АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Международная научная конференция

ACTUAL PROBLEMS OF SOLID STATE PHYSICS

International Scientific Conference

СБОРНИК ТЕЗИСОВ
BOOK OF ABSTRACTS

APSSP XI 2025

ГО «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»

Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus

Минск, Беларусь 2025

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ

ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНО-ПРОИЗВОДСТВЕННОЕ ОБЪЕДИНЕНИЕ
«НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЦЕНТР НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ
НАУК БЕЛАРУСИ ПО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЮ»
(Институт Физики Твердого Тела и Полупроводников)

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

СБОРНИК ТЕЗИСОВ
XI Международной научной
конференции

19 – 23 мая 2025 г.

ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»
Минск • 2025

THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

STATE SCIENTIFIC AND PRODUCTION ASSOCIATION
«SCIENTIFIC-PRACTICAL MATERIALS RESEARCH CENTRE OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS»
(Institute of Solid State and Semiconductor Physics)

ACTUAL PROBLEMS of SOLID STATE PHYSICS

BOOK OF ABSTRACTS
of the XI International Scientific Conference

19 – 23 May 2025

«Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus»
Minsk • 2025

УДК 538.9
ББК 22.37я43

Актуальный проблемы физики твердого тела [Электронный ресурс]: сб. тезисов. XI Междунар. науч. конф., Минск, 19–23 мая 2025 г. / ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»; редкол.: В. М. Федосюк (пред.) [и др.]. – Минск : ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», 2025. – 287 с.

В сборнике опубликованы доклады, представленные на Международной научной конференции по актуальным проблемам физики твердого тела. В нем изложены результаты новейших исследований по проблемам физико-химических технологий, функциональных материалов, наноматериалов и нанотехнологии, теории и моделирования в материаловедении. Значительное количество докладов посвящено вопросам практического применения разработанных материалов, технологий и устройств.

Материалы докладов одобрены и рекомендованы к опубликованию организационным комитетом конференции.

Редакционная коллегия:

член-корр., д.ф.-м.н. В.М. Федосюк (пред.);
к.ф.-м.н. А.В. Петров; д.ф.-м.н. В.Ф. Гременок; д.ф.-м.н. Н.А. Каланда;
д.ф.-м.н. Д.В. Карпинский; к.ф.-м.н. А.Л. Желудкевич; к.ф.-м.н. В.Д. Живулько;
к.ф.-м.н. О.В. Игнатенко; к.ф.-м.н. С.Б. Ластовский; к.ф.-м.н. О.Ф. Минчукова;
к.ф.-м.н. С.А. Шарко; И.В. Рязанов; Л.А. Близнюк; Г.А. Русецкий; Е.А. Артюх

Спонсоры:

© ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», 2025

Actual Problems of Solid State Physics [Electronic resource]: book of abstract XI Intern. Scient. Conf., Minsk, 19–23 May 2025 / «Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus»; ed.: V. M. Fedosyuk (chairman) [et al.]. – Minsk : «Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», 2025. – 287 p.

The proceedings book contains articles presented at the International Scientific Conference on actual problems of solid-state physics. It presents the current research results on the problems of physical and chemical technologies, functional materials, nanomaterials and nanotechnology, theory and modeling in materials science. A significant number of articles are devoted to the practical applications of the developed materials, technologies, and devices.

Articles were approved and recommended for publication by the Conference organizing committee.

Editorial board:

corr. member, D.Sc. V.M. Fedosyuk (Chairman);
Ph.D. A.V. Petrov; D.Sc. V.F. Gremenok; D.Sc. N.A. Kalanda;
D.Sc. D.V. Karpinsky; Ph.D. A.L. Zhaludkevich; Ph.D. V.D. Zhivulko;
Ph.D. O.V. Ignatenko; Ph.D. S.B. Lastovskii; Ph.D. O.F. Minchukova;
Ph.D. S.A.Sharko; I.V. Razanau; L.A. Bliznyuk; G.A. Rusetsky; E.A. Artiukh

Sponsors:











© «Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», 2025

CMS8400 Neo



ЭПР СПЕКТРОМЕТР

настольный

ПРИБОР ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПАРАМАГНИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ИОНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, И ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СВОБОДНЫХ РАДИКАЛОВ В ЖИДКОСТЯХ И ТВЁРДЫХ ОБРАЗЦАХ

www.advin.ru
rus-info@advin.ru

- Компактный дизайн электромагнита и СВЧ тракта
- Высокая чувствительность и разрешающая способность
- Автоматический расчет g-фактора
- Оптимизированные параметры магнитного поля: высокая точность задания поля, стабильность
- Автоматическая настройка при смене образца
- Встроенный частотомер, датчики магнитного поля и температуры

АДВИН

ООО «АДАНИ РУС»
190005, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург,
Набережная Обводного канала 118А, литер Х, помещение 7-Н, офис 7
+7 (812) 389-23-88

POWDIX 600



РЕНТГЕНОВСКИЙ ДИФРАКТОМЕТР

настольный

КАЧЕСТВЕННЫЙ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ

www.advin.ru
rus-info@advin.ru

- Компактный дизайн
- Тета/Тета геометрия
- Быстродействующий линейный детектор
- Высокое отношение сигнал/шум
- Продолжительные сроки эксплуатации рентгеновской трубки и детектора
- Не требуется внешнее водяное охлаждение
- Гарантированная безопасность
- Аналитическое ПО с интегрированной базой данных
- Лучшее соотношение цена/качество

АДВИН

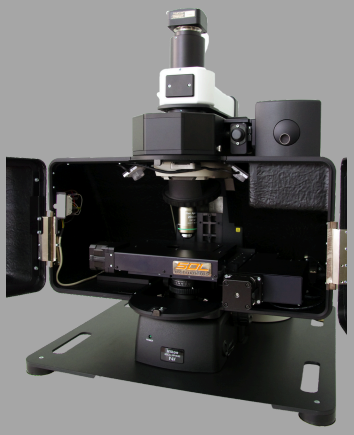
ООО «АДАНИ РУС»
190005, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург,
Набережная Обводного канала 118А, литер Х, помещение 7-Н, офис 7
+7 (812) 389-23-88

SOL instruments



ANALYTICAL SPECTROSCOPY FOR SCIENCE AND INDUSTRY

- 30 years on the market
- Our own production
- Wide range of equipment



website

+375 (17) 390-93-50
solinstruments.by

RAMAN MICROSCOPY

Confotec® 3D scanning laser Raman microscopes offer high sensitivity, fast data processing and ease of use.



- Non-destructive method of analysis of physical and chemical properties of nanostructures.
- High sensitivity, high spatial and spectral resolution.
- Compatibility with other analytical methods: AFM and SEM



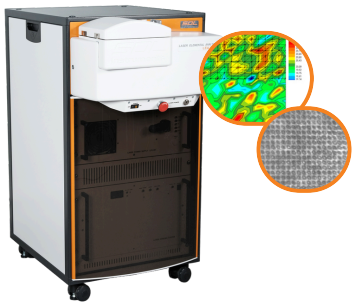
SPECTROSCOPY

- Wide range of spectral instruments for scientific and applied research.
- High spectral and spatial resolution.
- Minimal stray light for precise measurements.
- Compatible with different types of detectors and optical systems.



ELEMENTAL ANALYSIS

- Fast multi-element chemical analysis from hydrogen (H) to uranium (U).
- No change in the aggregate state of the sample.
- Control of material homogeneity and elemental distribution over the area.
- High sensitivity: measuring range from 0.01 ppm to 100%.



Рентгеноструктурный анализ
Универсальный дифрактометр

Идеально сочетает в себе рутинный анализ и специальные исследования. Может анализировать образцы различной природы (металлы, композиты, неорганические и органические материалы, наноматериалы, сверхпроводники) и в различном состоянии (порошки, массивные образцы, тонкие пленки, микрообразцы). Прибор широко используется при анализе глинистых минералов, цементных строительных материалах, объектов окружающей среды, пыли, продуктов химических производств, фармацевтических препаратов, асбеста, руд и горных пород, полимеров и др.



DH88-pro

Ключевые особенности

- Высокочастотный высоковольтный рентгеновский генератор не только улучшает стабильность прибора, но и обеспечивает повторяемость измеренных данных.
- Передовая металлокерамическая рентгеновская трубка собственного производства, обеспечивает длительный срок службы.
- Плечи гониометра приводятся в действие серводвигателем с фотоэлектрическим энкодером. Погрешность измерения угла во всём диапазоне значений менее 0,02°.
- Дополнительные приспособления расширяют область применения: высокотемпературная и низкотемпературная камеры, держатель для анализа текстур подключаются по принципу «plug and play», что обеспечивают автоматическую идентификацию устройств и последующее управление ими программой дифрактометра.
- Безусловная защита от рентгеновского излучения, включающая автоматическую блокировку дверцы дифрактометра при проведении измерений.
- Универсальное программное обеспечение для обработки данных позволяет обрабатывать результаты съёмки, полученные на дифрактометрах различных производителей.
- Полнота результатов: определение фазового состава, оценка размера зерна, степени кристалличности, содержания аустенита, определение параметров элементарной ячейки, расчет остаточных напряжений, индексация дифракционных линий, исследования в скользящем пучке (определение структуры тонкопленочных материалов, анализ размера частиц).

ООО «ТЕСКАН» - эксклюзивный торгово-технический представитель бренда AINUO в России и СНГ

Демонстрационно-методические центры:
Санкт-Петербург, 2-й Муринский пр., д. 36; +7 (812) 322-58-99
Москва, ул. Ленинская Слобода, д. 23; +7 (495) 445-55-45
info@tescan.ru

tescan.ru

Сканирующая электронная микроскопия

СЭМ сверхвысокого разрешения

ИНСКАН



IQSCAN F50

Ключевые особенности

- Сверхвысокое разрешение: 0,6 нм при 15 кВ и 1 нм при 1 кВ. Высокое качество изображения при низких ускоряющих напряжениях
- Технология SuperTunnel™: обеспечивает низкие аберрации и высокую стабильность пучка, улучшая качество изображений
- Электронно-оптический путь без кроссовера: снижает аберрации и повышает разрешение, особенно при низких напряжениях
- Объектив с водяным охлаждением: поддерживает постоянную температуру, обеспечивая стабильность работы
- Широкий диапазон доступных энергий электронов: от 20 эВ до 30 кэВ, позволяет исследовать различные типы образцов без дополнительной пробоподготовки
- Богатые возможности расширения функционала с помощью установки дополнительных опций и детекторов, таких как STEM, EDS, EBSD и др.
- Удобство работы: интуитивно понятный интерфейс и оптическая навигация по образцу упрощают процесс исследования

ООО «ИНСКАН»
194021, г. Санкт-Петербург, 2-й Муринский пр., д. 36
Демонстрационные лаборатории в Москве и Санкт-Петербурге
+7 812 220 20 80, info@inscan.ru

inscan.ru

Компания **ООО «Глобалтест»** является ведущим поставщиком высокотехнологичного испытательного оборудования на территории Республики Беларусь. Основные направления нашей деятельности – это внедрение передовых разработок и поставки оборудования для механических испытаний, неразрушающего контроля, технической диагностики состояния объектов, химического анализа металлов и сплавов, микроскопического оборудования, а также расходных материалов и принадлежностей.

Отличительной особенностью нашей компании является то, что мы не ограничиваемся исключительно поставками. Мы осуществляем полное техническое сопровождение в течение всего срока эксплуатации оборудования, обучаем персонал, проводим пусконаладочные работы, шеф-монтаж и предоставляем возможность консультации от высококвалифицированных инженеров при возникновении любых вопросов в ходе испытаний. Наши услуги сделают испытательный процесс наиболее простым, облегчат вашу работу и увеличат производительность.

Вся наша продукция подробно и содержательно представлена на нашем сайте, включая детальные описания, технические характеристики и видео обзоры. При возникновении вопросов, касательно выбора того или иного прибора, мы предоставим вам консультацию и поможем подобрать именно тот прибор, который будет решать все ваши задачи без исключения.

Перечень оборудования, которое поставляет компания Глобалтест:

1. Анализаторы химического состава
2. Универсальные испытательные машины
3. Твердомеры
4. Оптические измерительные приборы
5. Оборудование для контроля оптических изделий
6. Оборудование для исследования материалов и их покрытий
7. Металлография и Пробоподготовка
8. Испытательное оборудование строительной отрасли
9. Оборудование Faithful
10. Учебные комплексы
11. Оборудование Labthink
12. Оборудование Mettler Toledo
13. Дифрактометры
14. Оборудование для испытаний на вибрацию и удары
15. Климатические камеры
16. Государственные стандартные образцы (ГСО)
17. Меры твердости
18. Оборудование для горнодобывающей промышленности
19. Ультразвуковой контроль
20. Промышленная рентгеновская пленка
21. Термобумага для регистрирующих приборов
22. Система обнаружения подземных объектов
23. Промышленно-измерительное оборудование

GNR ML150 (S1 MINILAB 150)



Новая модель спектрометра производства GNR, которая уже неоднократно удовлетворяла пользователей превосходной производительностью и конкурентоспособной ценой.

GNR ML150 является спектрометром с мульти матрицей для анализа сплавов на Железной, Алюминиевой, Никелевой, Магниевой, Титановой, Оловянной, Кобальтовой, Цинковой, Свинцовой и Медной основах.

Благодаря инновационной конфигурации оптической камеры с фокальным расстоянием в 150 мм, GNR ML150 является единственным спектрометром своего класса, имеющим 4 CMOS матрицы с высоким разрешением, матрица с 3648 элементами для обеспечения наилучшего спектрального разрешения, менее 15 пм.

Контакты:

ООО «Глобалтест»
Адрес: 220113, г. Минск, ул. Мележа 1а, оф. 108
Телефон: +375 (17) 388-07-05, +375 (29) 699 60 34
E-mail: office@globaltest.by
www.globaltest.by

СОДЕРЖАНИЕ
CONTENT

Physical and Chemical Technologies
Физические и Химические Технологии……30

The influence of complexing additives on the composition of NiFeCu alloy films deposited from a combined electrolyte
A. Kotelnikova, V. Fedkin, O. Kanafyev, A. Bondaruk, A. Rotkovich, D. Tishkevich, T. Zubar, and A. Trukhanov…… ….31
The determination of the band gap in Cu-intercalated GaSe monocrystal
L. E. Sadigli……..32
Electron structure lithiumlic hypothetical structure.
E. B. Duginova……33
NV-NV ensemble interaction in diamond
A. Chernyavskiy, V. V. Soshenko, S. V. Bolshedvorskii and A. V. Akimov……..34
Структурные и оптические свойства кремния, легированного иттербием
Х.С. Далиев, Ш.Б. Утамурадова, Ж.Ж. Хамдамов, М.Б. Бекмуратов……..35
Механизм формирования зерен керамики $BaFe_{12-x}Mn_xO_{19}$
С.А. Гудкова, Г.М. Зирник, Д.Е. Живулин, Д.А.Учаев, Е.А. Шрамков, Д.А. Винник….36
Влияние примеси стронция на диэлектрическую релаксацию керамики титаната бария
В. В. Иванов, О.В. Малышкина, И.Л. Кислова……..37
Актуальные физические проблемы процесса механо-химического полирования пластин SiC
С.В. Корякин, Е.В. Михалёнок, М.И. Гайко……...38
Металлооксидные пленки оксида олова, изготовленные жидкостным методом
Н.Н. Кошелева, Т.В. Свистова, Е.С. Рембеза, Д.С. Пермяков, и М.А. Белых……39
Использование мезопористых молекулярных сит в качестве твердотельной матрицы в синтезе новых мезопористых материалов
Т. Ф. Кузнецова, А.И. Иванец, Е.А. Копыш, А.Б. Абдикамалова, и И. Д. Эшметов……..40
Молекулярно-пучковая эпитаксия III-нитридов для силовой, СВЧ и оптоэлектроники
Е. В. Луценко……41
Исследование химических преобразований на поверхности монокристаллических пластин InSb, индуцированных химико-механической полировкой и пассивацией
Е. А. Скрылева, Б. Р. Сенатулин, У. М. Матвеенко, Е. Н. Абрамова, Р. Ю. Козлов……42
Тепловое расширение $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при переходе в сверхпроводящее состояние
А. Э. Рабаданова, Д. К. Палчаев, С. Х. Гаджимагомедов, Ж. Х. Мурлиева, Ш. П. Фараджев, и Р. М. Эмиров……43
Расчет областей образования твердых растворов La_2S_3 - PbS методом ионообменной трансформации
П. Л. Саидова, А. В. Поздин, и Л. Н. Маскаева……44
Кристаллическая структура одно- и двухфазных пленок в системе PbS-CdS, полученных химическим осаждением из этилендиамин-цитратной системы
А. Д. Селянина, Д. А. Дёмина, и В. И. Воронин……45

Functional Materials and Applications

Функциональные Материалы и Области их Применения……..46

Enhanced thermoelectric properties in oxide ceramics by doping and compositing
A. M Ashok, Althaf R, N. Davis, N. John, I. Razanau, U. Novikau……...47
Structure and properties of kπ-skyrmions in ferromagnetic films with spatially modulated parameters
R.M. Vakhitov, G.F. Ilyasova……48
High-porosity carbon from biomass: An efficient sorbent for hydrogen storage
Baglan Bakbolat, Fail Sultanov, Almagul Mentbayeva, Akmaral Karamergenova……49
$TbCrO_3$ and $YCrO_3$ single crystals growth from optimized fluoride–lead oxide melt
S. Barilo, R. Lanovsky, A. Shestak, M. Bushinsky, O. Mantytskaya, and N. Tereshko…….50
Electrochemical sensing of lipoic acid at Prussian-blue based modified electrode
M. Marin and C. Lete……51
Dielectric spectroscopy of $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ (x = 0 – 1.0) solid solutions
S.N.Mustafaeva , S.M.Asadov, K.M.Guseinova , S.S.Abdinbekov……..52
Microstructural characterization of ZnNiP duplex coatings for anticorrosive protection of carbon steel
A.M.Popescu, M.Burada, M.Anastasescu,O.Minchukova, V.Constantin……53
Ceramic magnetic materials with a whitlockite structure synthesized in a solar furnace
J.Z. Shermatov, M.S. Paizullakhanov, O.T. Rajamatov,M.H. Aripova, A.M. Zhivul'ko……..54
Properties of ferrite ceramic materials synthesized in a solar furnace
J.Z. Shermatov, M.S. Paizullakhanov, O.T. Rajamatov, M.H. Aripova, A.M. Zhivul'ko…….55
Efficiency of $CoFe_2O_4$ catalyst at repeated use
J.Z. Shermatov, M.S. Paizullakhanov, O.T. Rajamatov, M.A.Karimov, V.G. Minkina, A.M. Zhivul'ko……...56
Composite metal-graphene structures
U. Novikau, T. Zubar, I. Razanau, V. Kazachenko, K. Sergeev, H. Daletskaya, and S. Filipovich……..57
Co-addition of Nanomaterials in Cuprate High-Temperature Superconductors: Enhanced Performance Implications
Yassine Slimani……58
Temperature dependence of acoustic properties in YAG crystals
F.R. Akhmedzhanov, I.Sh. Toshpulatov, and V.N. Avdievich……59
Properties of transparent ZnO:Al layers obtained by magnetron ion sputtering
Sh. Utamuradova, S. Muzafarova, and K. Fayzullaev……..60
Synthesis and Hardness Characterization of New Superhard Binary Material -Tungsten Pentaboride WB5
A.S. Anokhin, M.S. Chuvikina, E.A. Ermakova, S.S. Strelnikova, I.V. Bondar, A.S. Shipkov, V.P. Filonenko, V.V. Tkachenko, O.V. Ignatenko……...61
The impact of nanostructured powder modifiers on the welded joint structure
Yu. A. Lupitskaya, S. I. Saunina, A. V. Butakov, A. D. Dugin……...62
Катодолюминесцентные свойства $La_xGd_{13-x}EuGe_2B_6O_{34}$
В. А. Кравец и В. А. Крутько……..63

Магнитоструктурные фазовые переходы в некоторых пниктидах на основе марганца
Н.Ю. Панкратов, Т.М. Ткаченко, В.И. Вальков, А.В. Головчан, У.Т. Бердиев, А.В.Гурбанович, Д.В. Якимчук, и В.И. Митюк……64
Термоэлектрические характеристики квантовых точек InGaAs/GaAs
М. В. Дорохин, Ю. М. Кузнецов, Н. В. Байдусь, П.Б. Дёмина, А. В. Здоровейщев…….65
Влияние температурного фактора на структурные особенности и физические характеристики титаната бария
В.А. Турченко и К.М. Гасанов……66
Фотоэлекторонные свойства поликристаллической алмазной пленки, модифицированнной лазерным излучением
А.М. Кондранова, Д.В. Городецкий, О.В. Седельникова, А.В. Гусельников, и А.В. Окотруб……...67
Вовлечение структурной перестройки в процессы формирования магнитного порядка в сплавах системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$
В.И. Вальков, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, Р.А. Сафонов, О.Е. Ковалёв, Н.Ю. Ныркov, В.Т. Сенють, и В.И. Митюк……68
Влияние давления на функциональные свойства магнитокалорического сплава $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$ с пониженной температурой кюри
И.Ф. Грибанов, В.И. Вальков, А.В. Головчан, Р.А. Сафонов, О.Е. Ковалев, Н.Ю. Ныркov, В.И. Митюк……69
Эффективность экранирования ионизирующего излучения полимерных композитов
А. А. Роткович, Д. И. Тишкевич, Т. И. Зубарь, А. А. Бондарук, А. Н. Котельникова, С. А. Герман, и А. В. Труханов……....70
Исследование фрустрированных спиновых систем в модели Гейзенберга
А. И. Самигуллина и И. Ф. Шарафуллин……...71
Сверхтонкие взаимодействия и магнитный порядок гомометаллического оксибората Co_3BO_5 по данным ЯМР $^{10,11}B$ и ^{59}Co
А. Г. Смольников, М. Е. Кашникова, Н. А. Уткин, А. Ф. Садыков, Ю. В. Пискунов, В. В. Оглобличев, и Н. В. Казак……....72
Magnetic properties and IR spectrum of nonstoichiometric $(MnSe)_{1-x}(Tm_{0.76}Se)_x$
S. Aplesnin, A. Kharkov, M. Sitnikov, O. Nikitinskiy, A.M. Zhivulko……....73
Исследование микроструктуры и механических свойств сплава Ni-Cr-Al, полученного методом электронно-лучевого аддитивного производства
Е.Г. Астафурова, Е.А. Загибалова, Д.О. Астапов, С.В. Астафуров, М.А. Лысунец, и Е.А. Колубаев……74
Исследование фотолюминесценции и комбинационного рассеяния света в монокристаллах гибридных металлорганических перовскитов $CH_3NH_3PbBr_3$ и $CH_5N_2PbBr_3$
М. Ахатов, Ю. В. Корх, А. Д. Лобанов, К.М. Константинова, А.Р. Иштеев, и Т. В. Кузнецова……..75
Термодинамическая оценка граничных условий образования нанопорошков CuS(Cr) и CuS(Zn) химическим осаждением
Г. А. Бажина, А. В. Поздин, и Л. Н. Маскаева……76
Влияние окислителя на вольтовую чувствительность пленок PbS(I)
А.В. Бельцева, Д.Е. Быструшкина, Маскаева Л.Н., Марков В.Ф……77
Функциональные свойства химически осажденных пленок PbSe(I)
В.А. Будкина, А.В. Бельцева, О.С. Ельцов, Л.Н. Маскаева……...78

