B 93, 064501 (2016).
2. V.Y. Verchenko et al., Family of Mo_4Ga_{21}-based superconductors, Chemistry of Materials, 32, 6730−6735 (2020).
3. M. Marcin et al., One or two gaps in Mo_8Ga_{41} superconductor? local hall-probe magnetometry study, Superconductor Science and Technology, 34, 035017 (2021).

DOI 10.26201/ISSP.2020/FKS-2.239

Объемный эффект кристаллизации $Co_3Sn_2S_2$

Кузнецов Г.В., Тимонина А.В., Шахлевич О.Ф., Колесников Н.Н.
Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, avtim@issp.ac.ru

$Co_3Sn_2S_2$ — материал с топологически защищёнными свойствами, электрические характеристики которого активно изучаются [1-2]. Кристаллы $Co_3Sn_2S_2$ получают преимущественно из расплава [1-2], поэтому для разработки и оптимизации процессов роста необходимы данные о свойствах этого вещества в жидком агрегатном состоянии.

Объемный эффект кристаллизации ΔV определяли методом закалки столба расплава. Загрузку $Co_3Sn_2S_2$, предварительно синтезированного из элементов, расплавляли в цилиндрическом графитовом тигле с внутренним диаметром 10 мм, помещенном в газовый автоклав. Расплав выдерживали при температуре 1263 К под давлением аргона 0,9 МПа, а затем закристаллизовывали путем отключения нагрева. Вследствие интенсивного теплоотвода кристаллизация начиналась по всей поверхности столба расплава, что сохраняло его габариты. Необходимую для расчета ΔV плотность кристаллического $Co_3Sn_2S_2$, равную 7,244 г/см^3, определили из данных рентгеноструктурного анализа.

Полученное значение объёмного эффекта кристаллизации

$$-\Delta V = (0.527 \pm 0.065)\ \text{см}^3$$

соответствует плотности расплава 6.369±0.565 г/см^3. В дальнейшем планируется экспериментальное определение вязкости и поверхностного натяжения расплава $Co_3Sn_2S_2$.

1. V.D. Esin, A.V. Timonina, N.N. Kolesnikov, E.V. Deviatov. Second-harmonic voltage response for the magnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$. JETP Letters 111 (2020), 685–689.
2. O. O. Shvetsov, Yu. S. Barash, S. V. Egorov, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, E. V. Deviatov. Magnetically stable zero-bias anomaly in Andreev contact to the magnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$. EPL, 132 (2020) 67002.

Научное издание

Физика конденсированных состояний

Сборник Тезисов II Международной конференции
(31 мая – 4 июня 2021 года, Черноголовка)

Публикуется в авторской редакции

Техническое редактирование
и компьютерная верстка
А.Б. Страумала.

ISBN 978-5-6045956-0-2