Азотирование порошка железа в условиях термического сопряжения процессов СВС
Е. И. Волченко, Т. В. Баринова, и М. И. Алымов……..79
Структура и свойства легированных и нелегированных материалов на основе $AgNbO_3$ для фотокаталитической очистки воды.
И.Г.Генов, Д.П.Козленко,О.Ю.Пономарева, И.Г.Виноградов, А.Н.Нечаев,Т. Н. Вершинина, О.Н.Лис,А.В.Руткаускас, А.В.Данина, Е.А.Корнеева, М.Н.Мирзайев……..80
Факторы, влияющие на эффективность магнитостатического экранирования составных цилиндрических экранов
С.С. Грабчиков, Е.А. Грабчикова, Т.И. Зубарь, О.Д. Канафьев, Г.А. Русецкий……..81
Влияние замещения ионов Fe^{3+} на Bi^{3+} на фазовый состав, кристаллическую структуру и магнитные свойства гексаферрита бария
И.А.Греков и А.В.Труханов ……82
Синтез, структура и свойства $BaFe_{12-x}Me_xO_{19}$ (Me=Al, Ga), изученные методами рентгеновской дифракции, Мессбауэроской спектроскопии, дифракции нейтронов
С. А. Гудкова, И.А. Солизода, В.Е. Живулин, С.А. Агафонов и Д.А. Винник…….83
Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы карбоплатин-аминолевулиновая кислота-фуллеренол
Е.А. Дикусар, А.Л. Пушкарчук, Е.А. Акишина, Т.В. Безъязычная, А.Г. Солдатов, С.А. Кутень, Д.В. Ермак, Т.С. Пивоварчик, Д.Б. Мигас, А.П. Низовцев, С.Я. Килин, В.И. Поткин……84
Технологические основы получения функциональных наноструктур с управляемыми характеристиками
А.А. Дронов, Ю.В. Назаркина, О.В. Воловликова, Д.А. Дронова, И.М. Гаврилин, Т.П. Савчук, Д.Д. Бутманов, Д.Г. Громов, С.А. Гаврилов……85
Процесс функционализации одностенных углеродных нанотрубок n - бутилбороновой кислотой для создания биологически чувствительного материала для сенсоров
П.А. Едельбекова, Ю.П. Шаман, и А.Ю. Герасименко……86
Гетероструктуры на основе легированного/нелегированного оксида цинка (n-ZnO) и кремния (p-Si) для солнечных элементов
*Ш.Б. Утамурадова, С.А. Музафарова, А.С. Есберг*енова……...87
Определение оптимальных параметров плазменно-электролитической обработки для синтеза композитных покрытий на магниевом сплаве AZ61
А. Л. Желудкевич, С.А. Карпушенков, Л.С. Карпушенкова, А.В. Куницкий, А.В. Коновалова, О.В. Игнатенко……..88
Роль концентрации электролита и напряжения оксидирования для синтеза титан-оксидных структур с каталитической активностью на поверхности алюминиевого сплава AA2024
А. Л. Желудкевич, С. А. Карпушенков, Л. С. Карпушенкова, О. Ф. Минчукова, А. В. Коновалова, О. В. Игнатенко……89
Взаимосвязь фотолюминесценции и химического травления тонких пленок $Cu_2ZnSnSe_4$
В.Д. Живулько, О.М. Бородавченко, А.В. Мудрый, И.А. Могильников, М.А. Сулимов, И. Форбс, и М.В. Якушев……90
Магнитосопротивление на постоянном и переменном токе в селенидах марганца замещенных тулием
О.Б. Романова, С.С. Аплеснин, А.М. Живулько, Л.В. Удод……...91

Зависимость фазового состава поверхностного модифицированного слоя, сформированного при ионно-плазменной обработке, от размера зерна в аустенитной нержавеющей стали
Е.А. Загибалова, Е.Г. Астафурова, и К.Н. Рамазанов……92
Первопринципное и Монте-Карло моделирование магнитных свойств сплавовFe-*Me* (*Me* = Al, Ga) с малым содержанием *Me*
М. А. Загребин, И. А. Маркович, А. С. Кузнецов, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, и В.Д. Бучельников……...93
Взаимодействие Дзялошинского-Мория в мультиферроиках-манганатах RMn_2O_5
И. А. Зобкало……94
Температурная зависимость электропроводности заряженных доменных стенок в химически восстановленных кристаллах ниобата лития
А. М. Кислюк, И. В. Кубасов, А. В. Турутин, В. П. Иванов, А. А. Темиров, В. В. Куц, М. Д. Малинкович, и Ю. Н. Пархоменко……..95
Изучение влияния ионизирующего излучения на структурные особенности композитных керамик
А. Л. Козловский, Р. Б. Елшибеков……96
Исследования влияния вариации фазового состава на теплофизические параметры композитных керамик
А. Л. Козловский, И. К. Тлеулесова……97
Примесный состав и катодолюминесценция HPHT- алмазов типа IIb с концентрацией бора от 0.03 до 60 ppm
В.А. Кравец, И.В Клепиков, Е.А. Васильев, Б.Е. Бураков, С.Н. Бочаров, К.Н. Орехова, П.А. Дементьев, и М.В.Заморянская……98
Обратный магнитокалорический эффект в соединении системы Mn-Cu-Sb
А. С. Кузнецов, А. В. Маширов, К. А. Колесов, В.И. Митюк, и В. В. Коледов……...99
Термомагнитный эффект Нернста-Эттингсгаузена в тонких многослойных металлических плёнках Co/Pt
Ю. М. Кузнецов, Д. А. Здоровейщев, М. В. Дорохин, и А. В. Здоровейщев……...100
Электромагнитные свойства ауксетика в диапазоне 2.14-3.20 ГГц (S-band)
В.Д. Лаврененко, Г.В. Горохов, А.Г. Любимов, В.О.Говоровский, О.М. Касперович, и Д.С. Быченок……...101
Исследование структуры нанокристаллического сплава FeSiAl
А. О. Ларин, О. Ф. Минчукова, А. Л. Желудкевич, К. А. Павлович, А. И. Макейчик…...102
Структура и электрические свойства твердых растворов $BiFeO_3$-$BaTiO_3$-$SrTiO_3$ в области морфотропной фазовой границы
М.В. Силибин, М.С. Михайлова, Д.В. Желудкевич, С.И. Латушко, и Д.В. Карпинский…...103
ЯМР спиновая релаксация протонов функциональных групп на поверхности алмазных наночастиц и молекулярных комплексов на их основе
В.Т.Лебедев, Н.П.Евлампиева, М.В.Попова, М.А.Вовк, А.В. Швидченко, Б.Б.Тудупова, и В.И.Куулдар……104
Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронные и магнитные свойства гексаферрита бария $BaFe_{11}Ti_{0.5}Al_{0.5}O_{19}$
А. Д. Лобанов, Ю. В. Корх, С.А. Маслова, Д. А. Шишкин, Н. А. Черкасова, В. Е. Живулин, С. А. Гудкова, Д. А. Винник, Е. И. Патраков, Р.Г. Чумаков, М. Н. Сарычев, В. Ю. Иванов, и Т.В. Кузнецова……105
Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронные и магнитные свойства гексаферрита стронция $SrFe_{11.3}Ti_{0.4}Al_{0.3}O_{19}$
Ю. В. Корх, А. Д. Лобанов, Д. А. Шишкин, Н. А. Черкасова, В. Е. Живулин, С. А. Гудкова, Д. А. Винник, Е. И. Патраков, В. Ю. Ирхин, М. Н. Сарычев, В. Ю. Иванов и Т.В. Кузнецова……106

Исследование микромеханизмов разрушения сплава системы Ni-Cr-Al, полученного методом электронно-лучевого аддитивного производства
М.А. Лысунец, Е.А. Загибалова, Д.О. Астапов, Е.Г. Астафурова, и Е.А. Колубаев*….107
Смещение характерных температур метамагнитоструктурного фазового перехода под действием внешнего магнитного поля с сплавах $Ni_{50-x}Mn_{33.4}In_{15.6}V_x$
А. В. Маширов, Д. Д. Кузнецов, С. В. Таскаев, И. И. Мусабиров, и В. И. Митюк……...108
Формирование растяжимых светоизлучающих структур на основе $CsPbBr_3$ и нитевидных нанокристаллов A3B5
Д. М. Митин, А. А. Якубова, Ф. М. Кочетков, Д. Е. Колесина, Р. Кенесбай, А. С. Тойкка, и И. С. Мухин……..109
Оптимизация емкостных характеристик сульфида кобальта
Т.А. Моисеева, Д. А. Королев и Т.Н. Мясоедова……110
Конкуренция обменных взаимодействий и их влияние на магнитную структуру в ортоферрите $HoFeO_3$
А. К. Овсяников, О. В. Усманов, и И. А. Зобкало……111
Композит феррит - углерод со сферической формой частиц, взаимодействие с электромагнитным полем.
В. В. Паньков, И. С. Окунев, Д. В. Ивашенко……..112
Влияние условий синтеза на состав и свойства твердых растворов $(1-x)Cu_{1-\delta}GaSe_2 – (x)Ag_{1-\delta}GaSe_2$ ($0 \le x \le 1$, $0 \le \delta \le 0.3$), применяемых в качестве фотокатодов
В. В. Ракитин, М. В. Гапанович, Е. .В. Рабенок, Д. С.Луценко, А. В. Станчик, и В. Ф. Гременок ……...113
Влияние типа подложки на структуру нанокомпозитов на основе CdTe, полученного методом электрохимического осаждения
У. Р. Бакланова, В. В. Ракитин, и М. В. Гапанович……...114
ИК-спектроскопия n-Si<Pt>, облученного альфа-частицами
Ш. Б. Утамурадова, Д. А. Рахманов, А.С. Дорошкевич, В.А. Кинев……115
Фотоиндуцированные изменения импеданса поликристаллических пленок $CuInSe_2$
О.Б. Романова, С.С. Аплеснин, Т.М. Гаджиев, М.А. Алиев, Н.А. Черемных, О.С. Никитинский, Л.В. Удод, Х.Т. Гаджиева……116
Магнитная фазовая диаграмма в соединениях на основе MnGe и ее эволюция под воздействием внешего давления
Д. О. Сканченко, Е. В. Алтынбаев, Р. А. Садыков, и А. В. Цвященко……..117
Формирование тонких проводящих плёнок вольфрама для кантилеверов и испытание полученных зондов методом электросиловой микроскопии
А. М. Соколов, А. В. Новак, И. В. Сагунова, В. Д. Ковалев, Д. А. Дронова……...118
Эволюция электронной структуры и топологических свойств в $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4$ (A = Ge, Sn, Pb)
А. В. Тарасов, А. В. Ерыженков, и А. М. Шикин ……...119
Вольфрам-углеродные композиты с графеноподобной структурой: тепло- и радиационная стойкость
Д.И. Тишкевич, С.А. Герман, И.В. Рязанов, В.Д. Живулько, А.А. Бондарук, А.А. Роткович, Т.Н. Вершинина, Т.И. Зубарь, и А.В. Труханов……120
XRF анализ сплавов феррита кобальта с различными стехиометрическими составами
А.Ф.Тураев.....121
XRD анализ сплавов феррита кобальта с различными стехиометрическими составами
А.Ф. Тураев.....122

Структурные и магнитные переходы в композите $BiFeO_3/Bi_2Fe_4O_9$
Л. В. Удод, С. С. Аплеснин, и О. Б. Романова……123
Синтез и магнитные свойства гидроантимонатов тербия
М. Н. Ульянов, К. А. Агеев, и А. С. Волегов……124
Термолиз $Tb_xH_{2-3x}Sb_2O_6{\cdot}nH_2O$ (x = 0.33, 0.67) пирохлоров
М. Н. Ульянов, К. А. Агеев, и Д. А. Захарьевич……...125
Структурно-химическое исследование n-кремния, легированного хромом и эрбием, при различных режимах охлаждения
Ш.Б. Утамурадова, Ж.Ж. Хамдамов, К.М.Файзуллаев, и Ж.Ш.Зарифбаев ……..126
Синаптическое поведение композитной мультиферроидной структуры ЦТС-Ni при резонансном возбуждении
Ф. А. Федулов, Д. В. Савельев, Е. В. Болотина, М.В. Джапаридзе, и Ю.К. Фетисов…127
Исследование кристаллической структуры и магнитного упорядочения семейства теллуратов $K_2Ni_2TeO_6$ и $Li_2Ni_2TeO_6$ методом нейтронной дифракции
Н. С. Фокин, А. Е. Суслопарова, и А. И. Курбаков……128
Исследование влияния фазовых трансформаций на термостойкость композитных керамик
Ш. М. Хаметов……..129
Влияние дисперсности порошков, полученных из монокристаллического кремния, и режимов изготовления на теплофизические свойства экспериментальных образцов
А. А. Шевченок, М. В. Королевич, и В. Н. Болодон……130
Влагозависимые чувствительные элементы на основе двухслойных нанопористых мембранных Al_2O_3-структур со встроенной системой алюминиевой металлизации
Д. Л. Шиманович……...131
Конструктивно-технологические приемы создания топологических зон для открытого выхода на несущие алюминиевые основания в толстослойных Al_2O_3-покрытиях
Д. Л. Шиманович……...132
Гранулированный МОКП фумарат алюминия с полимерным связующим
А. С. Мурашко, В. В. Паньков, и Т. Г. Шутова……..133
Связь между фотоупругостью и поляризуемостью в кристаллах типа силленита
Ф.Р. Ахмеджанов и М.И. Элбоева.....134
Диод с барьером Шоттки на основе Ga_2O_3 с напряжением пробоя более 1 кВ
Н. Н. Яковлев, А. В. Алмаев……..135
Гетеропереход NiO/β-Ga_2O_3, полученный на объемном кристалле оксида галлия
Н. Р. Матрос, А. Я. Поляков, В. И. Николаев, И. В. Щемеров, А. А. Васильев, А. В. Черных, Д. С. Саранин, Л. А. Алексанян, А. А. Романов, В. М. Крымов, С. В. Шапенков, и П. Н. Бутенко……136
Влияние легирующей примеси переходного металла на фотоэлектрические свойства пленок PbS(I)
А. В. Поздин и Л. Н. Маскаева……137
Ориентационная и температурная зависимость эластокалорического эффекта в монокристаллах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$
Э. И. Янушоните, Е. Ю. Панченко, Ю. И. Чумляков……138

Nanomaterials and Nanotechnologies
Наноматериалы и Нанотехнологии……139

Analysis of barrier inhomogeneities in SWCNT/Si heterojunctions
L.A. Dronina, N.G. Kovalchuk, A.L. Danilyuk, and S.L. Prischepa……...140
Low-Temperature Transport in Amorphous Re_xSi_{1-x} Thin Films at the Metal-Insulator Transition
A. El Oujdi, A. El Kaaouachi, and R. El Bouayadi……141
Electrical conductivity in n-InP at low temperatures under strong magnetic fields
A. El Oujdi, A. El Kaaouachi, and R. El Bouayadi……142
A nucleation mechanism of IRMOF-10 structure
A. A. Ergasheva, E. Y. Umarbekov, and U. B. Khalilov……..143
Multiphysics Simulation of Dendrite Growth in Sodium-Metal Batteries Using COMSOL
A. Bakouei, S. A.Habibi……...144
Evaluation of the thermal stability of ZrC nanoparticles
G. I. Muradova……145
High temperature X-ray diffraction study of neutron irradiated nanocrystalline AlN particles
T. G. Naghiyev and A. S. Abiyev……146
Transition metals nanostructures prepared by solid-phase pyrolysis: effect of synthesis conditions and annealing
S. Pashayan, A. Manukyan, H. Gyulasaryan, S. Zlotski, O. Korolik, and V. Anishchik…….147
Study of a bi-layer MoS_2 phototransistor deposited on a flexible substrate
Stepan Petrosyan, Ashot Khachatryan, and Petik Petrosyan……148
Structural studies of magnetite nanoparticles doped with rare earth ions
A.V. Rutkauskas, O.N. Lis, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, B.A. Abdurakhimov, G.S. Rymski, and A.L. Zhaludkevich……...149
Onset of roughness formation at the c-Ni/*a*-NiO interface
U. Turaeva, M.-S. Paizullakhanov, and U. Khalilov……..150
Methods of color center formation in hexagonal boron nitride
P.G. Vilyuzhanina, E.A.Primak, V.V. Soshenko, S.V. Bolshedvorskii, I.S. Cojocaru, A. M. Kozodaev, S.M. Drofa, A.Chernyavskiy, A.N. Smolyaninov, A.V.Akimov……151
Interface effects and excitation energy relaxation in hybrid nanoassemblies based on semiconductor quantum dots and porphyrin molecules (single objects detection and bulk spectroscopy)
E. Zenkevich, C. von Borczyskowski……...152
Changing the magnetic characteristics of spin LEDs with a closely spaced delta-layer of Mn due to delta-doping with an acceptor impurity
M.V. Ved, M.V. Dorokhin, I.L. Kalentyeva, P.B. Demina, A.V. Zdoroveishchev, E.I. Malysheva……153
Formation of impurity accumulations of Ni and Cu in Si
N.A. Turgunov, N.B. Khaytimmetov, Sh.A. Sobirova ……154
Rheological properties of NiO nanoparticles' based aqueous nanofluids
K.B. Egamberdiyev, S.Q. Telyaev, B.E. Umirzakov, and S.Z. Mirzaev……..155
Modern applications of graphene-based nanomaterials
R. G. Abaszade and E.A. Khanmamedova……..156

Контролируемый рост и магнитные характеристики наноструктурированных Fe-сеток на анодном оксиде алюминия
Д.И. Тишкевич, А.И. Воробьёва, Е.А. Уткина, С.М. Завадский, А.А. Бондарук, А.А. Роткович, Т.И. Зубарь, и А.В. Труханов……157
Исследование химического строения и оптических свойств пористого анодного оксида алюминия, сформированного в растворах селеновой кислоты
Ю.В. Назаркина, Д.Д. Шитова, Д.А. Дронова, А.А. Дронов, Е. В. Кытина, и Е. А. Константинова……158
Структурные и электронные свойства комплекса состоящего, из NV и P1 центров в наноалмазе:HF-3C моделирование
В.А.Пушкарчук , А.П. Низовцев, А.Л. Пушкарчук, С.А. Кутень, Д. В. Ермак, Н.И. Каргин, и С.Я. Килин……159
Влияние переходного слоя на формирование гетероструктур на основе кремния
Ш. Х. Далиев и Ф. А. Сапаров……..160
Люминесцентные свойства квантовых точек $Cd_xZn_{1-x}S$, синтезированных в матрице бегеновой кислоты с помощью метода Ленгмюра-Блоджетт
К.А. Свит и Д. В. Гуляев……...161
Амфотерное молекулярное допирование одностенных углеродных нанотрубок для сенсорных приложений
В. И. Сысоев, Ю. В. Федосеева, Г.И. Семушкина, С. А. Лаврухина, Л. Г. Булушева, и А. В. Окотруб……..162
Исследование ГКР-активных тонких сплавных плёнок на основе комбинаций Ag/Mo и Ag/Nb
А.М. Тарасов, Г.А. Меденков, А.И. Новосельцев, В.Д. Громов, С.В. Дубков и С.А. Гаврилов……..163
Исследование процесса нуклеации частиц Pt на поверхности монокристаллического кремния с различным удельным сопротивлением
О.В. Воловликова, Е.Н. Лазоркина, и К.Н. Кочетова……164
Синтез допированных шпинелей феррита никеля редкоземельными металлами иттрия и гадолиния
А. С. Загребова……...165
Исследование тонких пленок HfO_x, полученных атомно-слоевым осаждением, методом электронной оже-спектроскопии
Н. В. Александров, А. В. Горячев, Е. П. Кириленко, А. А. Дудин, и Г. А. Рудаков……...166
Физико-химические и адсорбционные свойства допированных ионами Zr^{4+} оксидов $Li_4Ti_5O_{12}$ и Li_2TiO_3
А. И. Иванец, Е. С. Бичева, Т.Ф. Кузнецова……167
Исследование структурных свойств и состояния межслойных границ железосодержащих слоистых структур с эффектом однонаправленной анизотропии
И.В.Блинов, Ю.В. Корх, М.А. Миляев, А.В. Столбовский, Т.В. Кузнецова, И.К. Максимова, А.Ю. Гермов, Б.Ю. Голобородский, Р.М. Фалахутдинов ……...168
Влияние условий синтеза и модификации поверхности нанопористого оксида алюминия на краевой угол смачивания
А.А. Бондарук, А.А. Роткович, С.А. Герман, Д.И. Тишкевич, А.В. Труханов……...169
Неохлаждаемые фотодиоды для коротковолнового ИК диапазона 2.0-2.6 мкм на основе метаморфных гетероструктур InAlAs/InGaAs/InP
Е. И. Василькова, О. В. Баранцев, Е. В. Пирогов, К. О. Воропаев, А. А. Васильев, И. И. Новиков, Л. Я. Карачинский, и М. С. Соболев……..170

Исследование динамики экранирования заряда при локальном переключении на неполярной поверхности монокристаллов ниобата лития
В. А. Васипуллин, А. П. Турыгин, М. С. Кособоков, С. А. Мельников, В. Я. Шур, и Д.О. Аликин 171
Тонкие пленки сплава Si_xGe_{1-x}, полученные электрохимическим осаждением германия в пористые кремниевые матрицы с последующим термическим отжигом
И. М. Гаврилин, Н. Л. Гревцов, Д.Л. Горошко, Е.Б. Чубенко, В.П. Бондаренко, А. А. Дронов.....172
Наноструктурированный цирконат бария: синтез в один этап
С.Х. Гаджимагомедов, М.Х. Рабаданов, Л.Р. Хибиева, Ш.П. Фараджев, П.М. Сайпулаев, А.Э. Рабаданова, Д.К. Палчаев, Ж.Х. Мурлиева, Р.М. Эмиров, Н.М.-Р. Алиханов 173
Наноструктурированные керамики феррита висмута: структурные трансформации и диэлектрические свойства
С.Х. Гаджимагомедов, М.Х. Рабаданов, Д.К. Палчаев, А.Э. Рабаданова, Ш.П. Фараджев, Ж.Х. Мурлиева, Р.М. Эмиров, и Н.М.-Р. Алиханов.....174
Фаза прецессии положительно заряженного мюона в феррожидкости с 3% концентрацией наночастиц $CoFe_2O_4$ в ZFC-эксперименте
А.Л. Геталов, С.И. Воробьев, Е.В. Виноградов, В.С. Лобин, Е.Н. Комаров, и С.А. Котов.....175
Сравнительный анализ элементного состава и структуры пленок TiN, полученных магнетронным напылением и атомно-слоевым осаждением
*А. В. Горячев, Н. В. Александров, Е. П. Кириленко, А.А. Дудин, и Г.А. Руда*ков.....176
Влияние режимов отжига на структуру и свойства индий-галлий-цинковых оксидов, допированных оловом
Г. М. Зирник, С. А. Гудкова, Е. А. Шрамков, Е.С. Ананников, Т.А. Маркин, и Д.А. Винник.....177
Светоизлучающие гетероструктуры с InAs квантовыми точками на кремнии
И. В. Илькив, В. В. Лендяшова, и Г. Э. Цырлин.....178
Наносекундное лазерное осаждение сверхтонких пленок золота
Д. А. Колосовский, Т. М. Залялов, С. А. Пономарев, Ю. Г. Шухов, А. А. Морозов, и С. В. Старинский.....179
Фотолюминесцентные свойства анодного оксида алюминия, синтезированного в органических и неорганических кислотах
Е. А. Константинова, Е. В. Кытина, и Ю.В. Назаркина.....180
Влияние температурных условий синтеза на свойства магнетронных пленок оксида галлия
Д. С. Королев, Д. А. Сорокин, К. С. Матюнина, А. А. Никольская, Ю. А. Дудин, В. Н. Трушин, и Д. И. Тетельбаум.....181
Исследование свойств углеродных слоев, полученных методом импульсного лазерного нанесения
А. С. Кравченко, О. В. Вихрова, Ю. А. Данилов, Р. Н. Крюков, В. П. Лесников, и А. В. Нежданов.....182
Исследование влияния параметров гидротермального синтеза на морфологию нанонитей меди
М.Д. Кружалина, А.М. Тарасов, К.И. Пак, Р.М. Рязанов, С.В. Дубков, Д. Г. Громов.....183
Сравнительный анализ спиновых центров в пористом оксиде алюминия, сформированном в органических и неорганических кислотах
Е. В. Кытина.....184

Интеркаляция фуллеренов в слоистые структуры сульфированного оксида графена
В.Т. Лебедев, А.В.Швидченко, Б.Б.Тудупова, В.И.Куулдар……...185
Nanostructured PMMA/Fe3O4 composite fibers obtained by electrospinning
A. Lesbayev, D. Akalim, D. Yerezhep……186
Разработка и развитие методик рентген-флуоресцентного анализа с использованием радиоизотопного источника для исследования элементного состава наноструктурных образцов
Лю Дэжуй, Д.А. Румянцева……..187
Электрохимическое формирование наноструктур германия для планарного литий-ионного аккумулятора
И. С. Маринкин и И. М. Гаврилин……188
Исследование наночастиц Pd и Ag/Pd полученных путем восстановления из солей металлов
В. А. Матвеев и Н. Н. Губанова……...189
Определение влияния температуры роста на концентрации дефектов в слоях GaN методами фотолюминесцентной спектроскопии
И. В. Осинных, Т. В. Малин, Д. С. Милахин, Д. Ю. Протасов, К. С. Журавлёв……...190
III-V полупроводниковые наноструктуры переменной размерности на поверхности кремния
Р. Р. Резник, К. П. Котляр, А. И. Хребтов, И. В. Илькив, В.О. Гридчин, Н. В. Крыжановская, D. Barretin, и Г. Э. Цырлин……191
Магнитооптические исследования тонких оксидных пленок: новые перспективы
Ю. Э. Самошкина……..192
Особенности воздействия пучка низкоэнергетических ионов кислорода на тонкие пленки металлов
Серокурова А.И, Новицкий Н.Н., Шарко С.А., Кецко В.А……193
Нелинейная инерционная динамика намагниченности антиферромагнетиков
А. С. Титов, Н. В. Чукашев и С. В. Титов……...194
Влияние давления на морфологические параметры примесных скоплений Co в Si
Н.А. Тургунов, С.З. Зайнабидинов, Ш.К. Акбаров, и Ш.А. Собирова……...195
Синтез и структура волокнистых алюмоиттриевых гранатов
Т.М. Ульянова, П.А. Витязь, Л.В. Овсеенко, и Н.П. Крутько……...196
Технология и особенности изготовления монокристаллических тонких пленок спинового бесщелевого полупроводника CoFeMnSi
Ф.А. Усков……..197
Изменение структуры пековых коксов в процессе высокотемпературной обработки
А.Г. Фазлитдинова, В. А. Тюменцев, И.П. Карих, и Л.Ф. Шакирова……...198
Слоистые структуры на основе $BiFeO_3$, проявляющие мемристивные свойства
Ш. П. Фараджев, С. Х. Гаджимагомедов, М. Х. Рабаданов, и А. Э. Рабаданова……..199
Изучение влияния допирования оксидом магния на свойства метацирконата лития
А. А. Хаметова, А. Л. Козловский и А.В. Труханов……200
Исследование особенностей формирования электрическим током ГКР-активной подложки на основе тонкой плёнки Ag-Nb-N-O
Ю.В. Чумаченко, Д.В. Новиков, С.В. Дубков, Д.Г. Громов, Л.С. Волкова, и С.А.Гаврилов……...201

Theory and Modeling in Materials Science
Теория и Моделирование в Материаловедении……202

The Adsorption Properties of Gallium Atoms on Phenanthrene by Density Functional Theory Calculations
Andreea Neacsu, Viorel Chihaia……203
Mechanism of ethylene formation from CH_3 via plasma-catalytic method
F.A. Khaydarov, X.Sh. Begmurodova, Z.I. Iskandarova, U.B. Khalilov……204
Adsorption of germanium in ordered graphene with a vacancy
M. M. Asadov, S. N.Mustafaeva and S. S.Guseinova……..205
Charge-sensitive methods for studying the distribution of surface electrostatic potential
K. Pantsialeyeu, R. Vorobey, A. Svistun, U. Mikitsevich, and A. Zharin……206
Modern problems of quantum theory of electronic structure of materials containing transition metals, lanthanides, and actinides
Yu. Lomachuk, D. Maltsev, N. Mosyagin, V. Shakhova, and A. Titov……207
Mapping the chemistry of boron-nitride molecules
M. Fedyaeva, S. Lepeshkin, and A.R. Oganov……208
Atomic Displacemant Vectors of Ni and NiO Nanoparticles in Aggregation Process
K. B. Egamberdiev, S. Z. Mirzaev, and U. B. Khalilov……...209
Computational Study of Thermodynamic Stability in Bimetallic Ni–Pt Nanoparticles: Effect of Size and Composition
F.A. Khaydarov, X.Sh. Begmurodova, and U.B. Khalilov……..210
Моделирование структурных свойств и явления переноса в $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$
С.М. Асадов и С.Н. Мустафаева……211
Моделирование пренуклеации перилена на поверхности Ni (111) и Ni (331)
Д. Х. Хусанова, С. З. Мирзаев, и У. Б. Халилов……...212
Контактная задача для кругового штампа с учетом нелинейности упругих свойств основания
*С. М. Айзикович, П. А. Лапина, и И. А. Па*нфилов……213
Расчет энергетических барьеров диффузии элементов третьей группы в InAlAs
И.А. Александров и Д.В. Гуляев……214
Высокоточный сохраняющий норму сепарабельный псевдопотенциал для рения
А. В. Баглов, Л. С. Хорошко……..215
Топологические фазовые переходы в антиферромагнитных топологических изоляторах
А.В. Ерыженков, А.В. Тарасов, и А.М. Шикин……...216
Распространение электромагнитных волн в цилиндре, выполненном из материала с потерями
А. В. Дударев, Д. С. Клыгач……..217
Исследование коэффициента усиления ГКР-активного слоя системы Mo-Ag на поверхности СИПМ-пипетки
С. А. Кондратьева, Д. В. Новиков, Г. А. Меденков, Л. С. Волкова, А. С. Ерофеев, В. С. Колмагоров, и Ю. Н. Пархоменко……..218
Моделирование структурных, электронных и колебательных свойств нанографена легированного атомами азота
С.А. Кутень, А.Л. Пушкарчук, Д.С. Ермак, Т.С. Пивоварчик, А.А. Хрущинский, Н.Н. Дубинецкий, Н.И. Волынец, и К.Г. Батраков……219
Первопринципные расчеты кубического и тетрагонального оксидов рутения и осмия
А. А. Резник, С. А. Горохов, и А. А. Резванов……..220

Поворот оси легкой намагниченности в зависимости от концентрации ионов переходных металлов в твердых растворах $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$
А. В. Чернышев, Т. И. Тисленко, Д. А. Великанов, Е. М. Мошкина, и С. Н. Софронова……221
Воздействие внешнего магнитного поля на структуру и свойства вихреподобных магнитных неоднородностей в наномодифицированных плёнках
Р. М. Вахитов и М. А. Филиппов……..222
Влияние габаритных размеров углекомпозитного материала на величину накопленной дозы в условиях космического пространства
А. С. Якушевич, С. И. Романович, и С. Б. Ластовский……..223
Механизм формирования тонкопленочного CuS с позиции нуклеофильного присоединения
А. В. Поздин, Н. В. Торопов, и Л. Н. Маскаева……...224

Multidisciplinary Section
Мультидисциплинарная Секция……...……225

Vector magnetometer based on NV color centers in diamond
S.V. Bolshedvorskii, V.V. Soshenko, I.S. Cojocaru, S.M. Drofa , A.N. Smolyaninov, and A.V. Akimov……..226
Nuclear reaction mechanisms between the boron ores and neutrons/gamma rays
Mengge Dong, Xiangxin Xue ……227
The study of volumetric and acoustic properties for binary mixtures of 1-chlorohexane + two hydrocarbons at temperatures between 298.15 K and 318.15 K
D. Drăgoescu, F. Sîrbu, and A. Shchamialiou……228
The study of optical and viscometric properties for 1-chlorohexane + two hydrocarbons binary mixtures at different temperatures in the range of 298.15-318.15 K
D. Drăgoescu, F. Sîrbu, and A. Shchamialiou……229
Thermophysical properties of amino acids in aqueous D-Fructose solutions at 298.15 K
I. L. Gheorghe, A. Stefaniu, F. Sirbu, and C. S. Stoicescu……..230
The influence of the amino acids on the structural and thermal properties of the hydroxyapatite synthesized from eggshells
A. Sofronia, A. Botea-Petcu, D. Gheorghe, A. Neacsu, I. Atkinson, C. Marinescu……231
New N-(p-R)-N'-(2-thenoyl)-thiourea compounds: physicochemical investigation and thermal stability study
A. Sofronia, C. Munteanu, D. Gheorghe, A. Neacsu, A. Neacsu, C. Marinescu……232
A calorimetric study of 4-hydroxy-L-proline (L-hydroxyproline)
A.Neacsu, D. Gheorghe, C. Marinescu, and A. M. Sofronia……233
Efficient recovery of metalic lithium by electrodeposition from organic media
M.T.Olaru, A.M.Popescu, M.Ioţa, I.Atkinson, A.Matei……..234
Density measurement and equation of state for normal hexane
A. Shchamialiou, V. Samuilov, N. Holubeva, A. Paddubski, and D. Drăgoescu……235
Thermodynamic and acoustic investigations of manganese salts in aqueous mixtures with applications in the natural mineral waters
F. Sirbu, A. C. Ion, G. Martinica, and I. Ion……...236
Study of optical and viscometric properties for binary (cyclohexane and n-propylbenzene/izo-propylbenzene) mixtures, at 298.15 K temperature and pressure of 0.1 MPa
F. Sirbu and D. Drăgoescu……237
Thermodynamic analysis in mixtures of glycine and aqueous NaCl solvent at 298.15 K and atmospheric pressure
F. Sirbu, A. Stefaniu, C. Stoicescu, A. C. Ion, G. Martinica, and I. Ion……..238

Material-related problems of neuromorphic technologies
N.A. Sobolev……239
Carrier medium for hybrid nanofluids with heat transfer behaviour
S. Z. Mirzaev, K. B. Egamberdiev, O.V. Trunilina, and B.A. Allaev……..240
Measurement of magnon spectrum features of amorphous ferromagnets by small-angle neutron scattering method
L.A. Azarova, K.A. Pschenichniy, O.I. Utesov, and S.V. Grigoriev……241
Application of ultrasonic vibrations for fabrication lead-ree ferroelectric ceramics
V.V.Rubanik, V.K. Frolov, A.D. Shilin, V.V. Rubanik jr., and C. A. Peláiz-Barranco……...242
The evaluation of the thermal stability of quercetin following accelerated electron beam (e-beam) irradiation
A. Neacsu, C. Marinescu, A.M. Sofronia, and D. Gheorghe……..243
Использование методов рассеяния нейтронов на выведенных пучках для прикладных исследований
Е. В. Алтынбаев, С. С. Мохова, и К. В. Гоголинский……244
Передача единицы плотности жидкости эталонным средствам измерений
Н.В. Баковец, К.В. Козадаев……245
Применение μSR-метода для исследования магнитных свойств вещества
С.И. Воробьев, Е.В. Виноградов, А.Л. Геталов, В.С. Лобин, Е.Н. Комаров, С.А. Котов….246
Низкоэнергетическое циклическое индентирование для оценки усталостных характеристик металлов
А.П. Крень, Т. Жанг, Г. А. Ланцман, и О. В. Мацулевич……....247
Применение бидоменных кристаллов ниобата лития для измерения магнитострикции
И. В. Кубасов, А. В. Турутин, А. М. Кислюк, В. В. Куц, Э. Э. Максумова, М. Д. Малинкович, и Ю. Н. Пархоменко……248
Гибридные наноматериалы на основе функционализированных нанопластин оксида графена для устройств электроники
А. В. Кухто, и Т. А. Павич……249
Разработка научно-исследовательских станций на выведенных нейтронных пучках силами НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
С. С. Мохова и Е. В. Алтынбаев……..250
Структура и колебательные свойства кремния, легированного диспрозием
Х.С. Далиев, Ш.Б. Утамурадова, Ж.Ж. Хамдамов, Ш.Б. Норкулов……251
Установка малоуглового рассеяния нейтронов на компактном нейтронном источнике
К. А. Павлов, Н. А. Коваленко, и С. В. Григорьев……...252
Реакция винилирования ароматических карбоновых кислот ацетиленом в гомогенно-каталитических условиях
A.Б.Parmanov, S.Nurmanov, L.Khoroshko, O.Ruzimuradov.....253
Безызлучательный перенос энергии и многократное увеличение эффективности фотолюминесценции в кристаллах $CaGa_2S_4$:Nd, легированных иттербием
П. П. Першукевич , О. Б. Тагиев , Э. Г. Асадов , Т. Ш. Ибрагимова, Ф. А. Казимова , М. В. Бельков, Е. В. Луценко, А. В. Мудрый, В. Н. Павловский , Г. П. Яблонский ……254
Применение настольного рентгеновского дифрактометра для измерения тонкопленочных структур
Н. В. Ржеуцкий, Д. М. Кабанов, и Л. М. Буй……..255
Исследование распределения ловушек в МОП-структурах методом частотных зависимостей емкости
Д. В. Сорокин ……256

Концентрационная зависимость электросопротивления в интерметаллидах системы Ti-Al
Р. М. Эмиров, М. Х. Рабаданов, Д. К. Палчаев, М.Э. Исхаков, и Ж.Х. Мурлиева……..257

Workshop «Advanced Techniques for Materials Science»
Семинар «Передовые Технологии для Материаловедения»……258

Small-angle neutron scattering instruments at the PIK reactor: method and capabilities
L.A. Azarova, D.O. Skanchenko, E.V. Altynbaev, and S.V. Grigoriev……259
Методы контактной разности потенциалов в исследованиях твердых тел
А. Л. Жарин……260
Трехосный спектрометр поляризованных нейтронов на РК ПИК
А.Н. Матвеева и И.А. Зобкало……261
Лазерный синтез многофукциональных алмазных материалов в атмосферных условиях
О. В. Седельникова, Д. В. Городецкий, Ю. В. Федосеева, О. Г. Поддубская, и А. В. Окотруб……262
Станция и канал для облучения микросхем СОЧИ
В. И. Тюлькин, Е. М. Сыресин, А. В. Бутенко, А. А. Сливин, Г. А. Филатов, А. Р. Галимов, А. М. Тихомиров, В. В. Ефимов……263
Трехосный спектрометр тепловых нейтронов
М. Х. Юзвюк и И. А. Зобкало……264

Workshop «Multiferroics and Magnetoelectric Materials»
Семинар «Мультиферроики и Магнитоэлектрические Материалы»…..265

Особенности полевых зависимостей прямого и обратного нелинейных МЭ эффектов в мультиферроидных структурах
Д.А. Бурдин, и Д.В. Савельев……266
Влияние электрического поля на свойства керамики BS-PT-PMN для управления магнитоэлектрическим эффектом
Д.В. Савельев, Д.А. Бурдин, Е.В. Болотина, Ф.А. Федулов, Д.Ю. Федулов, и Ю.К. Фетисов……....267
Роль орбитального разупорядочения в формировании гриффитсо-подобной фазы в $Bi_xLa_{1-x}MnO_3$ ($0.0 \le x \le 0.2$)
Т.Н. Тарасенко……...268
Исследование магнитных фазовых переходов в ортоферрите $TmFeO_3$ методом нейтронографии при воздействии внешнего магнитного поля
К. Ю. Ткаченко, А. К. Овсяников, и О. В. Усманов……269
Магнитоэлектрические композитные материалы от объемных к МЭМС
А.В. Турутин, И.В. Кубасов, А.А. Темиров, В.В. Куц, А.М. Кислюк, Е.В. Болотина, М.Д. Малинкович, и Ю.Н. Пархоменко……...270
Методика расчета параметров кристаллического поля в редкоземельных ортоферритах $RFeO_3$
О. В. Усманов, А. К. Овсяников, и И. А. Зобкало……271

Workshop «Superhard Materials and High Pressures»
Семинар «Сверхтвердые Материалы и Высокое Давление»……...272

Исследование факторов, влияющих на синтез наноалмазов с люминесцентными центрами в условиях высоких статических давлений
Р.Х. Баграмов……273
Перспективы использования наноалмазов, полученных в условиях высоких статических давлений, в биологических исследованиях
Д.А. Костылев и Р.Х. Баграмов……...274
Бор в решетке графита и алмаза: эксперимент и расчеты
Г.Д. Рыбалов, В.П. Филоненко, З.Н. Волкова, Р.Х. Баграмов, Н.М. Щелкачев, и И.П. Зибров……275
Проблемы синтеза и консолидации наноразмерных частиц алмазоподобного нитрида бора
А.Н. Шипков, В.П. Филоненко, И.П. Зибров, Р.Х. Баграмов, А.С. Анохин , И.В. Бондарь, В.В. Ткаченко ……276

Workshop «Functional materials for Energy Storage»
Семинар «Функциональные Материалы для Накопителей Энергии»…277

Effect of drying on the polyaniline-coated Prussian white cathode material for sodium-ion batteries
N. Samoylova, R. Vasin, S. Sumnikov, O. Ponomareva, M. Donets, E. Korneeva, and E. Andreev……...278
Aqueous zinc-ion battery based on ferrocyanide-graphene cathode
I. Sidorov, U. Novikau, and I. Razanau……279
Sodium-ion battery anode materials based on carbonization products of polyoxadiazole
I. Razanau, I. Sidorov, V. Lomonosov, P. Vasyutchanka, and U. Novikau……280
Unlocking Solid-State Battery Performance via Electrolyte and Interface Design
Y. Wang, X. Xu, and L. Lu……...281
Electrochemical fixation of carbon dioxide to carbon nanotube in molten salt
W. Xiao……282
Dynamical properties of the potassium *nido*-borates: ^{1}H, ^{11}B, and ^{39}K NMR studies
O.A. Babanova, R.V. Skoryunov, A.V. Soloninin, and A.V. Skripov……...283
Моделирование транспорта заряда Li^{+} через границу раздела металлический литий/твердотельный электролит с помощью неравновесной молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов
А. С. Буров, А. М. Абакумов, и Д. А. Аксёнов……..284
Структурные особенности ионного обмена в слоистых катодных материалах металл-ионных аккумулятров
А. А. Голубничий, А. М. Абакумов……285
The rivet effect: a new insight into improving structural stability in Mg-doped Ni-rich single-crystal NMC layered oxides
I. Moiseev, A. Golubnichiy, and A. Abakumov……..286
Химическая совместимость между Ga-LLZO твердым электролитом и литий-обогащённым слоистым оксидным в качестве катода для полностью твердотельных аккумуляторов
Н. Б. Тимушева, А. А. Голубничий, А. В. Морозов, А.С. Буров, Д.А. Аксёнов, А.А.Савина, А.М. Абакумов……...287

Physical and Chemical Technologies

Физические и Химические Технологии

The influence of complexing additives on the composition of NiFeCu alloy films deposited from a combined electrolyte

A. Kotelnikova*, V. Fedkin, O. Kanafyev, A. Bondaruk, A. Rotkovich, D. Tishkevich, T. Zubar, and A. Trukhanov
*SSPA "Scientific and practical materials research centre of NAS of Belarus", 19 P. Brovka St., 220072 Minsk, Belarus, *e-mail: anna.kotelnikova.98@mail.ru*

Analysis of the magnetoresistive effect in multilayer NiFe/Cu, Ni/Cu, Co/Cu films electrodeposited from combined electrolytes (containing both magnetic and non-magnetic particles) showed that high copper impurity content in the NiFe, Ni and Co layers correlates with a decrease in the magnetoresistive effect values [1,2]. This relationship is due to the introduction of copper particles into the lattice of the magnetic material and, accordingly, changes in the crystal structure and such magnetic properties as coercivity, saturation field, saturation magnetization and remanent magnetization. The above together emphasizes the critical importance of reducing the copper impurity content in the magnetic layers to maximize the magnetoresistive effect in multilayer NiFe and Cu-based films deposited from a single electrolyte.

During the investigation electrolyte A (with composition: $NiSO_4 \cdot 7H_2O$ – 256 g/l, $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ – 20 g/l, $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ – 13 g/l, $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ – 2 g/l, H_3BO_3– 30 g/l, $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ – 120 g/l, $C_7H_5NO_3S$ (saccharine) – 2 g/l) was chosen as original to comparise complexing additives influence on the deposits composition. A set of NiFe films was deposited from electrolytes without and with compexing additives (Figure 1) in varied current potentials (from -1.1 to -1.3 V).

It was determined that sulfosalicylic acid addition to the electrolyte reduces Cu impurity in NiFe film most effectively down to 2.3-2.6 at.% in comparison with 3.2-4.1 at.% for original electrolyte. Meanwhile thiourea has a low influence on the Cu content(3.2-3.9 at.%) and 8-hydroxyquinoline on the contrary increases Cu content up to 4.7-5.6 at.%).

It has also been shown that, regardless of the presence and type of complexing agent in the electrolyte, as the potential decreases from -1.1 to -1.3 V in NiFe alloy films, the nickel content increases and the iron and copper content decreases.

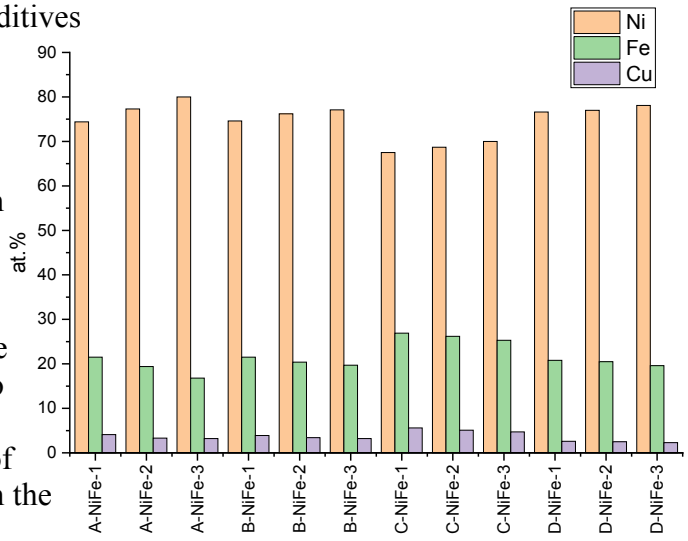


Figure 1. Chemical composition of NiFe alloy films synthesized from different electrolytes (A – original, B – with thiourea 0,61 g/l, C – with 8-hydroxyquinoline 1.16 g/l and D – with sulfosalicylic acid 1.75 g/l) and with different current potentials (1: -1.1 V, 2 : -1.2 V and 3: -1.3 V)

Acknowledgement
The investigations were performed with support of Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Project No. X24M-009).

References:
[1] A. A. Pasa [et al.] Phys. Status Solidi Appl. Res. 173 (1) (1999) 73-84.
[2] H. Kuru [et al.] J. Magn. Magn. Mater. 444 (2017) 132-139.

The determination of the band gap in Cu-intercalated GaSe monocrystal

L. E. Sadigli*
Institute of Radiation Problems of MSERA, 9 B.Vahabzadeh St., AZ1143 Baku, Azerbaijan
**e-mail: sadiglilamiye@gmail.com*

The wide band gap and high nonlinear optical properties of layered GaSe monocrystals make them promising materials for laser technologies, detectors, and nonlinear optical devices [1-3]. In this study, p-type GaSe crystal with a rhombohedral structure was grown using the Bridgman-Stockbarger method, and Cu ions were intercalated electrochemically in both dark and illuminated conditions using a copper sulfate solution. The incorporation of copper ions (Cu^{2+}) into the GaSe crystal lattice significantly affects the optical properties of the material, leading to changes in the absorption spectrum, modification of energy levels, and tuning of photoluminescence characteristics. A Varian Cary UV-50 spectrometer was used to investigate these changes. According to the Tauc method, the intercalation of copper ions under dark conditions narrows the band gap of GaSe, while intercalation under illumination conditions leads to a widening of the band gap. In the dark regime, the incorporation of Cu^{2+} ions into the crystal lattice creates acceptor levels near the valence band, reducing the band gap by approximately 0.1 eV. Under illumination, however, the band gap increases by about 0.05 eV. As a result, conductivity increases, and the material's optical properties are altered. The widening of the band gap during photointercalation is explained by the Burstein-Moss effect, which results from additional free electrons generated by illumination filling the conduction band and blocking lower energy states. Analysis of the optical spectra of the intercalated samples shows that copper atoms positioned between GaSe layers reduce the energy difference between the valence and conduction bands and increase absorption in the long-wavelength region. These changes are significant in terms of the use of the material in optoelectronic devices.

The studies showed that in pure GaSe monocrystals, absorption is high in the 200–350 nm range and stabilizes beyond 400 nm, with a band gap of 2.1 eV. Intercalation with Cu ions, particularly at short wavelengths, reduces the band gap down to 2.0 eV, which is explained by the formation of new energetic levels. During photointercalation, the Burstein-Moss effect is observed, which leads to a widening of the band gap up to 2.15 eV due to increased electron concentration. Thus, intercalation and photointercalation significantly alter the optical properties of GaSe monocrystals.

References

[1] G.B.Sakr. Materials Science and Engineering: B 138(1) (2007) 1-6.
[2] R. Liu [et al.] RSC Adv. 7 (2017) 46699-46703.
[3] Z.Muhammad [et al.] Nano Research, Volume 11, p.4914–4922 (2018).

Electron structure lithiumlic hypothetical structure

E. B. Duginova*
*T.F. Gorbachev Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education, 28 Vesennaya St., 650000 Kemerovo,Russia, *e-mail: kit.katy@mail.ru*

Using the methods of density functional theory for the first time for $LiTlX_2$ (X=O,S) compounds, the hypothetical structure of chalcopyrite is considered and the equilibrium structural parameters are determined.

To model the chalcopyrite structure in selected $LiTlX_2$ crystals, it is necessary to determine the lattice parameters a, c and the anion coordinate (O, S atoms) x. The coordinates of the main atoms in the chalcopyrite unit cell are: Li – (0,0,0) (0,½,¼); Tl – (0,0,½) (0,½,-¼); (O, S) – (x,¼,⅛) (-x,¼,⅛) (-¼,x,-⅛) (¼,-x,-⅛), in units of $a(1,1,\gamma)$, where the ratio $\gamma=c/a$ characterizes tetragonal compression. The equilibrium values of a, c, and the anion coordinate x for $LiTlX_2$ crystals were calculated using the formulas from [1] and are presented in the Table 1. Model calculations for $LiTlX_2$ (X = O,S) crystals were performed using the methods of density functional theory (DFT), which form the basis of the CRYSTAL program code [2].

Table 1. Equivalent parameters of the crystal structure of $LiTlX_2$ compounds

Parameters	a, Å	c, Å	x	γ
$LiTlO_2$	4.3371	6.5978	0.2118	1.52124
$LiTlS_2$	5.4531	9.9683	0.2422	1.82802

Calculations of the band structure and density of states for LiTlX2 compounds with chalcopyrite structure have not been performed to date. The results of our calculations of the band structure E(k) are shown in the Figure 1.

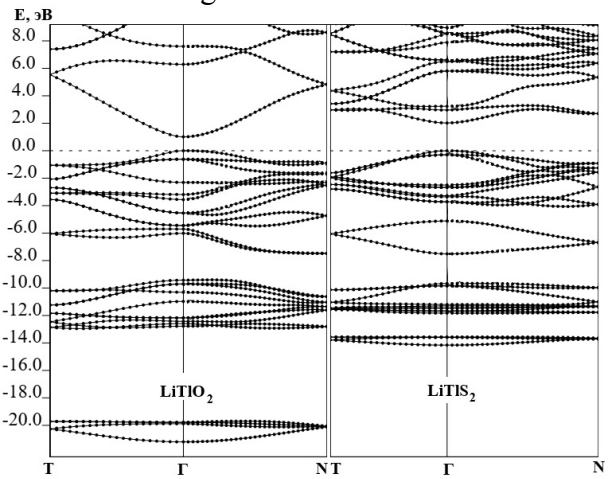


Figure 1. Band structure $LiTlX_2$

For the beginning of the energy scale, the position of the top of the valence band is selected, which for these compounds is realized at point Γ. The zero energy value corresponds to the last filled state. The band gap for $LiTlO_2$ is 1.008 eV, for $LiTlS_2$ it is 2.0265 eV.

It has been established that the $LiTlS_2$ and $LiTlO_2$ crystals under consideration are semiconductors, like some of the isostructural and isoelectronic $LiMX_2$ crystals we have studied earlier [2].

References:

[1] J.E. Jaffe [et al.] Phys. Rev. B. 294 (1984) 1882.
[2] Yu.M. Basalaev [et al.] J.Struct.Chem. 48 (2007) 1001.

NV-NV ensemble interaction in diamond

A. Chernyavskiy[1,2,3*], V. V. Soshenko[1,2], S. V. Bolshedvorskii[1,2] and A. V. Akimov[1,2]
[1]*Russian Quantum Center, Skolkovo Innovation Center, Bolshoi Boulevard, Building 30, 121205 Moscow, Russia, e-mail: cherniavskii.a@phystech.edu*
[2]*P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Leninskiy Prospekt 53, 119991 Moscow, Russia*
[3]*Moscow Institute of Physics and Technology, Institutsky lane, 9, 141701 Dolgoprudny, Moscow region, Russia*

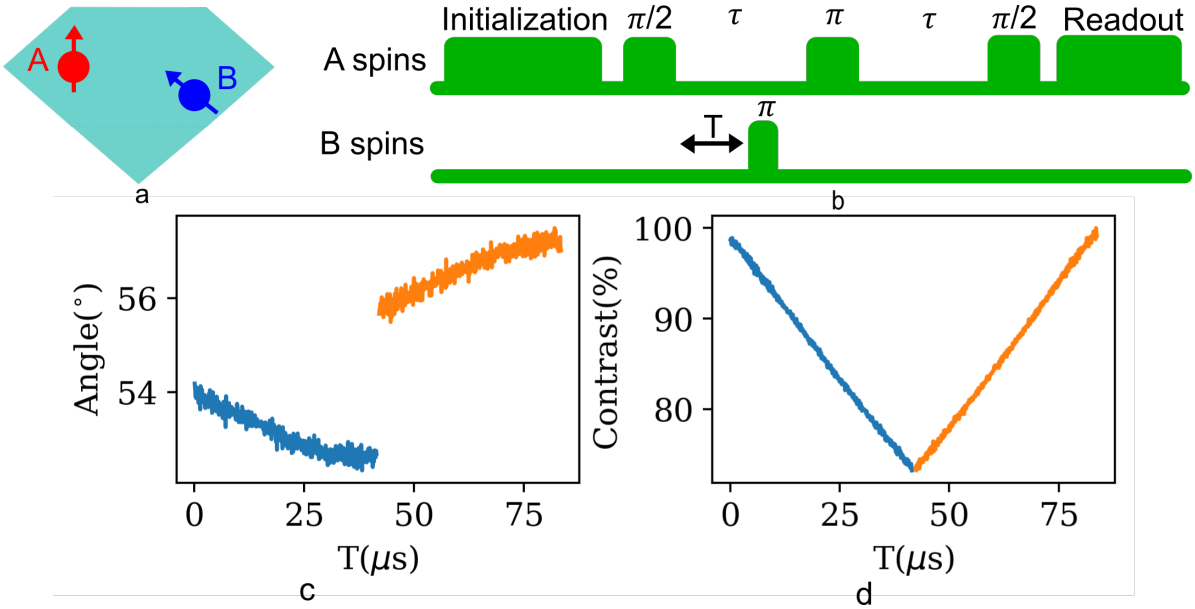


Figure1. a) Scheme of A and B spins' orientation in diamond b) Scheme of the DEER experiment in which frequency of MW2 is in resonance and T is scanned from 0 to 2τ c) Time trace of state vector angle d) Normalized time trace of state vector's length

Double electron-electron resonance (DEER) is a widespread method of probing dipole interaction between different types of spins. In diamond this type of spectroscopy was carried previously for p1-center and nitrogen-vacancy (NV) center in diamond [1]. In the current work interaction between two NV center ensembles (A and B) was studied.

We conducted a DEER experiment in which two groups of nitrogen vacancy (NV) centers in the same diamond are optically polished and excited by radiofrequency pulses. The groups are oriented along different crystallographic axes in diamond (Fig. 1a). Magnetic resonances are spectrally resolved by application of DC magnetic field, inclined to NV axes in a manner that Zeeman splitting is different. To make full state tomography of A spins, different phases of the last π/2 pulse were used. DEER signal is obtained by sweeping, π pulse position to excite B spins (Figure 1b). Step-like discontinuity in dynamic phase was revealed (Figure 1c). It can be described by the fact that B spins' π pulse and A spins' π pulse do not commute. Linear change in phase with an angular velocity $\omega=6*10^2$ rad/s can be described by the initial spin polarization of B spins. Coherence of A spin decays with rate $k=6.3*10^3 s^{-1}$, obtained from vector length data (Figure 1d). Decay rate strongly depends on NV concentration and allows to define NV concentration from NV-NV DEER signal.

References

[1] O. Rubinas [et al.] Quantum Electronics 51 (2021) 938

Структурные и оптические свойства кремния, легированного иттербием

Х.С. Далиев, Ш.Б. Утамурадова, Ж.Ж. Хамдамов, М.Б. Бекмуратов*
Институт физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана, ул. Янги Алмазар, 20, 100057 г, Ташкент, Узбекистан,
**e-mail: mans-bek@mail.ru*

В последние годы в науке многие ученые проявляют большой интерес к взаимодействию редкоземельных элементов (РЗЭ) с поверхностью полупроводника, особенно с поверхностью кремния [1]. Этот интерес обусловлен следующими факторами: благодаря высокой химической активности редкоземельных элементов на границе РЗЭ-кремний могут образовываться упорядоченные пленки с уникальными физико-химическими свойствами, такими как высокая термическая стабильность, теплопроводность и электропроводность. Во многих исследованиях изучались процессы формирования РЗЭ-кремниевого взаимодействия, включая границы в кремний-иттербиевых структурах [2]. Кроме того, кремний-иттербиевая система интересна с практической точки зрения, поскольку силицидные пленки образуются в определенных условиях и перспективны для использования в транзисторах, основанных на структуре металл-оксид-полупроводник [3].

Целью данной работы является изучение кремний легированого иттербием Si<Yb>. Структурные изменения были исследованы с помощью рамановской и инфракрасной спектроскопии. Рамановские спектры были получены с помощью рамановского спектрометра SENTERRA II Bruker с точностью по длине волны 0,2 $см^{-1}$. Эксперименты проводились с лазером с длиной волны λ_0=532 нм, максимальной мощностью P_{max} = 25 мВт, временем излучения 100 секунд и сложением двух спектров. Это устройство позволяет получать спектры в диапазоне от 50 до 4265 $см^{-1}$. Специальная обработка рамановских спектров была проведена для сравнения соотношений интенсивностей между образцами. Перед нормализацией спектров до пика при 522 $см^{-1}$, что соответствует наиболее сильному пику в области 4265-50 $см^{-1}$, для каждого спектра базовая линия была удалена. Рамановские спектры образцов (всего 4) были получены при комнатной температуре. Температура образца была зарегистрирована с точностью до 60°C. Время получения рамановского спектра составило около 120 секунд. Лазерный луч, использованный для измерения рамановского рассеяния, также был применен для изучения структурных изменений. С целью определения предела, при котором происходят необратимые изменения, были проведены измерения с увеличением плотности мощности лазера. Под воздействием лазерного луча температура образца повысилась на 20°C. Это изменение температуры оценивалось по формуле коэффициента интенсивности Стокса/Анти-Стокса. Под воздействием лазерного луча температура образца поднялась до 20°C.

Результаты исследования показывают, что легирование кремния примесью иттербия приводит к снижению концентрации оптически активного кислорода N_O^{opt} на 30-40% в зависимости от количества введенной примеси. Было установлено, что интенсивность света, вызывающая это состояние, значительно ниже уровня, необходимого для кристаллизации лазера или твердого тела.

Список использованных источников:

[1] Kh.S. Daliev [и др.] East Eur. J. Phys. 1 (2024) 375-379.
[2] Kh.S. Daliev [и др.] East Eur. J. Phys. 4 (2023) 167
[3] C.-H. Shih [и др.] *Semicond. Sci. Technol.* 23 (2008) 125033

Механизм формирования зерен керамики $BaFe_{12-x}Mn_xO_{19}$

С. А. Гудкова[1]*, Г. М. Зирник[1], Д.Е. Живулин [3], Д.А.Учаев [3], Е. А. Шрамков[1,2], и Д.А. Винник[1,3,4]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер. 9, 141701 г.Долгопрудный, Россия,
**e-mail: svetlanagudkova@yandex.ru*
[2]НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, 1, 123182 г. Москва, Россия
[3]Южно-уральский государственный университет (Научно-исследовательский университет), пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия
[4]Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Университетский пр. 2, 198504 г. Петергоф, Россия

Гексаферриты бария нашли свое применение в качестве постоянных магнитов, ячеек памяти для жестких дисков, фазовращателей, антенн благодаря высокой анизотропии свойств. Легирование данного материала расширило диапазон варьирования свойств материалов и как следствие – областей применения [1]. Даная работа посвящена фундаментальному изучению формирования зерен керамики с целью дельнейшего усовершенствования методик синтеза данных материалов.

Для изучения границ раздела зерен и структуры материала была взята линейка образцов $BaFe_{12-x}Mn_xO_{19}$, где x меняется от 0 до 3 с шагом 0.5. Образцы получены методом твердофазного ситеза из карбоната бария, оксида марганца Mn_2O_3, оксида железа Fe_2O_3. Для подтверждения кристаллической структуры и расчета параметров решетки использовался метод рентгеновской дифракции (XRD). Для изучения химического состава применялся спектр методов с различной областью исследования по глубине. Методом атомно-эмиссионной спектрометрии с индукционно – связанной плазмой (ICP) был определен химический состав образцов. Для изучения химического состава на глубине до 1 мм использовался рентгеновский флюорисцентный спектрометр (XRF), на глубине до единиц мкм применялся энерго-дисперсионный спектрометр (EDX) и на глубине 5-10 нм исследования химического состава и состояния элементов проводились с помощью рентгеновского фотоэлектронного спектрометра (XPS).

Кристаллическая структура всех образцов соответствует гексагональной решетке гексаферрита бария P63/mmc(194). С увеличением содержания марганца параметры решетки уменьшаются, что объясняется незначительной разницей радиусов ионов Fe^{3+} и Mn^{3+}. По данным XRF и EDX элементный состав керамических материалов соответсвует составу исходной шихты для каждого x. При этом приповерхностный слой сильно обогащен ионами бария и соотношение содержания бария к железу доходит до 1:1. На основании полученных данных можно предположить, что поверхность зерен и соединение зерен идет через связи O-Ba-O. При этом граничный слой представляет собой одну-две кристаллических решетки, которые не образуют дополнительную фазу, что подтверждается данными XRD. Предложенную гипотезу предлагается подтвердить данными ИК спектроскопии, показав отличие линий Ba-O в системе BaO_x и в феррите $BaFe_{12-x}Mn_xO_{19}$.

Список использованных источников

[1] R.C. Pullar. Prog. Mat. Sci. 57 (7) (2012) 1191-1334.

Влияние примеси стронция на диэлектрическую релаксацию керамики титаната бария

В. В. Иванов*, О.В. Малышкина, и И.Л. Кислова
*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», ул. Желябова, 33, 170100 г. Тверь, Россия, *e-mail: vladislav_40@mail.ru*

Целью работы являлось исследование влияния концентрации стронция (Sr) на диэлектрические и сегнетоэлектрические характеристики керамики титаната бария ($BaTiO_3$). Нами были получены и исследованы образцы керамики $Sr_xBa_{1-x}TiO_3$ (x=0,1;0,2; 0,25;0,3;0,35;0,4). Синтез исходных составов $BaTiO_3$ и $SrTiO_3$ осуществлялся раздельно по стандартной керамической технологии при температурах 1350°C и 1100°C соответственно. Смешивание в определенных пропорциях порошков $BaTiO_3$ и $SrTiO_3$ происходило перед прессованием образцов. Образцы $Sr_{1-x}Ba_xTiO_3$ спекались при T = 1300 °C.

Изучение структуры и элементного состава образцов проводились на растровом электронном микроскопе (JEOL 6510LV) в ЦКП ТвГУ. Обнаружено, что с увеличением примеси Sr средние размеры зерен исследуемых образцов уменьшаются.

В работе проводились исследования дисперсионных характеристик образцов, (диэлектрической проницаемости (ε) и тангенса угла диэлектрических потерь (tg δ), в частотном диапазоне измерительного поля от 10 до 10^7 Гц. В образцах с концентрацией стронция, где x≥0,2, обнаружено наличие резонансной дисперсии диэлектрических характеристик в области частот от 10^5 Гц и выше.

Проводились исследования температурных зависимостей диэлектрических характеристик образцов. Обнаружено, что при увеличении примеси Sr максимум диэлектрической проницаемости смещается в высокотемпературную область при увеличении частоты измерительного поля (см. рис.1). Кроме того, при увеличении концентрации Sr увеличивается ширина температурного гистерезиса.

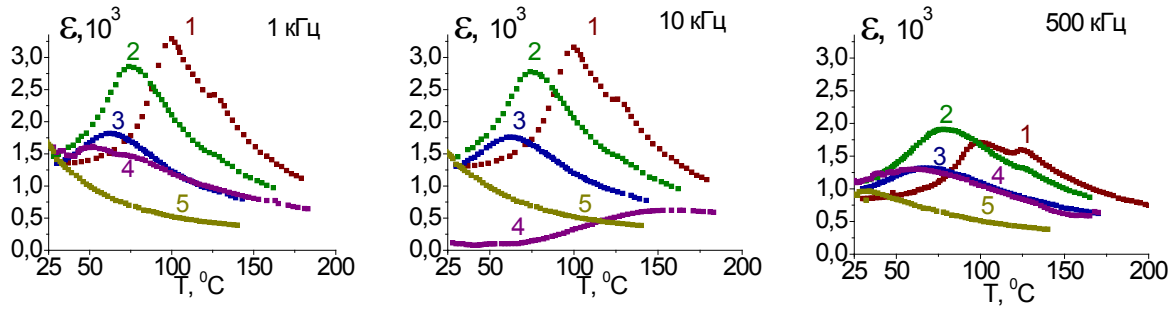


Рисунок 1. Зависимость диэлектрической проницаемости (ε) от температуры на разных частотах (Кривая 1 - состав $Ba_{0,9}Sr_{0,1}TiO_3$, 2 - $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$, 3 - $Ba_{0,7}Sr_{0,3}TiO_3$, 4 - $Ba_{0,75}Sr_{0,25}TiO_3$, 5 - $Ba_{0,6}Sr_{0,4}TiO_3$)

Установлено, что увеличение концентраци стронция в керамике титаната бария приводит к возникновению резонансной дисперсии в сегнетоэлектрической фазе.

Актуальные физические проблемы процесса механо-химического полирования пластин SiC

Корякин С. В.*, Михалёнок Е. В., Гайко М.И.
НИУ «Институт прикладных физических проблем имени А.Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

В работе рассмотрены физико-химические основы процесса химико-механического полирования (ХМП) поверхности пластин монокристаллического карбида кремния 4H-SiC, которые позволяют улучшению эффективность процесса и качества поверхности SiC подложек. Критериями отбора подложек для эпитаксиальных процессов являются: минимальная величина шероховатость рельефа поверхности, минимальная толщины дефектов в приповерхностном слое. Учитывая высокую твердость и сильную химическую инертность SiC сущность процесса ХМП поверхность - циклическое химическая модификация поверхностного слоя монокристаллической пластины с последующим механическим удалением продуктов химической реакции более мягкими абразивными материалами, входящими в состав полировальной суспензии [1].

При реализации данной модели ХМП нами использовались окислители такие как пероксид водорода (H_2O_2), перманганат калия ($KMnO_4$)., а процесс окисления поверхности пластин 4H-SiC выглядят следующим образом (1), где важную роль в эффективности процесса окисления играет концентрация гидроксирадикалов (*OH) формируемых в суспензии при химическом взаимодействии реагентов. Также возможно протекание реакции по формуле (2).

$$SiC + 4\ {}^{*}OH + O_2 \rightarrow SiO_2 + 2H_2O + CO_2\uparrow \qquad (1)$$

$$SiC + 2NaOH + 2O_2 \rightarrow Na_2SiO_3 + CO_2 - + H_2O \qquad (2)$$

В качестве полирующей суспензии использовалась коллоидная суспензия диоксида кремния ULTRA-SOL 17 с удельным весом 1,24…1,26 г/см^3 и размером взвешенных частиц SiO_2 50…70 нм, pH = 11,0…12,0. Для поддержания pH в суспензию добавлялся этилендиамин (1,2-диаминоэтан). Небольшое количество ПАВ применялось как смачивающее и эмульгирующее вещество. Суспензия и окислитель подавались на поверхность полировальника по двум каналам. Скорость подачи суспензии – 40…60 мл/ч, скорость подачи раствора перекиси водорода - 30…50 мл/ч. Температура в процессе– 45…50 ^{0}C. Продолжительность ХМП – 180…650 мин, величина съема толщины пластин – 3…6 мкм, средняя скорость удаления материала – 0,2…1 мкм/ч. Обработка проводилась на лабораторной установке ХМП, разработанном на базе станка METAPOL 1000X.

После ХМП пластина подвергалась различным видам очистки: ультразвуковая обработка разбавленным моющим р-ром, в растворе КАРО, перекисно-соляном растворе, перекисно-аммиачном растворе, промывка дистиллированной водой.

На исследуемой пластины SiC после предварительной полировки выявляются довольно многочисленные дефекты поверхности в виде микростолбиков. На ПМКК после ХМП микростолбиков не обнаружено. Формально, для поля сканирования 10x10 мкм^2 параметр RMS для пластин SiC после предварительной полировки больше 4 нм, а для пластин после финишной меньше 1 нм. Фактически, измерения на АСМ микроскопе позволили выявить дефекты микростолбиков на пластине исследуемой.

Список использованных источников

[1] С.В. Ивенин // Вестник Мордовского университета. – 2015 . – Т.25, №4. – С. 37 – 50.

Металлооксидные пленки оксида олова, изготовленные жидкостным методом

Н.Н. Кошелева[1]*, Т.В. Свистова[1], Е.С. Рембеза[2], Д.С. Пермяков[1], и М.А. Белых[1]
*[1]Воронежский государственный технический университет, Московский пр., д. 14, 394026 г. Воронеж, Россия, *e-mail: nndirda@yandex.ru*
[2]Воронежский государственный университет, Университетская пл., д. 1, 394018 г. Воронеж, Россия

Синтез пленок оксида олова осуществлялся методом спрей-пиролиза из золь-геля [1]. Для приготовления использовался золь-гель метод на основе хлорида олова ($SnCl_2 \cdot 2H_2O$) (0,5 М) и изопропилового спирта (C_3H_8O). Раствор перемешивали на магнитной мешалке при комнатной температуре в течение 1 часа с последующим выдерживанием 24 часа. Нанесение растворов проводилось на предметные стекла для микропрепаратов (ГОСТ 9284-75) размером 26×76×1 мм, которые предварительно очищались в смеси дистиллированной воды и изопропилового спирта в ультразвуковой ванне.

Стеклянная подложка нагревалась инфракрасным (ИК) керамическим нагревательным элементом размером 245×60 мм. Подложка располагалась вдоль нагревателя по центру для того, чтобы добиться равномерного нагрева. Для нанесения раствора создавался аэрозоль при помощи аэрографа OPHIR AC004A, имеющего сопло диаметром 0,3 мм, давление воздуха для аэрографа создавалось безмасляным поршневым компрессором AS186. При нанесении давление составило 3 бар, расстояние от распылителя до подложки 400 мм. После нанесения 10 слоев предусмотрен перерыв 30 секунд для стабилизации нанесенно-го слоя и восстановления температуры нагревателя. Температура поверхности измерялась пирометром HoldPeak hp-1500. Нанесение пленок производилось при температурах 200, 300, 400 °С.

Фазовый состав пленок исследовался на рентгеновском дифрактометре Bruker DIFFRAC EVA3.0 по стандартной методике с использованием базы данных ICDD PDF2012. Размер зерен поликристаллов оценивался по формуле Дебая-Шеррера.

Установлено, что на дифрактограмме пленок оксида олова, изготовленных при 200 ºС (рис. 1), наблюдается аморфная фаза, изготовленных при 300 ºС – аморфную составляющая с присутствием фазы SnO (размер кристаллитов, оцененный по формуле Дебая-Шеррера, составляет 14 нм), изготовленных при 400 ºС - аморфную составляющая с присутствием фазы SnO_2 (размер кристаллитов, оцененный по формуле Дебая-Шеррера, имеет величину от 18 до 28 нм).

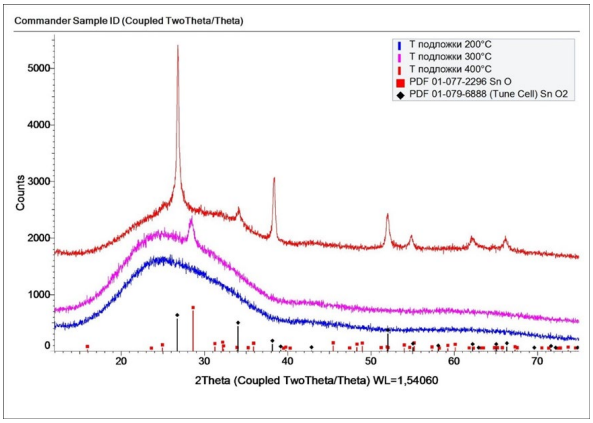


Рисунок 1. Дифрактограмма пленок оксида олова до отжига

[1] С.И. Рембеза [и др.] Монография. Изд-во ВГТУ (2017) 176.

Использование мезопористых молекулярных сит в качестве твердотельной матрицы в синтезе новых мезопористых материалов

Т. Ф. Кузнецова[1]*, А.И. Иванец[1], Е.А. Копыш[1], А.Б. Абдикамалова[2], и И. Д. Эшметов[2]
*[1]Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 9/1, 220012 г.Минск, Республика Беларусь,*e-mail: tatyana.fk@gmail.com*
[2]Институт общей и неорганической химии АН РУзб, ул. Мирзо Улугбека, 77-А, 100170 г.Ташкент, Республика Узбекистан

После открытия мезопористых молекулярных сит на основе оксида кремния(IV) с большими удельными поверхностями, узкими распределениями пор по размерам и перспективами в приложениях к адсорбции и катализу, методология их получения путем супрамолекулярной сборки была расширена на кристаллические вещества такие, как металлосодержащие фосфаты и оксиды металлов (Co(II), Ni(II), Al, Zr(IV), Ti(IV), V(V), Fe(II,III) и др.) Хотя слоистые фосфаты четырехвалентных металлов, в частности фосфаты олова(IV), привлекают внимание исследователей в качестве Li-ионных батарей, ионных проводников, катализаторов и материалов для секвестрации радионуклидов и токсичных металлов, о синтезе мезопористого фосфата олова(IV) до сих пор известно мало [1].

Целью настоящего исследования являлся синтез фосфата олова(IV) со сферической морфологией и высокой степенью контроля структурных и текстурных свойств. Это было осуществлено путем нанокастинга, т.е. выбора прекурсоров фосфата олова(IV) с помощью супрамолекулярного импринтинга «мягкими» (эндо-) и «жесткими» (экзо-) темплатами. Для создания полостей, имеющих топологическое и функциональное соответствие с темплатом, в качестве мягкой и жесткой матрицы соответственно использовали четвертичную пиридиниевую соль в мицеллярной форме и твердотельный оксид кремния(IV) с упорядоченной топологией мезопор MCM-48. Супрамолекулярные единицы мягкого темплата были окклюдированы в растущее твердое вещество фосфата олова(IV), после чего удалены путем нагревания ксерогеля выше температуры разложения темплата, сформировав таким образом мезопористую систему фосфата олова(IV). Что касается жесткого кремнеземного экзотемплата, то образование *in situ* в его мезопорах твердого вещества фосфата олова(IV) обеспечивало после удаления SiO_2 с помощью щелочи каркас оловофосфатного ксерогеля в пористом или мелкодисперсном виде.

Структура полученных материалов была стабильной при температуре 500 °C [1]. Синтезированный с использованием основного темплатного подхода и последующей термической активации новый мезопористый фосфат олова показал четко выраженную слоистую текстуру и преобладающий размер пор от 10 до 20 нм. Текстурные характеристики полученных оловофосфатов ниже, чем у упорядоченного мезопористого кремнезема MCM-48, и лежат в области значений удельной поверхности до 200 $м^2/г$ и объема пор до 0,50 $см^3/г$, характерных для некремнеземных мезопористых материалов. Полученные оловофосфаты не подвержены текстурным, морфологическим и структурным изменениям в жидкой фазе и перспективны для использования в процессах с серьезными ограничениями массопереноса.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнялась в соответствии с заданием 2.1.02 НИР 2 (№ г.р. 20210111 от 10.02.2021) *ГПНИ* РБ на 2021-2025 годы и договором с БРФФИ № Х25УЗБ-096.

Список использованных источников
[1] D.N. Wellman [и др.] Inorganic Chemistry 45 (6) (2006) 2382-2383.

Молекулярно-пучковая эпитаксия III-нитридов для силовой, СВЧ и оптоэлектроники

Е. В. Луценко*
Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь,
**e-mail: e.lutsenko@ifanbel.bas-net.by*

Широкозонные соединения на основе III-нитридов (AlN, GaN, InN) и их твердых растворов находят все большее промышленное применение. Начиная со «светодиодной революции» в освещении, за что японскими учеными была получена Нобелевская премия по физике за 2014 год, внедрение продолжается в СВЧ электронике (5G, 6G, СВЧ телекоммуникации в том числе и космического базирования, АФАР, ЦФАР, средства РЭБ и т.д.). Семимильными шагами развивается УФ оптоэлектроника, фотоника на основе III-нитридов. В силовой электронике происходит вторая полупроводниковая революция, знаменующая собой переход от кремниевых транзисторов к транзисторам на основе GaN, что позволяет значительно увеличить КПД, уменьшить массогабаритные параметры источников питания и контролеров электродвигателей и тем самым уменьшить их стоимость. Это особенно актуально для систем зарядки и электропитания гаджетов, компьютерных кластеров, аэрокосмической и электромобильной техники, робототехники и автоматизированных платформ, дронов, квадрокоптеров и т.д.

В 2024 году Институте физики НАН Беларуси были отработаны технологии создания на SiC зародышевых слоев AlN (40 нм) с низкой концентрацией дислокаций и шероховатостью поверхности менее 0,2 нм методами молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Оптимизация технологии аммиачной МПЭ канального слоя GaN и барьерных слоев AlN и AlGaN гетероструктур позволила на безбуферных гетероструктурах с толщиной канала GaN всего 300 - 400 нм получить подвижность двумерного электронного газа > 2000 $см^2В^{-1}с^{-1}$ при концентрациях до $1,25 \cdot 10^{13}$ $см^{-2}$, что соответствует лучшим стандартным гетероструктурам, толщиной 1,5 – 3,5 мкм. Необходимо отметить, что тонкие безбуферные гетероструктуры обладают меньшими тепловым сопротивлением, эффектом памяти и коллапсом тока, а также большими временем жизни, плотностью мощности и эффективностью, что связано с отсутствием буферных слоев. На подобных гетероструктурах ОАО «ИНТЕГРАЛ» - управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ» и ОАО «МИНСКИЙ НИИ РАДИОМАТЕРИАЛОВ» создали силовые и мощные СВЧ транзисторы с высокой подвижностью электронов.

Для больших удельных токов и соответственно частот и скоростей работы транзисторов, необходимо дальнейшее увеличение плотности двумерного газа и уменьшение его слоевого сопротивления. Используя в качестве барьера InAlN, на безбуферных гетероструктурах, нам удалось получить подвижность до 1100 $см^2В^{-1}с^{-}$ при концентрациях до $2,5 \cdot 10^{13}$ $см^{-2}$, что соответствует слоевому сопротивлению ~250 Ом/кв. Дальнейшая модификация конструкции гетероструктуры, позволила на двухбарьерной гетероструктуре получить подвижность 1600 $см^2В^{-1}с^{-}$ при концентрации до $2,4 \cdot 10^{13}$ $см^{-2}$ со слоевым сопротивлением 165 Ом/кв., что является рекордом. Применение таких гетероструктур позволит получить рекордные характеристики транзисторов.

Высококачественные слои AlGaN с шероховатостью поверхности < 1 нм и порогом стимулированного излучения 500 $кВт/см^2$ на $\lambda = 234$ нм были получены на темплейтах AlN(4 мкм)/Al_2O_3 аммиачной МПЭ. Квантовые ямы AlGaN/AlGaN (3 нм/20 нм), выращенные в таком волноводном слое, показали порог стимулированного излучения ~270 $кВт/см^2$ на $\lambda = 255$ нм. Ведется интенсивная работа по оптимизации условий молекулярно-пусковой эпитаксии квантовых ям и гетероструктур AlGaN для ультрафиолетовых фотоприемников и ультрафиолетовых светодиодов.

Исследование химических преобразований на поверхности монокристаллических пластин InSb, индуцированных химико-механической полировкой и пассивацией

Е. А. Скрылева[1], Б. Р. Сенатулин[1], У. М. Матвеенко[1]*, Е. Н. Абрамова[2], Р. Ю. Козлов[2]
[1]*Университет науки и технологий МИСИС*
*Ленинский просп., д. 4, стр. 1, Москва, 119049, РФ; m2006316@edu.misis.ru**
[2]*АО «Гиредмет»*
ул. Электродная, д. 2. стр.1, Москва, 111524, РФ

Известно, что в процессе изготовления «epi-ready» пластин InSb происходит неконтролируемое окисление поверхности, негативно сказывающееся на работе приборных структур на их основе. Для предотвращения окисления используют различные методы пассивации, в том числе сульфидирование поверхности. В настоящее время не существует единых теоретических моделей, описывающих окисление и пассивацию поверхности полупроводников III-V.

Данная работа посвящена изучению изменения химического состояния поверхности пластин монокристаллического InSb в процессе их изготовления и в результате пассивации сульфидом аммония. Пластины среза (100) были произведены в АО «ГИРЕДМЕТ» с применением химико-механического полирования (ХМП), включающего полировку и несколько циклов отмывки. Пассивация проводилась выдержкой готовых пластин в водных растворах $(NH_4)_2S$ различной концентрации (2.5, 5.0 и 20.0 %), время выдержки менялось от 5 до 20 мин. Исследование химического состава поверхности пластин выполнялось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на спектрометре PHI5000 VersaProbeII. Для количественной оценки окисления поверхности была разработана методика определения уровня окисления (суммарной доли связей атомов In и Sb с кислородом), основанная на химических сдвигах рентгеновских фотоэлектронных спектров In и Sb.

Показано, что на первом этапе ХМП уровень окисления составлял 63 % и снижался до 54 % после циклов отмывки. Окисление сопровождалось появлением диспропорции между атомными концентрациями индия и сурьмы в сторону уменьшения отношения Sb/In. При дальнейшем хранении пластин на воздухе уровень окисления может увеличиваться до 70-80 %.

Операция пассивации привела к появлению серы и уменьшению концентрации кислорода. Спектры серы S 2p (161.5 эВ) расположены в области энергий связи сульфидов, что указывает на образование химической связи между атомами серы и атомами InSb. Химические сдвиги пиков Sb и In, отвечающих за окисленное состояние этих атомов, уменьшились в соответствии с изменением электроотрицательности лиганда. Операция пассивации привела к уменьшению диспропорции между Sb и In.

Показано, что в результате пассивации не наблюдалось полного удаления кислорода, т.е. состав пассивного слоя можно представить условной формулой $(In,Sb)O_xS_y$. Минимальное отношение x/y было получено для концентрации раствора 20 %, однако в этом случае наблюдалось образование димеров серы S=S и толщина пассивного слоя превышала 50 нм (исходя из профилей концентрации). Толщина пассивного слоя в образцах, обработанных при концентрациях раствора $(NH_4)_2S \leq 10$ %, не превышала 5 нм, а отношение x/y было больше, чем при концентрациях раствора 20 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания «Бессвинцовые сегнетоэлектрики и магнитоэлектрические материалы для перспективных сенсоров, актюаторов и элементов электроники» (тема № FSME-2024-0001). Исследования проведены на оборудовании центра коллективного пользования «Материаловедение и металлургия» НИТУ МИСИС.

Тепловое расширение $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при переходе в сверхпроводящее состояние

А. Э. Рабаданова*, Д. К. Палчаев, С. Х. Гаджимагомедов, Ж. Х. Мурлиева, Ш. П. Фараджев, и Р. М. Эмиров

*Дагестанский государственный университет, ул. М.Гаджиева, 43-а, 367000 Махачкала, Республика Дагестан, Россия, *e-mail: Rabadanova.aida@mail.ru*

В данной работе проведены измерения температурной зависимости электросопротивления, теплоемкости, а также выполнены прецизионные рентгеноструктурные исследования характеристик термической деформации кристаллической решетки для микрокристаллического образца $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в сверхпроводящем состоянии. Образец содержит несколько сверхпроводящих фаз с различным уровнем допирования и с шириной перехода $(\Delta T) \sim 4$ К. Содержание кислорода, определенное по рентгеноструктурному анализу и значению T_c (~ 89.2 К) составляет ~ 6,86. На рисунке 1 приведены температурные зависимости электросопротивления $\rho(T)$ и $d\rho/dT$, объема решетки V и теплоемкости C_p/T в области сверхпроводящего перехода. Начало перехода в сверхпроводящее состояние (~ 90.5 К) проявляется на всех свойствах в виде аномалий: подъема на экстремаль для зависимостей $d\rho/dT$ и C_p/T от T, а также уменьшения объема до минимума, после которого он резко возрастает с точкой перегиба, с последующим стремлением к нулю. Максимумы на температурной зависимости $d\rho/dT$, определяющие значение температуры T_c при переходе, в пределах погрешности определения $d\rho/dT$, приходятся на температуры стрикции объема. Эти температуры хорошо согласуются и с температурой ~ 89 К на аномалии теплоемкости, полученной экстраполяцией температурной зависимости теплоемкости от низких и высоких температур. Температура начала отклонения от регулярности приходится на ~ 90,2 К, что незначительно ниже (на □ 0,3 К), чем начало перехода на температурной зависимости электросопротивления.

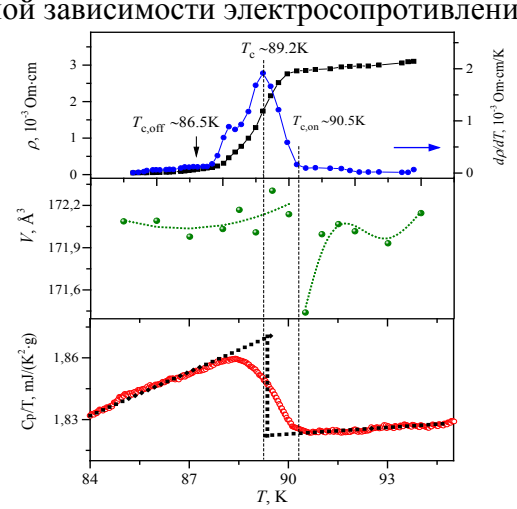


Рисунок 1. Температурные зависимости ρ, dρ/dT, V и Cp/T в области сверхпроводящего перехода

Представленые результаты демонстрируют тесную связь между электрическим сопротивлением, теплоемкостью и искажениями решетки YBCO в зависимости от температуры. Наблюдаемые аномалии теплового расширения при низких температурах являются фундаментальным свойством для сверхпроводников со структурой перовскита.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-32-90170 и Гос. задания FZNZ-2025-0003.

Расчет областей образования твердых растворов La_2S_3 - PbS методом ионообменной трансформации

П. Л. Саидова*, А. В. Поздин, и Л. Н. Маскаева
*Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: polyasa15@ya.ru*

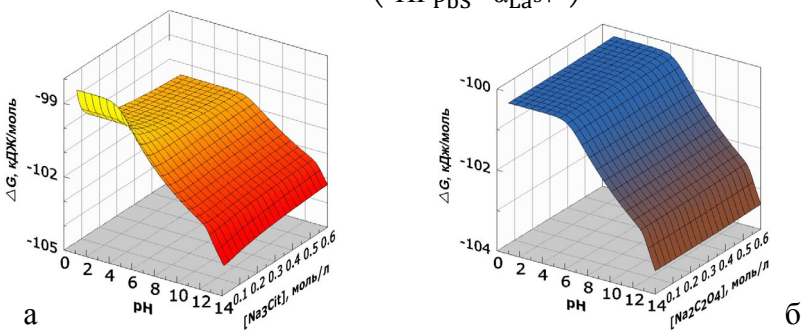
Узкозонный PbS (E_g~0.4 эВ) является перспективным материалом в оптоэлектронике благодаря его применению в ИК-фотодетекторах, датчиках и газовых сенсорах. Модификация тонких пленок PbS путем легирования ионами металлов, в том числе редкоземельными элементами, приводит к существенным изменениям их структурных и оптоэлектронных характеристик, что непосредственно влияет на функциональные свойства материала. Введение ионов La^{3+} в структуру пленок PbS вызывает ряд физико-химических трансформаций. В частности, происходит модификация основности поверхностного слоя пленки, что способствует повышению её газочувствительности. Дополнительно наблюдается оптимизация кинетики восстановительного отклика пленок PbS при введении ионов лантана, обусловленная структурными и электронными модификациями, которые ускоряют процессы рекомбинации носителей заряда. Таким образом, легирование тонких пленок PbS ионами лантана демонстрирует значительный потенциал для улучшения их функциональных характеристик.

Особые перспективы для получения высокообогащённых твёрдых растворов замещения в системе La_2S_3 − PbS при синтезе из водных сред открывает метод ионного обмена. В основе метода лежит гетерогенная ионообменная топохимическая реакция, протекающая на границе тонкой поликристаллической пленки La_2S_3 с водным раствором, содержащим соль свинца:

$$La_2S_{3solid} + xPb^{2+}_{aq} \leftrightarrow La_{1-x}Pb_xS_{solid} + xLa^{3+}_{aq}$$

С термодинамической точки зрения характеристикой, определяющей возможность осуществления реакции, является изменение свободной энергии Гиббса ΔG^0_T, определяемая отношением произведений растворимости халькогенидов металлов, принимающих участие в ионообменном процессе (рис. 1):

$$\Delta G^0_T = -R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{ПР^0_{La_2S_3} \cdot \alpha_{Pb^{2+}}}{ПР^0_{PbS} \cdot \alpha_{La^{3+}}}\right)$$



а б

Рисунок 1. Зависимость изменения свободной энергии Гиббса ионообменного процесса на межфазной границе «пленка La_2S_3 – водный раствор $Pb(CH_3COO)_2$» от равновесных значений pH среды и от концентрации лигандов, введенных в реакционную смесь: $Na_3C_6H_5O_7$ (а) и $Na_2C_2O_4$ (б)

Расчеты показали, что вероятность протекания ионообменной реакции между ионами лантана и свинца в системе «пленка La_2S_3 – водный раствор $Pb(CH_3COO)_2$» возрастает при увеличение pH и возможна на всем его протяжении.

Кристаллическая структура одно- и двухфазных пленок в системе PbS-CdS, полученных химическим осаждением из этилендиамин-цитратной системы

А. Д. Селянина[1] *, Д. А. Дёмина[1], и В. И. Воронин[2]
[1] *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, ул. Мира, 28, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: n-kutyavina@mail.ru*
[2] *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия*

Пленки твердых растворов замещения $Cd_xPb_{1-x}S$ являются типичными материалами, используемыми для создания фотодетекторов в видимом и ближнем ИК-диапазоне. При этом, используя метод химического осаждения, неоспоримым преимуществом которого является возможность управлять морфологией, составом, структурой, и, следовательно, функциональными свойствами полупроводниковых слоёв при изменении условий осаждения (pH, температура, состав ванн), возможно получение гетерофазных композиций, содержащих и твёрдый раствор, и индивидуальные сульфидные фазы.

Синтез слоёв в системе CdS-PbS проводили из реакционных смесей, содержаших фиксированные концентрации $PbAc_2$ и $(NH_2)_2CS$, а концентрацию хлорида кадмия $CdCl_2$ варьировали в интервале от 0.16 до 0.22 моль/л. Роль лигандов, регулирующих скорость осаждения сульфидов свинца и кадмия, выполняли цитрат-ионы $C_6H_5O_7^{3-}$ и этилендиамин $(NH_3)_2(CH_2)_2$.

Кристаллическую структуру и фазовый состав синтезированных слоёв отценивали при помощи рентгеновской дифракции. Расчёт структурных параметров полученных тонкоплёночных соединений проводили с использованием метода полнопрофильного анализа Ритвелда [1] с использованием программы Fullprof [2]. Оценка параметра решетки позволила определить состав пересыщенных твердых растворов замещения $Cd_xPb_{1-x}S$ ($0 < x \leq 0.05$) с кубической структурой $B1$ (пр.гр. $Fm\bar{3}m$), синтезированных при содержании 0.16 – 0.20 моль/л хлорида кадмия. Обнаружено, что использование 0,22 моль/л $CdCl_2$ способствует формированию двух кристаллических фаз: $Cd_xPb_{1-x}S$ (x = 0.05) и CdS с кубической структурой структура $B3$ (пр.гр. $F\bar{4}3m$). Исследование элементного состава энергодисперсионным анализом позволило установить превышение содержания кадмия в синтезированных пленках по сравнению с его количеством, оцененным рентгеновской дифракцией, связанное с образованием от 0,3 до 7 моль.% аморфной фазы CdS, т.е. формирование гетероструктур $Cd_xPb_{1-x}S$/CdS.

Таблица 1. Параметры кристаллической решетки a и текстурированность плёнок $T_{(200)}$, $T_{(111)}$ в системе $Cd_xPb_{1-x}S$

$CdCl_2$, моль/л	0,16	0,17	0,18	0,19	0,20	0,22	
						a_{B1}, нм	a_{B3}, нм
a_{B1}, нм	0,5916(7)	0,5914(4)	0,5913(1)	0,5911(3)	0,5910(7)	0,5910	0,5792
$T_{(200)}$, %	12,2	13,2	16,9	17,2	0,7	38,2	-
$T_{(111)}$, %	-	-	-	-	-	-	54,5

Таким образом, показана возможность одностадийного синтеза тонкопленочных гетероструктур $Cd_xPb_{1-x}S$/CdS, востребованных для создания преобразователей солнечного излучения и функциональных элементов микроэлектроники.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства “Приоритет-2030”.

Список использованных источников:

[1] H.M. Rietveld. J. Appl. Crystallogr. 2(2) (1969) 65–71.
[2] J. Rodrigues-Carvajal. Physica B 192(1-2) (1993) 55–69.

Functional Materials and Applications

Функциональные Материалы и Области их Применения

Enhanced thermoelectric properties in oxide ceramics by doping and compositing

A. M Ashok [1]*, Althaf R [1], N. Davis [1], N. John [1], I. Razanau [2], U. Novikau [2]
[1]*Functional materials group, Dept. of Physics, PSG Institute of Advanced Studies, Avinashi Road, Peelamedu, Coimbatore-641004, Tamilnadu, India, *e-mail: anu@psgias.ac.in*
[2]*Laboratory of Physical-Chemical Technologies, SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus", 19 P.Brovka Str., 220072 Minsk, Belarus*

Oxide materials are being extensively investigated for thermoelectric applications due to their atmospheric and thermal stability, abundance, non toxicity, cost-effectiveness, ease of synthesis etc. However, their commercial utilisation is hampered mainly because of their low Figure of Merit and brittle nature. They are specifically more suitable for mid-high temperature applications since their optimum working temperature is in that range. But, in an oxide thermoelectric module if the *n* and *p* legs are made up of different oxide materials, the difference in their thermal expansion coefficient could significantly reduce the optimum performance at higher temperatures.

In this work, an attempt to improve the thermoelectric performance of oxide materials is done through several strategies. Thermoelectric power factor of bulk ZnO is improved through codoping Al and Sn. Substantial reduction in thermal conductivity is achieved through micro-nanostructuring.

Similarly, thermoelectric performance in $LaCoO_3$ and $ZnFe_2O_4$ is improved through doping alkali metals. In addition, by making composite with multilayer graphene, substantial improvement in electrical conductivity is achieved by reduction in potential barrier at the grain boundaries. Moreover, the presence of multilayer graphene at the grain boundaries did not affect the thermal conductivity of the material significantly. Thus an overall improvement in thermoelectric figure of merit is achieved.

In this work the oxide materials were synthesised by sol-gel method and their thermoelectric properties were studied in the form of bulk sintered ceramics.

Acknowledgments
Authors would like to thank Department of Science and Technology (SERB, International Cooperation Division) for the financial support (Sanction order no: DST/INT/BLR/P-39/2023).

References:
[1] A. M. Ashok [et al.] ACS Applied energy materials (2025) Manuscript ID: ae-2025-002538.
[2] A. M. Ashok [et al.] J. Appl. Phys. 128 (2020) 165110.
[3] N. Davis [et al.] Ceramics International 48 (2022) 24454–24461.
[4] S. Muraleedharan [et al.] J. Alloys and Compounds. 857 (2020) 157507.

Structure and properties of kπ-skyrmions in ferromagnetic films with spatially modulated parameters

R.M. Vakhitov[1], G.F. Ilyasova[1*]
[1] *Ufa University of Science and Technology, Zaki Validi St. 32, 450076 Ufa, Volga Federal District, Republic of Bashkortostan, Russia, *e-mail: galiya.siraeva2014@yandex.ru*

The relevance of magnetic skyrmions studying is explained by the prospects of their application in spintronics devices and artificial neural networks. Magnetic skyrmions were first discovered in chiral magnets, in which, due to the presence of the Dzyaloshinsky-Moriya interaction, they form stable states. In most subsequent studies, magnetic skyrmions were understood as vortex-like inhomogeneities in which the unit magnetization vector ***m*** rotates by 180° with an increase in the radial variable r from 0 to π (π-skyrmions). At the same time, studies appeared in which the possibility of the existence of kπ-skyrmions (k ∈ 1, 2, 3...) was predicted.

Due to the fact that certain difficulties with the stability of magnetic skyrmions arose in chiral magnets [1], a demand arose for alternative methods of their stabilization in non-chiral magnets. One possible way to implement such an approach was proposed in [1, 2], where it was shown that such materials can be ferromagnetic films with spatially modulated uniaxial anisotropy. It was later established that magnetic skyrmions can exist in such materials in a wide range of temperature and magnetic field changes.

In this work, we study the stable states of magnetic kπ-skyrmions formed on columnar defects of the "potential well" type in uniaxial ferromagnetic films [2]. Using numerical analysis of the Euler–Lagrange integro-differential equation describing the distribution of magnetization in the defect region [2], we can find the structure of vortex-like inhomogeneities corresponding to kπ-skyrmions and their parameters: characteristic sizes and their energies. It should be noted that all parameters that have the dimension of length are reduced to the value $\Delta_0 = \sqrt{A_1/K_{u1}}$, where Δ_0 is the characteristic size of the domain boundary in uniaxial ferromagnets. In addition, diagrams of stable states of kπ-skyrmions are constructed. (Fig. 1.)

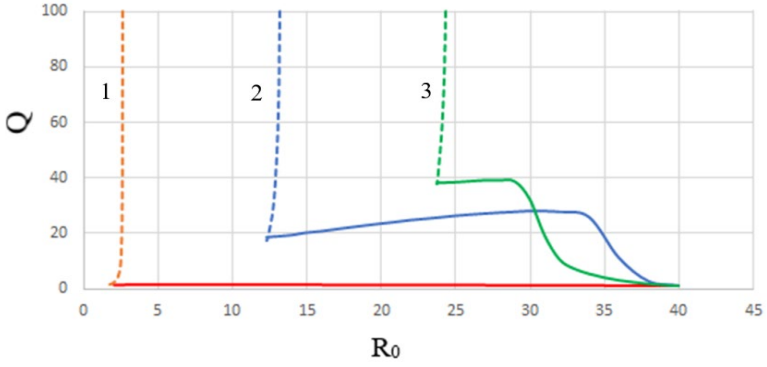


Figure 1. Diagram of the stability region for 1-π-skyrmion (red line), 2-3π-skyrmion (blue line), 3-5π-skyrmion (green line) for the following values of material parameters $Ku_2 = -2Ku_1$, $A_2 = A_1$, $Ms_2 = Ms_1$.

Acknowledgement

The work was carried out within the framework of the state assignment of the Russian Federation for conducting scientific research by laboratories (Theory, modeling and production of thin-film, nanostructured and hybrid structures (FRRR-2024-0001))

References

[1] M.V. Sapozhnikov [et al.] Appl. Phys. Lett., 109 (2016) 042406.
[2] R.M. Vakhitov [et al.] J.Appl. Phys.128 (2020) 153904.

High-porosity carbon from biomass: An efficient sorbent for hydrogen storage

Baglan Bakbolat[1], Fail Sultanov[1,2], Almagul Mentbayeva[1,2], Akmaral Karamergenova[1]*
[1]*Nazarbayev University, Kabanbay batyr ave., 53, C4, Astana, Kazakhstan,*
**e-mail:baglan.bakbolat@nu.edu.kz*
[2]*National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Kabanbay batyr ave., 53, C4,*

Hydrogen storage is a critical challenge for utilizing hydrogen as a clean energy carrier due to its low energy density by volume [1]. Effective storage methods are essential for applications like fuel cell vehicles and renewable energy systems. Common approaches include compressed gas (high-pressure tanks), liquid hydrogen (cryogenic temperatures), and solid-state storage (e.g., metal hydrides, porous materials) [2-3]. Among these, biomass-derived porous carbon is an emerging material, offering high surface area, tunable porosity, and sustainable production from renewable resources like agricultural waste, wood, or algae. Its porous structure provides ample sites for hydrogen adsorption, making it a promising, cost-effective, and environmentally friendly option for solid-state storage [4].

Rice husk, a byproduct of rice cultivation in the southern region of Kazakhstan, was used as biomass. As a result of carbonization followed by thermochemical activation with KOH at various temperatures, porous carbon with a high specific surface area and a significant micropore volume was obtained, which positively affects its hydrogen sorption characteristics. As a result of experimental studies, the following results were obtained: 1) The optimal synthesis parameters for high-porosity carbon with a surface area of up to 3722 m^2/g, pore volume of 2.42 cm^3/g, pore size of 2.6 nm were determined; 2) The sorption capacity of the obtained material was measured: at room and cryo temperatures, and a maximum pressure of 80 bar, the hydrogen capacity reached 0.734 wt.% and 8.930 wt.%, respectively.

Acknowldegement
OPCRP2024013: Advanced Porous Carbon Materials for High-Performance Hydrogen Storage: Biomass-Derived, Theoretically-Informed, and Experimental Approach.

References
[1] P. Hájková [et al.] Coatings 12 (2022) 1813.
[2] A.I. Sultana [et al.] Sustainability 13 (2021) 1947.
[3] F. Ding [et al.] Front. Phys. 6 (2011) 142–150.
[4] Y. Heo [et al.] Journal of Industrial and Engineering Chemistry 31 (2015) 330-334.

$TbCrO_3$ and $YCrO_3$ single crystals growth from optimized fluoride-lead oxide melt

S. Barilo[1], R. Lanovsky[1*], A. Shestak[1], M. Bushinsky[1], O. Mantytskaya[1], and N. Tereshko[1]
*[1]SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus", P. Brovka St. 19, 220072 Minsk, Belarus, *e-mail: rommelfiz1@gmail.com*

Rare-earth orthochromites $RCrO_3$ (*R* = rare-earth element) are promising multiferroic materials, showing exotic magnetism like temperature induced magnetization reversal, magnetization jumps, etc. [1-2] High-quality single crystals are essential to explore these phenomena.

Table 1. Optimized starting composition (in grams) for crystal growth of $RCrO_3$ (R = Tb, Y)

Component	Cr_2O_3	Tb_4O_7	Y_2O_3	B_2O_3	PbF_2	PbO_2
For $TbCrO_3$ (g	12.40	30.49	-	6.0	215.0	1.0
For $YCrO_3$ (g)	14.88	-	22.11	7.2	258.0	1.2

Single crystals of rare-earth orthochromites $TbCrO_3$ and $YCrO_3$ have been successfully grown from fluoride–lead oxide-based high-temperature solutions using a spontaneous crystallization technique with supersaturation through evaporation of solvent components. Approach was mainly based on the method reported by B. Wanklyn [3] with minor modifications. The melt composition was optimized to balance stability, volatility, and compatibility with platinum crucibles. Despite the presence of a $PbCrO_4$ impurity phase near 1000 °C, the solvent system based on PbF□–PbO_2 was found to be favorable due to its high vapor pressure and chemical inertness under growth conditions. The compositions of the melt solutions used for growth are given in Table 1.

The starting materials were mixed in agate mortar and placed in a platinum crucible with a ptatinum lid. In order to reduce the corrosive effect on the furnace, main crucible was additionally shielded by a second corundum crucible with thick corundum lid. Crystals up to several millimeters in size were obtained during isothermal holds at 1240–1280 °C over 10–14 days (Figure 1). The resulting crystals were characterized by powder X-ray diffraction (XRD) and single crystal XRD. $TbCrO_3$ exhibited orthorhombic symmetry (Pbnm), with refined lattice parameters a = 5.290 Å, b = 5.513 Å, and c = 7.571 Å. Oriented XRD patterns from selected crystal faces further confirmed the high structural quality and anisotropy of the samples.



Figure 1. Characteristic appearance of TbCrO3 single crystals grown in spontaneous crystallization mode at a constant temperature of 1240 °C

Acknowledgement
The work was carried out with financial support from the agreement with BRFFR Grant № F25KI-070.

References:
[1] L. H.Yin [et al.] J. Mater. Chem. C. 4 (2016) 11198–11204.
[2] W. Eerenstein [et al.] Nature 442 (2006) 759–765.
[3] B. M. Wanklyn, J. Mater. Sci. 7 (1972) 813–821.

Electrochemical sensing of lipoic acid at Prussian-blue based modified electrode

M. Marin* and C. Lete
Institute of Physical Chemistry "Ilie Murgulescu" of the Romanian Academy, Department of Electrochemistry and Corrosion, 202 Splaiul Independentei, Bucharest, Romania,
**e-mail: mmaria@icf.ro*

Oxidative stress results from the imbalance between reactive oxygen species and antioxidants, being one of the most important factors involved in the onset and progression of various pathologies such as neurological disorders, diabetes and cardiovascular diseases. Lipoic acid (1,2-dithiolane-3-pentanoic acid, **LA**) is a powerful antioxidant with important roles in energy metabolism and with anti-inflammatory properties , therefore its quantification is essential for health monitoring [1-2]. In our work, we have developed an amperometric sensor for rapid determination of **LA** having Prussian blue ($Fe_4[Fe(CN)_6]_3$, **PB**) as redox mediator immobilized on the top of a platinum disk electrode surface by cyclic voltammetry (CV). The control over PB layer thickness was achieved through the number of potential cycles. A stable response of the Pt/PB sensor close to physiological pH (saline phosphate buffer of pH 6.3) was obtained in the presence of 0.05 M tetrabutylammonium p-toluensulfonate (TBT4S) as supporting electrolyte.

The electrocatalytic effect of PB and the beneficial role of TBAT4S are well reflected by the rapid and linear response of the Pt/PB modified electrode within the range from 1 µM to 50 µM LA (LA concentration in human plasma is 3.5 µM). The facile preparation and the good analytical performances in terms of linear and time response prove the suitability of Pt/PB-based electrochemical sensor for clinical analysis.

References

[1] Ö. Gungör [et al.] Measurement 182 (2021) 109752
[2] M. Marin [et al.] J. Electroanal. Chem. 729 (2014) 128

Dielectric spectroscopy of $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ (x = 0 – 1.0) solid solutions

S.N.Mustafaeva[1*] , S.M.Asadov[2] , K.M.Guseinova [3] , S.S.Abdinbekov[1]
[1]*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, G. Javid Ave., 131, Baku, AZ 1143 Azerbaijan, *e-mail: solmust@gmail.com*
[2]*Research Institute of Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Azadlig Ave., 20, Baku, AZ 1010 Azerbaijan*
[3]*Sumqayit State University, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, Badalbeyli ave.,43, Sumqayit, AZ 5008 Azerbaijan*

The purpose of this work is to study the influence of the composition of the obtained layer solid solutions $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ (x = 0 – 1.0) on their dielectric characteristics and to establish the mechanism of charge transfer in them in alternating electric fields of the radio frequency range.

Samples $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ were synthesized from elements taken in stoichiometric ratios by directly alloying them in quartz ampoules evacuated to 10^{-3} Pa. High-quality single crystals were obtained from synthesized $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ by the Bridgman method.

The dielectric coefficients of the $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ samples were measured by the resonance method. The frequency range of the alternating electric field was 5×10^4–3.5×10^7 Hz. Samples of $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ for electrical measurements were made in the form of flat capacitors. Silver paste was used as electrodes. Dielectric properties were measured in the direction perpendicular to the layers of $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ crystals. All dielectric measurements were carried out at 298 K.

The frequency dispersion of the real and imaginary components of the complex dielectric constant and conductivity (σ_{ac}) of samples $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ in the frequency range f = 5×10^4–3.5×10^7 Hz was revealed. It has been established that, along with through conduction losses, relaxation losses also appear in $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$. An increase in x in $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ crystals led to a significant decrease in the real and imaginary components of the complex dielectric constant and dielectric loss tangent. We also studied the frequency-dependent *ac*- conductivity (σ_{ac}) of $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ solid solutions. The value of σ_{ac} for $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ solid solutions decreased by approximately two orders of magnitude as x increased from 0 to 1.0. In all the solid solutions studied, the frequency dependence $\sigma_{ac}(f)$ exhibited power-law regions $\sigma_{ac} \sim f^n$. In $TlGaSe_2$, initially there was a dependence $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, which then became flatter. In $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ crystals at $x > 0$, the sublinear sections $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ were replaced by superlinear sections ($n > 1$).

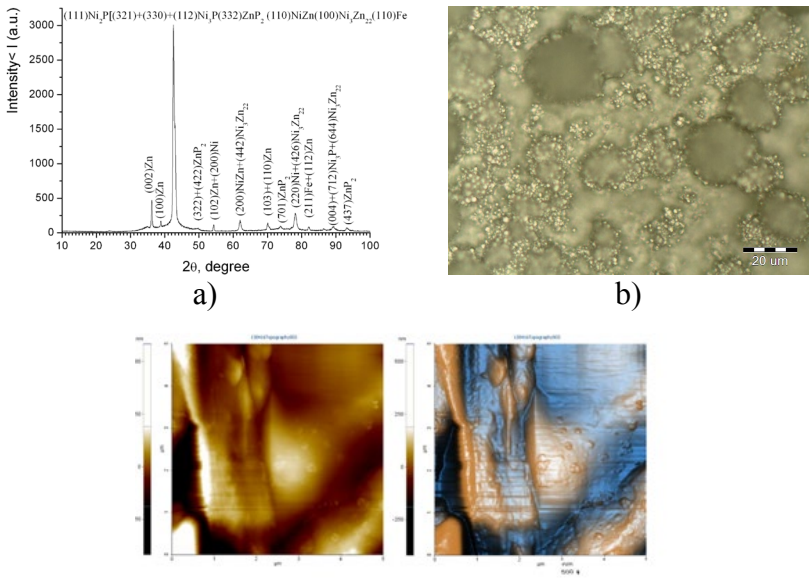
The sublinear (power-law) frequency dependence of conductivity $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ indicates the hopping nature of transport. In this case, such a dependence is usually associated with jumps of charge carriers across localized states with the participation of phonons. This is the so-called relaxation hopping conduction.The real part of conductivity at relatively low frequencies is determined by the phonon mechanism, and with increasing frequency, phononless hopping conductivity becomes predominant. This conductivity is characterized by a superlinear dependence $\sigma_{ac} \sim f^n$, where $n > 1$. In view of the above, the law we obtained $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ indicates a hopping mechanism of charge transfer across states localized in the vicinity of the Fermi level. The parameters of localized states in $(TlGaSe_2)_{1-x}(TlGaS_2)_x$ samples have been calculated: the density of states near the Fermi level $N_F = 2.2 \cdot 10^{18}$–$1.7 \cdot 10^{19}$ $eV^{-1}cm^{-3}$ and their energy spread ΔE = 0.005–0.15 eV, average time $\tau = 9.9 \cdot 10^{-8}$–$1.2 \cdot 10^{-6}$ s and distance R = 81–240 Å of jumps.An increase in x from 0 to 1.0 led to a decrease in the average values of the time and length of jumps, as well as to an increase in the energy spread of states localized near the Fermi level and the concentration of deep traps responsible for the transfer of charge carriers in alternating electric fields.

Microstructural characterization of ZnNiP duplex coatings for anticorrosive protection of carbon steel

A.M.Popescu[1,2]*, M.Burada[2], M.Anastasescu[1],O.Minchukova[3], V.Constantin[1]
*[1] "Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry of the Romanian Academy, Spl. Independentei 202, Bucharest, Romania, *e-mail: virgilconstantin@yahoo.com*
[2]National Institute of Research and Development for Non-Ferous and Rare-Metals, New Materials and Technologies Laboratory, 178-184 Biruintei Blvd, Pantelimon, Jud.Ilfov, Romania
[3] Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus, 19 P.Brovka St., 220072 Minsk, Belarus

Zn-Ni-P alloys have superior corrosion resistance and barrier properties compared to conventional Zn, Zn-Ni and Cd coatings. Depending on the Zn-Ni content ratio, the coatings possess barrier or sacrificial properties. In this study a double layer Zn-Ni-P coating was deposited on mild steel substrate. In this case, the sample under study was obtained by successively depositing two Zn-Ni-P layers, the first electroless and the second electrochemical from an alkaline sulfate bath. The current density was 67 mA·cm^{-2}, time 60 min, pH 1.8, temperature of the electrolyte 25-30 °C, anode-cathode distance 0.8 cm and stitting 180-200 rpm. The thickness of each layer was 8-10 μm.

The structure and morphology and surface properties of the double layer were characterized by XRD, SEM/EDS and AFM measurements. On the XRD patternt is observed that sample has crystalline structures, due to the presence of very sharp peaks, especially in the 40-500 range. The presence of compounds such as NiZn, NiP and especially Ni_3Zn_{22} was detected. Micrographic analysis using a high-precision metallographic microscope (Japan) conducted to images having large, well-defined globular structures, supported by SEM data. Frim EDS spectrum the composition of the Zn-Ni-P layer was calculated:4.46% Zn, 84.79% Ni and 10.75% P. The topography of the sample surface determined by AFM is characterized by the presence of "hill-valley" formations - generally typical for surfaces formed by (electrochemical) coatings, and having a level difference in the z-axis (R_{pv} parameter) of 1000 nm.



a) b)

c)

Figure 1. XRD pattern (a); micrographyc image of the sample(b); AFM image (c)

Ceramic magnetic materials with a whitlockite structure synthesized in a solar furnace

J.Z. Shermatov[1], M.S. Paizullakhanov[1], O.T. Rajamatov[1]*, M.H. Aripova[2], and A.M. Zhivul'ko[3]
[1]*Institute of Materials Science of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Cangikhisarak, Uzbekistan, *e-mail: shermatov-82@bk.ru*
[2]*Tashkent Institute of Chemical Technology, 32 Navoi St., 100011 Tashkent, Uzbekistan*
[3]*Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 19 P.Brovka St., 220072 Minsk, Belarus*

The creation of new materials based on calcium phosphate ($Ca_3(PO_4)_2$) has undergone major changes in recent decades due to technical progress and the development of computational methods.

Ceramic magnetic materials have their own physic-chemical properties and synthesis methods. Materials of this type can be synthesized in the solar furnace and analyzed by appropriate methods to study their properties.

Raw materials $Ca_3(PO_4)_2$ and Fe_2O_3 were selected for the synthesis process of the material in the solar furnace. The phase composition of the synthesized ceramic magnetic materials was studied using X-ray phase analysis. As a result of the synthesis, it was found that the following phases were formed: magnetite-Fe_3O_4, calcium ferrite-$Ca_4Fe_9O_{17}$ and vitlocite-$Ca_{28.2}Fe_{3.2}(PO_4)_{21}O_{0.5}$. Whitlockite is considered the progenitor of the various cation-containing families of calcium phosphate minerals. Whitlockite structural compounds are very promising because they have various functional properties: fluorescent, ferroelectric [1], nonlinear optical, bactericidal, and implantable.

The purpose of this work is to study the effect of the whitlockite structure on the properties of the ceramic magnetic material synthesized in the Solar furnace [2].

Methods such as special magnetization method, hysteresis loop parameter measurement method, and electrical resistance measurement were used to study the properties of ceramic magnetic materials synthesized in different proportions.

The study of the electromagnetic properties of the samples of the synthesized ceramic magnetic material showed that depending on the composition ratio, an increase or decrease in the Curie point and resistance, and a radical change in the parameters of the hysteresis loop were found. Such structural properties ensure a record level of performance of ceramics for various functional purposes.

Solar technology can become an alternative technology for obtaining ceramic magnetic materials. The economic advantages of such technology have been demonstrated.

References

[1] V.V. Titkov [et al.] J. of Sol. St. Chem. 279 (2019) 120966.
[2]. M.S. Paizullakhanov [et al.] High Temperature Material Processes: 25(2) (2021) 17-29.

Properties of ferrite ceramic materials synthesized in a solar furnace

J.Z. Shermatov[1], M.S. Paizullakhanov[1], O.T. Rajamatov[1*], M.H. Aripova[2], and A.M. Zhivul'ko[3]
[1]*Institute of Materials Science of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Cangikhisarak, Uzbekistan, *e-mail: shermatov-82@bk.ru*
[2]*Tashkent Institute of Chemical Technology, 32 Navoi St., 100011 Tashkent, Uzbekistan*
[3]*Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 19 P.Brovka St., 220072 Minsk, Belarus*

Creation of new materials based on calcium phosphate and iron oxide ($Ca_3(PO_4)_2$, Fe_2O_3) has undergone serious changes in recent decades due to technical progress and development of computational methods.

In the present work, Solar technology was applied to produce polycrystalline ferrite ceramic material. The magnetic and dielectric properties of ferrite and its microstructure were investigated.

Solar technology, unlike traditional technologies, is characterized by high heating rate, allows to obtain fine homogeneous material of high chemical purity. At the same time, ferrite materials simultaneously undergo the process of ferritization. Such features determine the possibility of creating advanced ceramics, composites of intermetallic compositions, functional-gradient materials[1].

The stoichiometric amounts of raw materials, calculated in mole percentages, were first mixed and wet milled in a ball mill with corundum balls for 8 hours. Based on the finished mixture, specimen rods of 5 mm diameter and 140 mm length were molded (50kN) and placed on the focal plane of a solar furnace and melted under concentrated solar radiation at a flux density of 200W/cm^2. The melts were cooled by draining into water with a cooling rate on the order of 1000 deg/s. Then, the material was wet milled to the size of 1-10 μm, mixed with PVA, molded in MS100 machine at a pressure of 50 kN, and ring shaped samples were obtained. The temperature of the samples during processing was controlled by a platinum-platinum-rhodium thermocouple. In order to eliminate the electron beam interference in the thermocouple, a third platinum electrode was used, one end of which was welded to the working junction and the opposite end was grounded. During processing, a different batch of samples were heated to 1050°C, 1090°C, 1230°C, 1270°C, 1310°C, respectively, and kept at the desired temperature for 60 minutes. As a result, we got 5 ring samples sintered at different temperature regimes[2].

Such structural features provide record high performance properties of ceramics for various functional purposes.

The conducted studies confirmed the efficiency of solar ferrite technology for operation in strong fields. Elemental analysis of all obtained samples showed the absence of foreign impurities.

Studies of electromagnetic characteristics of sintered ferrite samples showed that the best results were obtained by sintering at 1310 °C for 1 hour.

Solar technology of ferrite ceramics can become an alternative technology for obtaining magnetically soft ferrite ceramics in relation to classical ceramic ceramics. The economic advantages of such technology are demonstrated.

References

[1] S.S. Gorelik [et al.] Formation of Microstructure and Properties of Ferrites in the Process of Recrystallization. Metallurgy (1984) 111.
[2] I.G. Atabaev [et al.] Journal of Applied Solar Energy 51 (2015) 202-205.

Efficiency of $CoFe_2O_4$ catalyst at repeated use

J.Z. Shermatov[1], M.S. Paizullakhanov[1], O.T. Rajamatov[1]*, M.A.Karimov[2], V.G. Minkina[3], and A.M. Zhivul'ko[4]
[1]*Institute of Materials Science of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Cangikhisarak, Uzbekistan, *e-mail: shermatov-82@bk.ru*
[2]*Yangiyer branch of the Tashkent Institute of Chemical Technology, Uzbekistan*
[3]*A.V. Lykov Institute of Heat and Mass Transfer of the National Academy of Sciences of Belarus, 15 P. Brovka St., 220072 Minsk, Belarus*
[4]*Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 19 P.Brovka St., 220072 Minsk, Belarus*

Today, the demand for fuel and electricity in our country is increasing and this requires efficient and targeted utilization of natural resources. Therefore, the widespread use of hydrogen and renewable energy sources for consumption and production by the public is being promoted. Hydrogen is considered as the fuel of the future as it is a clean energy carrier and plays an important role in the rapidly developing technology of various fuel cells.

In this work, the effect of composition on catalyst performance was investigated in a reusable, synthesized $CoO+Fe_2O_3$ catalyst for hydrogen production with a flux density of 200 W/cm^2 in a solar oven. Solar technologies, unlike traditional ones, are characterized by high heating rate, allow to obtain finely dispersed homogeneous material of high chemical purity.

The stoichiometric amounts of raw materials, calculated in mole percentages, were first mixed and wet milled in a ball mill with corundum balls for 8 hours. Based on the finished mixture, specimen rods of 5 mm diameter and 140 mm length were molded (50kN) and placed on the focal plane of a solar furnace and melted under concentrated solar radiation at a flux density of 200W/cm^2. The melts were cooled by draining into water with a cooling rate on the order of 1000 deg/s. Then, the material was wet milled to a size of 1-10 μm[1].

On the obtained samples of composition of $CoO+Fe_2O_3$, the efficiency of the catalyst was conducted on its repeated use.

Apparently, as a result of washing the catalyst after the first experiment, some unstable components were removed from its surface, which changed the sorption properties of the surface. In the fresh catalyst, the main group of particles has sizes between 5 and 10 μm (~38%), particles with sizes between 1 and 2 μm account for 0.84%, and particles with sizes between 20 and 50 μm ~13.17% (Figure 1a). Particles with larger size are absent. After washing the fresh catalyst with water, the particle size distribution did not change much (Figure 1b. In the catalyst after 3 cycles, particles with sizes between 5 and 10 account for 17.93% and large particles with sizes between 50 and 100 μm account for 2.37% (Figure 1c). In the catalyst after 6 cycles, particles with sizes between 5 and 10 are 8.92% and large particles with sizes between 50 and 100 μm are 5.44% (Figure 1d).

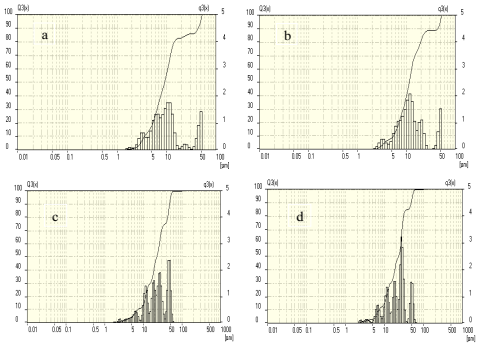


Figure 1. Effect of water washing and repeated use of the catalyst on its particle size distribution: fresh (a), after washing (b), after 3 (c), after 6 (d) cycles

This evolution of the distribution function can be explained by the loss (washout) of particles of certain sizes. Other mechanisms for the loss of catalyst activity are also possible, such as the formation of insoluble metaborate precipitate on the catalyst.

References

[1] I.G. Atabaev [et al.] Journal of Applied Solar Energy 51 (2015) 202-205.

Composite metal-graphene structures

U. Novikau[1]*, T. Zubar[1], I. Razanau[1], V. Kazachenko[2], K. Sergeev[1], H. Daletskaya[1], and S. Filipovich[1]
[1]*SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus", P. Brovki Str., 19, Minsk, Belarus, phaust@list.ru**
[2]*State Enterprise "Science and Technology Park of BNTU "Polytechnic", Y. Kolasa Str., 24, Minsk, Belarus*

Metal-graphene composites, such as copper-graphene or nickel-graphene, are advanced functional materials that combine high electrical and thermal or mechanical properties of the metal with the excellent lubricity, thermal stability and conductivity, and light weight of graphene. The incorporation of graphene into copper matrices presents a promising opportunity to enhance mechanical properties — such as strength, hardness, and wear resistance — while preserving high electrical and thermal conductivity [1, 2]. In electrical engineering, copper-graphene composites can serve as high-efficiency contact materials for sliding electrical contacts, brushes, and current collectors. In thermal management systems, the possibility of tailoring their thermal conductivity and coefficient of thermal expansion (CTE) make them promising for heat sinks, thermal interface materials. Additionally, their self-lubricating properties are advantageous for conditions implying possible abrasive wear in the electrical or thermal contact area. Layered nickel-graphene composites are promising for bipolar fuel cell electrode production.

The current report describes a range of copper-graphene and nickel-graphene composites prepared by electrochemical deposition. Structure and functional properties of the composites are studied using microscopy, 4-probe electrical conductivity measurement, mechanical indentation, electrochemical testing. It is shown that the addition of graphene-like carbon allows to increase the conductivity of electrochemically deposited copper foils from 76% to 95% of International Annealed Copper Standard (IACS), while also improving the Young's modulus by 23%. Opportunities and challenges of application of copper-graphene and nickel-graphene composites are discussed.

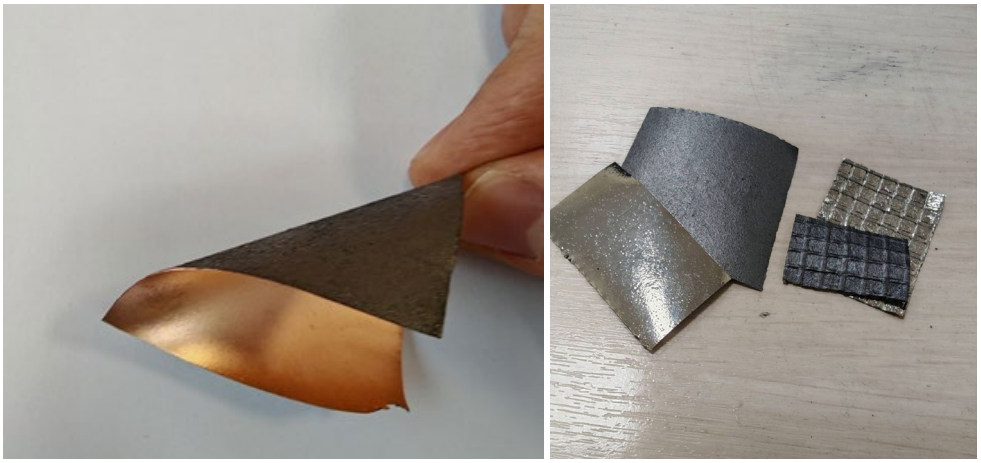


Figure 1. Examples of a bilayer copper/graphene-like carbon and nickel-graphene-like carbon electrodes prepared by electrochemical deposition

References

[1] P. Hidalgo-Manrique [et al.] J. Mater. Sci. 54 (2019) 12236–12289.
[2] S. Ali [et al.] Composites Part A. 144 (2021) 106357.

Co-addition of Nanomaterials in Cuprate High-Temperature Superconductors: Enhanced Performance Implications

Yassine Slimani*
Institute for Research and Medical Consultations (IRMC), Imam Abdulrahman Bin Faisal University, P.O. Box 1982, 31441 Dammam, Saudi Arabia,
**e-mail: yaslimani@iau.edu.sa*

This study investigates the synergistic effect of co-adding $BaTiO_3$ and WO_3 nanomaterials, synthesized via solid-state reaction, to bulk $YBa_2Cu_3O_y$ (YBCO) high-temperature superconductor. XRD analysis confirmed the orthorhombic structure and revealed a reduction in orthorhombic distortion at higher nanomaterials' concentrations, accompanied by alterations in the critical transition temperature (T_{co}). Notably, the self-field critical current density (J_c) exhibited a significant enhancement for lower concentration of co-added nanomaterials, representing a 45-fold increase in comparison to non-doped YBCO across the applied magnetic field range. This enhancement is attributed to the creation of effective artificial pinning centers in the form of crystal defects induced by the co-added nanomaterials. Furthermore, the flux-pinning force density was also significantly improved, demonstrating the potential of this co-addition strategy for boosting the performance of YBCO superconductors.

Temperature dependence of acoustic properties in YAG crystals

F.R. Akhmedzhanov, I.Sh. Toshpulatov*, and V.N. Avdievich
*Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, 33 Durmon Yuli str., 100125 Tashkent, Uzbekistan, *e-mail: ibrat.toshpolatov96@gmail.com*

The study of temperature dependence of sound attenuation in crystals is a powerful tool for understanding the mechanism of interaction of sound wave with crystal lattice [1]. Measuring of V and α, gruneisen parameter is determined [2].

$$\gamma^2 = \frac{\alpha_L \rho V_L^2 V_D^2}{\lambda \omega^2} \quad (1)$$

α_L – acoustic attenuation – dB/cm, V_L – longitudinal acoustic velocity – km/s, V_D – Debye acoustic velocity – km/s, λ – thermal conductivity – Wt/m.K, ω – angular frequency – rad/s.

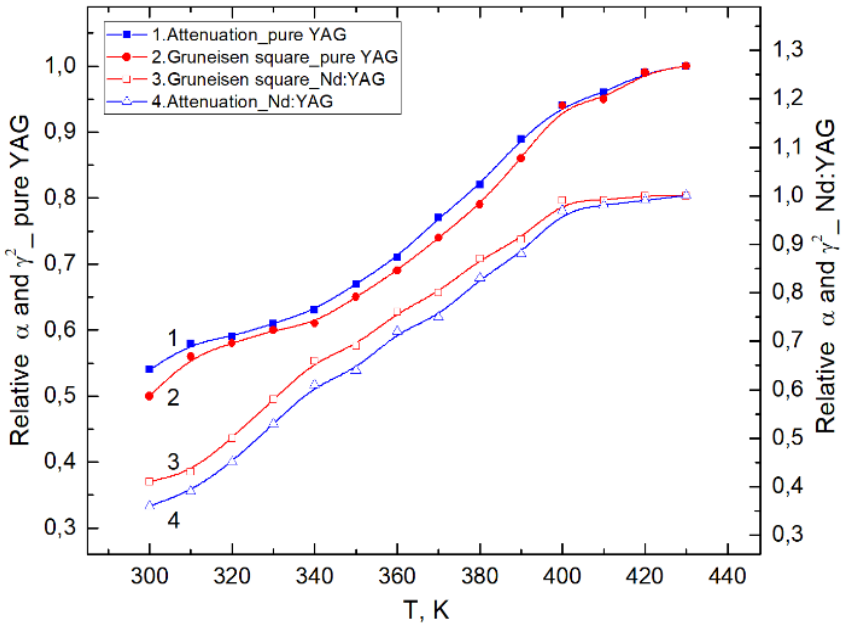


Figure 1. Effective elastic constant of pure YAG (2) and Nd-doped YAG (1)
Thermal conductivity of Nd-doped YAG (3) and pure YAG (4) in the plane (001)

Acoustic attenuation of Nd-doped YAG decreased by around 42% compared to pure YAG at room temperature (Fig. 1). Acoustic attenuation and Gruneisen parameter square for pure YAG went up almost at the same rate, however difference between growth rates of these quantities for Nd-doped YAG was a little bit higher.

References

[1] R. K. Singh [et al.] Proc. 20th International Congress on Acoustics. ICA (2010).
[2] F. R. Akhmedzhanov [et al.] Applied Physics Letters 124 (2024) 152204.

Properties of transparent ZnO:Al layers obtained by magnetron ion sputtering

Sh. Utamuradova, S. Muzafarova, and K. Fayzullaev*
*Institute of Semiconductor Physics and Microelectronics at the National University of Uzbekistan, 20 Yangi Olmazor St., 100057 Tashkent,Uzbekistan,*e-mail: samusu@rambler.ru*

One of the most promising alternative materials for transparent electrodes is commercially attractive ZnO, when doped with which acceptable for practical application can be achieved and shows that an extensive way to improve the characteristics of transparent conductive films based on ZnO, based on optimization of the composition and level of doping impurities, has practically been completed [1]. The main characteristics of transparent ZnO-based electrodes obtained by magnetron sputtering have remained virtually unchanged over the past twenty years [2]. Further improvement of the characteristics of polycrystalline ZnO-based films can be achieved by improving their quality – crystallinity and microstructure [3].

The ZnO films obtained by magnetron ion sputtering have a wurtzite surface structure, which means that the surface morphology of the ZnO film changes significantly with increasing thickness d of the ZnO films.

It was found that an increase in the dopant content to 1-2% leads to an increase in the charge carrier concentration. A further increase in the dopant content above 1-2% did not lead to an increase in the charge carrier concentration, which the authors of the work explained by reaching the solubility threshold of the dopant Al in the ZnO lattice. Figure 6 shows the dependences of the electron mobility and resistance on the concentration of the dopant Al. At the initial stage, an increase in the concentration of the dopant, with the exception of the aluminum impurity, was accompanied by an increase in the electron mobility, while the resistance decreased by almost two orders of magnitude. The different dynamics of the dependence of the mobility on the dopant concentration can be explained by the structural features of the ZnO: Al films. The increase in the mobility of charge carriers μ at the initial stage with an increase in the content of the dopant Al is associated with an increase in the crystallite sizes of the ZAO film. At, the concentration of Al was accompanied by a decrease in the crystallite sizes, which led to an increase in the impurity concentration Ns and a decrease in the mobility μ of charge carriers. A decrease in the crystallite sizes with an increase in the concentration of the Al impurity in the composition of the ZAO oxide and an increase in the crystallite sizes are explained by the difference in the ionic radii of Zn atoms and the dopant Al, where the value of the ionic radii decreases by an order of magnitude. Analysis of the ratio of the values of reflections (002) and (004) made it possible to qualitatively assess the contribution of the factors of grain size L and microdistortions (local disorder lattice) Δd(00l)/d(00l) in the broadening of reflections in the synthesized AZO layers.

In layers with a higher doping level, the maximum grain size was observed in the temperature range of 200 ºC ÷ 400 ºC, and at Tп = 600 ºC, a significant decrease in the grain size occurred.

Thus, comparison of the obtained results allows us to conclude that the electrical characteristics of AZO layers strongly depend on their structure. An increase in the number of grain boundaries leads to the fact that the dominant mechanism for limiting the mobility of charge carriers in the layers becomes scattering at grain boundaries.

Acknowledgement. This work was carried out within the framework of the research project “Investigation of photovoltaic characteristics and radiation effects in flexible solar cells based on chalcogenide thin films” No. FL-8824063350 (Uzbekistan-Belarus).

References.

[1] Ü.Özgür [et al.] J. Appl. Phys. 98 (2005) 041301.
[2] K. Ellmer. Springer Berlin Heidelberg (2008) 446.
[3] Y.Chen. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 423 (2018) 012170.

Synthesis and Hardness Characterization of New Superhard Binary Material -Tungsten Pentaboride WB5

A.S. Anokhin[1], M.S. Chuvikina[1]*, E.A. Ermakova[1], S.S. Strelnikova[1], I.V. Bondar[2], A.S. Shipkov[2], V.P. Filonenko[2], V.V. Tkachenko[3], O.V. Ignatenko[3]
[1]*Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science RAS, 49 Leninsky Ave., 119334 Moscow, Russia, *e-mail: aanokhin@imet.ac.ru*
[2]*Vereshchagin Institute of High Pressure Physics RAS, 14 Kaluzhskoe shosse, 108840 Troitsk, Moscow, Russia*
[3]*Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 19 P.Brovka Str., 220072 Belarus, Minsk*

Oil and gas industrial companies set strict requirements for material working under extreme conditions, that is why there has been increasing interest in new ultrahard and superhard materials based on transition metal borides. Recent theoretical studies have systematically investigated the tungsten-boron system and it was predicted a new stable ultra- hard tungsten pentaboride (WB5) using USPEX global crystal structure search method. The aim of this study is to check hypothesis of WB5 solid state synthesis in vacuum oven and to measure hardness and elastic modulus on the real samples.

Tungsten powder with the particle size in the range of 1−4 microns and boron powder with the particle size in the range of 1−5 microns were used as mixture of initial components for the synthesis of tungsten pentaboride. The isopropanol alcoholic solution (IPA) with 3 % wt. of polyvinylpyrrolidone (PVP) was used as the binding agent to make samples with 20 mm in diameter and 5 mm in height by means of dry pressing on 25 tons hydraulic press. The specific pressure was 170 MPa during pressing. A continuous linear shrinkage study was carried out with DIL 402 C7G dilatometer NETZSCH Geraetebau GmbH in the temperature range from 20°C to 1500°C in an argon atmosphere at a heating rate of 5°C/min to determine the sintered state interval. Samples were synthesized in the temperature range from 1400°C to 1700°C with heating rate 5°C/min and annealing time from 2 to 5 hours in the vacuum oven. Hardness and elastic modulus were measured by instrumental indentation in accordance with GOST R 8.748-2011(ISO 14577−1:2002). Hardness measurements of WB5 grains were conducted on a NanoScan−4D nanohardness tester. An area with WB5 grains was selected using an optical microscope to do indentation tests on the selected site. All devices were calibrated on fused quartz with hardness 9,3 GPa and elastic modulus 72,7 GPa.

Continuous lineage shrinkage curve indicates peak at 1045°C where the linear dimensions of the sample change rapidly by up to 11% of the initial value that helps to correct synthesis parameters to prevent cracking of the tungsten pentaboride samples. According to instrumental indentation of the synthesized WB5 samples the Vickers hardness was 239,4 HV. It is extremely low hardness value due to 50% open porosity of the tested tungsten pentaboride samples. Nanohardness meter indicates different values of the synthesized WB5 samples with elastic modulus 502,70 ± 63,32 GPa and hardness 30,24 ± 3.58 GPa that are related with the values of separated WB5 grains.

Thus, solid state synthesis is possible for the binary material tungsten pentaboride WB5, and its measured grains hardness is 30,24 GPa with elastic modules 502,70 GPa.

The impact of nanostructured powder modifiers on the welded joint structure

Yu. A. Lupitskaya*, S. I. Saunina, A. V. Butakov, A. D. Dugin
Chelyabinsk State University, 454001, Chelyabinsk, Russia,
lupitskaya@gmail.com

At present, design and construction works related to the erection of hazardous production facilities, such as main oil and gas pipelines, oil and gas storage vessels, etc., are being actively carried out. Materials for the construction of such facilities are low-alloy and low-carbon steels. The majority of welded joints of steel building structures are made by automated submerged-arc welding, which is currently one of the most productive industrial and environmentally friendly technologies used to obtain permanent joints of parts made of carbon and alloy steels, as well as non-ferrous metals.

In various methods of fusion welding, the crystalline structure of the weld metal, associated with the conditions of transition of the weld pool from liquid to solid state, is one of the factors determining the quality and properties of the welded joint area.

In addition to the natural centres of spontaneous crystallisation of the molten metal in the weld pool, there are centres of non-self-spontaneous crystallisation in the form of grains of new metal at the fusion boundary. This phenomenon is used in practice for modification – the refinement of crystallites during solidification.

The refinement of structural components of the welded metal can be achieved by introducing nanodispersed metallic and non-metallic powders into the weld pool, the properties of which differ significantly from those of macro- and micro-powders of the same chemical composition. The grain size decreases, which leads to changes in the mechanical properties of the welded joint [1].

The analysis of the conducted researches has shown that as a result of introduction of nanostructured powders (modifiers) into the weld pool at arc welding with a fusion electrode there is modification of the weld metal, improvement of impact toughness and hardness of the weld metal, grain refinement in the structure of the heat affected zone, improvement of arc properties and formation of the weld.

The practical application of the proposed method makes it possible to control the number of crystallization centers by adjusting the concentration of nanostructured inclusions (modifiers) in the welding flux. This results in a reduction in the weld metal grain size and the formation of a homogeneous microstructure.

Acknowledgement (the work was financially supported by a grant from the Russian Foundation for Advanced Research Projects, Chelyabinsk State University, 2025)

References

[1] G. Sokolov [et al.] *Svarka i diagnostika* [Welding and Diagnostics, in Russian] 3 (2011) 36-38

Катодолюминесцентные свойства $La_xGd_{13-x}EuGe_2B_6O_{34}$

В. А. Кравец[1] и В. А. Крутько[2]*
[1]*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Политехническая ул., 26, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия*
[2]*ИОНХ им. Н.С.Курнакова РАН, Ленинский пр., 31, 119991 г. Москва, Россия,*
**e-mail: vkrutko@rambler.ru*

Германатобораты (ГБ) $La_xGd_{14-x}Ge_2B_6O_{34}$, химически- и термостойкие соединения принадлежат семейству ГБ $Ln_{14}Ge_2B_6O_{34}$, которые первоначально были получены для ограниченного ряда РЗ элементов (Pr,Nd,Sm,Eu,Gd), кристаллизующихся в тригональной сингонии (пр. гр. $P3_1$). Введение лантана в состав $Ln_{14}Ge_2B_6O_{34}$ стабилизирует структуру соединений данного класса и меняет характер их плавления от инконгруэнтного у ГБ Ln_{14} на конгруэнтный у лантан содержащих ГБ. ГБ $Ln_{14}=Gd_{14}$ и La_xGd_{14-x} - подходящие матрицы для создания люминофоров различного диапазона – от ИК ($Ln_{14}=Gd_{14}:Nd^{3+}$) до видимого (ап-конверсионные люминофоры $Ln_{14}=La_xGd_{14-x}$: Yb,Er). Допированные ионами Eu^{3+}, они являются красными люминофорами, как в кристаллическом, так и в стеклообразном состоянии. Данный класс оксидных РЗ соединений в качестве потенциального сцинтилляционного материала или катодолюминофора не изучался.

В работе исследованы катодолюминесцентные свойства ГБ $Ln_{14}=La_xGd_{13-x}Eu$, где x=1; 2; 4. Получены спектры катодолюминесценции (CL) синтезированных ГБ и исследованы: морфология образцов (SEM), времена затухания/разгорания CL при импульсной накачке, CL-микроскопия их поверхности, динамики CL и поглощенного тока от времени облучения электронным пучком, а также электронно - дырочные ловушечные состояния ГБ $Ln_{14}=La_xGd_{13-x}Eu$. Характер влияния ловушек на катодолюминесцентные свойства определяли, совмещая метод катодолюминесценции и динамики поглощенного тока на электронно-лучевом приборе.

Во всех образцах были обнаружены электронно-дырочные ловушечные состояния, которые значительно влияют на времена затухания/разгорания CL Eu^{3+} ($^5D_0$-$^7F_2$) при импульсной накачке. По кинетическим характеристикам CL Eu^{3+} ($^5D_0$-$^7F_2$), отмечено, что при увеличении содержания La в составе ГБ $La_xGd_{13-x}Eu$, ионов Eu^{3+} рядом с центрами безызлучательной рекомбинации становится больше, что объясняет падение интенсивности CL.

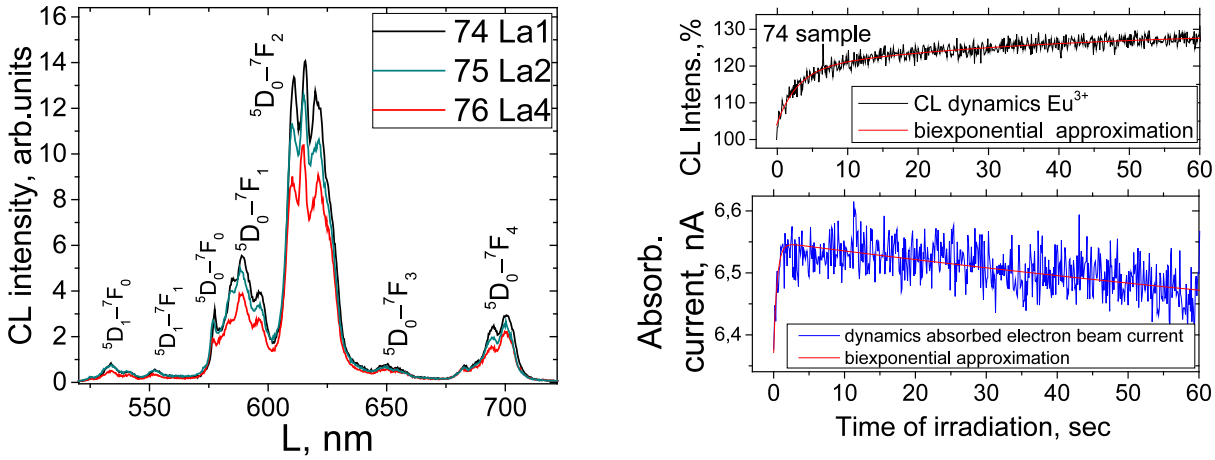


Рисунок 1. CL образцов ГБ (слева) Пример динамики CL и поглощенного тока (справа)

Магнитоструктурные фазовые переходы в некоторых пниктидах на основе марганца

Н.Ю. Панкратов[1], Т.М. Ткаченко[2], В.И. Вальков[3], А.В. Головчан[3], У.Т. Бердиев[4], А.В.Гурбанович[5], Д.В. Якимчук[5], и В.И. Митюк[5]*

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, ул. Колмогорова, 1, стр. 2, 119234 г. Москва, Россия*
[2]*Белорусский государственный аграрный технический университет, пр. Независимости, 99, 220012 г. Минск, Беларусь*
[3]*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, ул. Р. Люксембург, 72, 283050 г. Донецк, Россия*
[4]*Ташкентский государственный транспортный университет, ул. Адылходжаева, 1, 100167 г. Ташкент,Узбекистан*
[5]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: mitsiuk@physics.by*

В последнее десятилетие большое внимание уделяется изучению магнитоструктурных фазовых переходов, которые сопровождаются изменением плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми [1-3]. В момент такого перехода происходит анизотропная деформация кристаллической решетки и выделение теплоты. В связи с этим исследование структурных и магнитных характеристик и их зависимости от температуры, давления, легирования образца, определение теплоты магнитоструктурного фазового перехода, являются важным для понимания механизма таких фазовых переходов. Одним из модельных объектов для исследований вышеперечисленных зависимостей является арсенид марганца и сплавы на его основе. Это связано с наличием в них целой гаммы магнитоструктурных фазовых превращений как первого, так и второго рода. Ранее, в связи с возможностью существования магнитокалорического эффекта нами исследованы пниктиды марганца, земещенные цинком [4].

Целью настоящей работы являлось исследование влияния малых замещений в подрешетке мышьяка на магнитоструктурные фазовые переходы в соединений на основе MnAs. В качестве легирующего элемента был выбран фосфор. Это обусловлено подобием внешних электронных оболочек атомов фосфора и мышьяка и, следовательно, предполагает хорошую взаимозаменяемость в твердом растворе, но размер отличающийся атома фосфора позволяет модифицировать переход. Нами определены структурные параметры и магнитные свойства этих соединений в сильных магнитных полях до 14 Тл в области фазового перехода.

Благодарность (финансирование)

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ–МИРРУ в рамках научного проекта №Т25УЗБ-053 и FL-8824063324-R3, соответственно.

Список использованных источников

[1] S. Gama [и др.] Phys.Rev.L 93 (2004) 237202.
[2] L. Tocado [и др.] J.Appl.Phys. 105 (2009) 093918.
[3] A. Magnus [и др.] Eur. Phys. J. B 68 (2009) 67.
[4] V. Mitsiuk [и др.] Physics of Metals and Metallography 125 (2024) 1832.

Термоэлектрические характеристики квантовых точек InGaAs/GaAs

М. В. Дорохин[1,2*], Ю. М. Кузнецов[1,2], Н. В. Байдусь[1], П.Б. Дёмина[1], А. В. Здоровейщев[2]
*[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, д. 23, к. 3, 603022, г. Нижний Новгород, Россия, *e-mail: dorokhin@phys.unn.ru.*
[2]Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачесвкого, пр. Гагарина, д. 23, к. 3, 603022, г. Нижний Новгород, Россия.

Термоэлектрики – материалы, преобразующие тепловую энергию в электрическую. Эффективность преобразования энергии описывается термоэлектрической добротностью $ZT = \alpha^2 \cdot T/\rho \cdot \lambda$, где α – коэффициент Зеебека, T – средняя температура горячей и холодной граней, ρ – удельное сопротивление, λ – теплопроводность. Основная трудность достижения высоких $ZT \geq 1{,}0$ заключается в невозможности независимого управления коэффициентами α, ρ и λ в объёмных твёрдых телах. Таким образом появился большой практический и фундаментальный интерес в исследовании термоэлектрического эффекта тонких плёнок, где толщина слоя является дополнительной степенью свободы в управлении параметрами ZT.

Практический интерес заключается в решении широкого спектра задач питания маломощных устройств, в котором объёмные термоэлектрики малоэффективны. Последние годы появляется всё больше работ, в которых демонстрируется возможность интеграции термоэлектрических плёнок в одежду, фитнес-браслеты, нанесение плёнок на различные функциональные поверхности [1] и т.д.

Фундаментальный интерес вызван изучением особенностей термоэлектрических явлений в квантоворазмерных структурах. Согласно формуле Мотта [2] , коэффициент Зеебека определяется скоростью изменения функции плотности состояния вблизи уровня Ферми. Ключевой особенностью низкоразмерных структур является отличный от объёмных материалов вид функции плотности состояний. Таким образом, при технологическом подборе положения уровня Ферми возможно существенное увеличение α.

В настоящей работе проведено экспериментальное исследование термоэлектрических характеристик тонкоплёночных структур, содержащих массивы самоорганизованных квантовых точек InGaAs, сформированных на подложке i-GaAs методом газофазной эпитаксии. Коэффициент α измерялся в вакуумной камере методом направленного градиента температур с использованием термопар К-типа, коэффициент ρ – стандартной 4-контактной схемой. Подробнее с методиками измерения можно ознакомиться в [3]. Была подготовлена серия структур, в которой варьировалась температура роста и количество слоёв. Приведён анализ влияния квантовых точек на величину коэффициента Зеебека.

Благодарность (финансирование)

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках гос. задания (проект FSWR-2023-0037).

Список используемых источников

[1] X. He [et al.] Chem. Eng. J. 490 (2024) 151470.
[2] M. Cutler [et al.] Phys. Rev. 181 (3) (1969) 1336.
[3] M.V. Dorokhin [et al.] Nanoscale microscale thermophys. eng. 27 (2) (2023) 125.

Влияние температурного фактора на структурные особенности и физические характеристики титаната бария

В.А. Турченко[1,2] и К.М. Гасанов[1,3]*
[1]*Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980 г. Дубна, Россия, * e-mail: hasanovkanan11@gmail.com*
[2]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Ленинский пр., 4, 119049 г. Москва, Россия*
[3]*Институт Радиационных Проблем Министерства Образования и Науки, ул. Бахтияра Вахабзаде, 9, Az1141 г. Баку, Азербайджан*

Современное развитие микроэлектроники базируется на широком применении керамических материалов при создании пассивных компонент в виде микроконденсаторов, инфракрасных детекторов, многослойных конденсаторов, электрооптических переключателей, энергонезависимых чипов памяти, сенсоров и термисторов. Для миниатюризации электронных устройств и повышения их производительности необходимо применение высокоэффективных керамических материалов с контролируемыми диэлектрическими свойствами. Важнейшим составляющим в таких устройствах является керамический диэлектрик на основе титаната бария $BaTiO_3$ (от 50 до 98 масс.% в зависимости от типоразмера устройства).

Целью данной работы является развитие методологии проведения комплексных исследований влияния внешних (температурных) факторов на структурные особенности и физические характеристики титаната бария.

Образцы $BaTiO_3$ прессовали в таблетки диаметром 14 мм и толщиной спекали при температуре $t_{сп}$= 1150 ^{0}C (6 ч). Контакты из серебряной пасты вжигали на поверхность таблеток при 800 ^{0}C.

Методами рентгеновской и нейтронной дифракции проведен сравнительный анализ влияния температурного фактора на структурные особенности $BaTiO_3$, в широком интервале температур от 30 К до 650 К. Выполнены измерения импеданса и диэлектрической проницаемости в интервале температур от 100 К до 600 К. Методом первопринципного моделирования проведена оптимизация элементарной ячейки $BaTiO_3$ и выполнен расчет величины ее электрической поляризации.

Фотоэлекторонные свойства поликристаллической алмазной пленки, модифицированнной лазерным излучением

А.М. Кондранова*, Д.В. Городецкий, О.В. Седельникова, А.В. Гусельников, и А.В. Окотруб
*ИНХ СО РАН, 630090. проспект Акад. Лаврентьева, 3, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: a.kondranova@gmail.com**

Поликристаллические алмазные пленки представляют собой перспективный материал для создания высокоэффективных электронных устройств. Данная работа посвящена созданию фотодетекторов оптического диапазона на основе свободной поликристаллической алмазной пленки с токовыми контактами, созданными при облучении поверхности пленки лазерным излучением.

Поликристаллические алмазные пленки были получены методом плазмохимического осаждения из газовой фазы на полированных кремниевых подложках в микроволновом плазменном реакторе «Astex». В качестве источника углерода и плазмообразуещего газа были использованы пентан и водород, сооответсвенно. Для формирования токосьепмных электродов на алмазной пленке использовался твердотельный наносекундный УФ-лазер марки GROSSE-Mark (355 нм). Под воздействием лазерного излучения происходит графитизация приповерхностного слоя алмазной пленки, что позволяет использовать данные участки образца в качестве токосьемников.

В данной работе были получены датчики оптического излучения на основе свободностоящих поликристаллических алмазных пленок, на поверхности которых методом лазерного облучения были сформированы электроды в форме встречных периодических полосок, обьединенных общими токопроводящеми шинами (выполняющие роль проводника тока, соединяющие полоски). Расстояние между полосками на одной шине составляло 400 мкм, ширина токопроводящего канала составила 200 мкм, а расстояние между противоположными электродами составило 200 мкм. Для измерения фотоэлектрических свойств образцы размещались в измерительной камере спектрофлюориметра Shimadzu, к противоположным шинам подавался фиксированный потенциал. При облучении монохроматическим светом между контактами фиксировался фототок величиной от 10 нА – 400 нА. Максимальный отклик составил 250 нА при облучении детектора, отоженного в восстановительной атмосфере, с длиной волны 390 нм.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-72-10097.

Вовлечение структурной перестройки в процессы формирования магнитного порядка в сплавах системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$

В.И. Вальков[1], А.В. Головчан[1], И.Ф. Грибанов[1], Р.А. Сафонов[1], О.Е. Ковалёв[1], Н.Ю. Ныpков[1], В.Т. Сенють[2], и В.И. Митюк[3]*

[1]*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, ул. Р. Люксембург, 72, 283050 г. Донецк, Россия*
[2]*ОИМ НАН Беларуси, ул. Академическая, 12, 220072 г. Минск, Беларусь*
[3]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: mitsiuk@physics.by*

В образцах системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ с x<0.18 при медленном охлаждении (s) от температуры гомогенизирующего отжига (100 ч при 850 ºС) происходит последовательность фазовых переходов: структурный переход 1-го рода PMhex($P6_3/mmc$)↔PMorth($Pnma$) и изоструктурный магнитный фазовый переход 2-го рода из парамагнитного ромбического в геликоидальное ромбическоке состояние PMorth($Pnma$) - HMorth($Pnma$) [1]. Анализ аномального расщепления температурной зависимости обратной парамагнитной восприимчивости $\Delta\chi(T)^{-1} = \chi_{hex}(T)^{-1} - \chi_{orth}(T)^{-1}$ на две составляющие в области структурного перехода для медленно охлажденных (s) образцов (x=0.11, рис.1) позволяет сделать ряд выводов: (1) Взаимодействие между структурной и спиновой подсистемами приводит к энергетической выгодности гелимагнитного порядка HM с ромбической orth($Pnma$) кристаллической структурой.

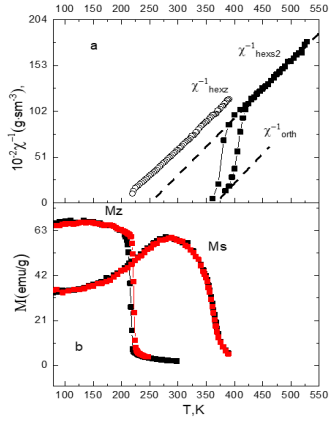


Рисунок 1. Температурные зависимости магнитоструктурных характеристик медленно охлажденных (s) и закаленных(z) образцов. h, c-нагрев охлаждение

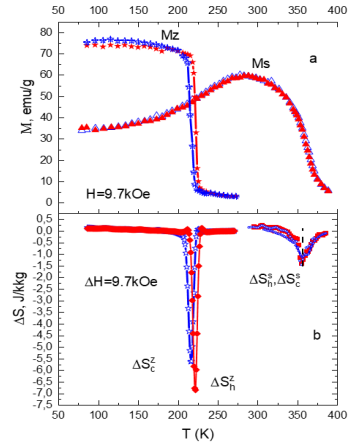


Рис.2. Сравнение магнитных и магнитокалорических характеристик медленно охлажденных (s) и закаленных (z) образцов

(2) Вовлечение структурных изменений в процессы магнитного упорядочения тем или иным способом должно привести к резкому изменению магнитоструктурных и магнитокалорических характеристик образца. Так, закалка (z) образца от 850 ºС в воду при комнатной температуре (рис.2a) приводит к единому магнитоструктурному переходу 1-го рода PMhex($P6_3/mmc$)↔HMorth($Pnma$). МКЭ при этом увеличивается кратно (рис. 2b). Анализу механизмов совмещения критических точек структурной и спиновой подсистем посвящено настоящее сообщение.

Список использованных источников

[1] A. Szytuta [и др.] Journal of Alloys and Compounds 726 (2017) 978.

Влияние давления на функциональные свойства магнитокалорического сплава $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$ с пониженной температурой кюри

И.Ф. Грибанов[1], В.И. Вальков[1], А.В. Головчан[1], Р.А. Сафонов[1], О.Е. Ковалев[1], Н.Ю. Нырков[1], В.И. Митюк[2]*
[1]*ФГБНУ ДОНФТИ, ул. Р. Люксембург, 72, 283048 г. Донецк, Россия*
[2] *НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: mitsiuk@physics.by*

Как известно, среди сплавов системы $NiMn_{1-x}Cr_xGe$, позиционируемых как «зеленые» магнитокалорические материалы, наилучшие функциональные характеристики имеют твердофазно закаленные сплавы, близкие по составу к $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$ [1]. В этих сплавах имеет место магнитоструктурный фазовый переход первого рода из высокотемпературной парамагнитной фазы с гексагональной кристаллической структурой типа Ni_2In в низкотемпературную ферромагнитную фазу с орторомбической кристаллической структурой типа TiNiSi, который и обуславливает появление гигантского магнитокалорического эффекта (МКЭ) [1, 2].

Установлено, что принятый в литературе метод синтеза таких материалов, включающий твердофазную закалку от температуры гомогенизирующего отжига (850°C) приводит к разбросу температур Кюри в диапазоне примерно $220<T_C<280$ K без потери их функциональной эффективности. В настоящей работе получены образцы с пониженной температурой Кюри (T_C) и исследовано влияние давления на МКЭ в этих образцах. Результаты представлены на рисунках 1 и 2.

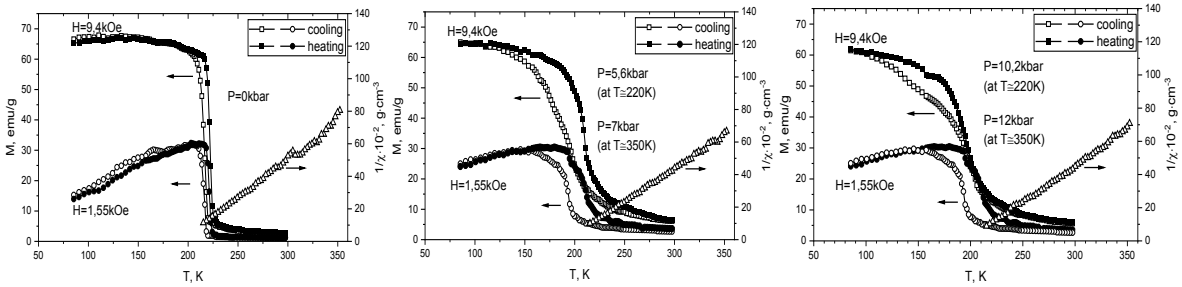


Рисунок 1. Температурные зависимости намагниченности сплава с x=0,11 при разных давлениях.

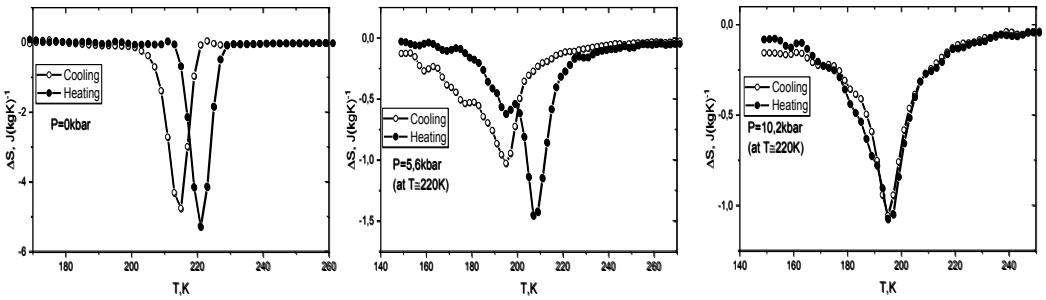


Рисунок 2. Температурный ход скачка энтропии в процессе изотермического намагничивания сплава с x=0,11 в поле ΔH=0–9,4 kOe при разных давлениях.

Как видно из рисунков 1 и 2, сжатие кристаллической решетки в нашем случае приводит к немонотонному изменению температур Кюри, соответствующих и охлаждению, и нагреву образца, а также к размытию магнитоструктурного фазового перехода, что влечет за собой уменьшение величины МКЭ.

[1] И.Ф. Грибанов [и др.] ФТВД 30 (2020) 83.
[2] T. Jaworska-Gołąb [и др.] J. Magn. Magn. Mater. 385 (2015) 1.

Эффективность экранирования ионизирующего излучения полимерных композитов

А. А. Роткович*, Д. И. Тишкевич, Т. И. Зубарь, А. А. Бондарук, А. Н. Котельникова, С. А. Герман, и А. В. Труханов
*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Беларусь, г. Минск, ул. П. Бровки, 19, 220072, *e-mail: rottkovich@gmail.com*

Для защиты от ионизирующего излучения используются радиационные экраны из высокоплотных материалов, таких как свинец. Однако, он токсичен. В этой работе предлагается использовать порошок вольфрама в качестве экранирующего материала и матрицу на основе полиэтилена, который экономичен и легок, что делает его перспективным для авиационной, микроэлектронной и космической промышленности. Композиционные материалы были получены из линейного полиэтилена низкой плотности и порошка вольфрама с массовым содержанием от 0 % до 70 %. Образцы, названные W0, W10, W30, W50 и W70, изготавливались методом термопрессования. Для расчета параметров эффективности экранирования гамма-излучения (линейный коэффициент ослабления (ЛКО), слой половинного ослабления (СПО), длина свободного пробега (ДСП)), использовалась программа Phy-X/PSD при энергии 0,8-2,5 МэВ для источника Co^{60}. Результаты моделирования эффективности экранирования гамма-излучения представлены на рисунке.

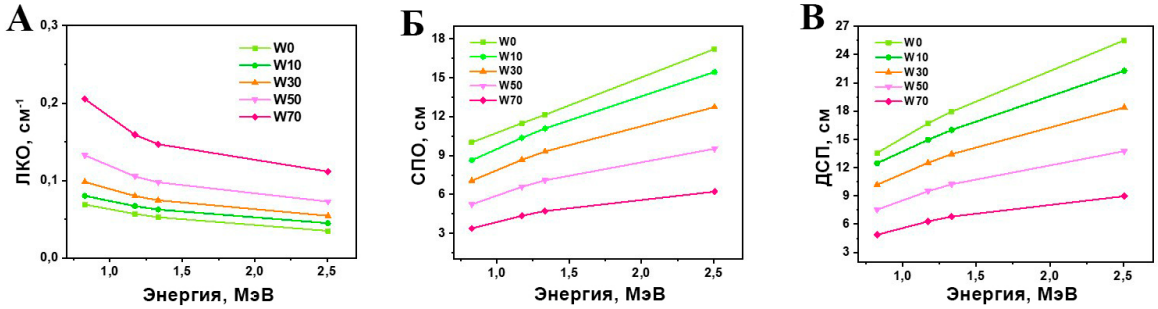


Рисунок 1. Графики зависимости ЛКО (А), СПО (Б) и ДСП (В) от энергии гамма-излучения для композиционных материалов полиэтилен-W

Уменьшение значений ЛКО и экранирующих свойств наблюдается при увеличении энергии излучения от 0,826 до 2,506 МэВ, особенно при энергии 1,25 МэВ (рис.1, А). Например, образец W70 имеет значение ЛКО 0,239 $см^{-1}$ при энергии 0,80 МэВ и 0,158 $см^{-1}$ при энергии 1,25 МэВ, что на 51 % ниже. Из графика видно, что образец с содержанием 70 % W характеризуется самыми высокими значениями ЛКО по сравнению с другими образцами. Композитные материалы имеют низкую плотность, поэтому для ослабления более высоких энергий требуются более толстые образцы (рис.1, Б). Следовательно, эти материалы рекомендуются для гамма-излучения с энергией до 1,25 МэВ, поскольку дальнейшее увеличение энергии излучения требует значительного увеличения толщины образца. Однако добавление до 70 % W порошка значительно снижало значения СПО. Подтверждается, что результаты расчета параметра ДСП (рис. 1, В) коррелируют с результатами расчета СПО. Кроме того, образец W70 обладает особенно высокими экранирующими свойствами, так как его значения ДСП значительно ниже. Максимальные значения ДСП для образцов W0 и W70 составляют 25,327 и 8,546 см, соответственно. В целом, образец с 70 % содержанием W лучше подходят для радиационного экранирования. Он обладают более высокими экранирующими свойствами и улучшенными массогабаритными параметрами.

Исследование фрустрированных спиновых систем в модели Гейзенберга

А. И. Самигуллина* и И. Ф. Шарафуллин
ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», ул. Заки Валиди, д. 32, 450076 г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия,
**e-mail: angelasamig2002@gmail.com*

В результате квантования орбитального движения электронов под воздействием мощного внешнего магнитного поля возникает возможность появления новых режимов колебания спиновых плотностей в квантовых спиновых волнах. Эти новые ветви могут приводить к эффектам, таким как изменение магнитных свойств материалов и возникновение новых фазовых состояний, что, в свою очередь, открывает перспективы для разработки инновационных технологий в области спинтроники и квантовых вычислений [1].

Магноны, являющиеся квантами спиновых волн, представляют собой коллективные колебания спинов в квантовых магнитных материалах. Они служат альтернативой электронам в современных информационных технологиях. При передаче информации в спиновых волновых устройствах наноразмера не происходит перемещения физических частиц, что значительно снижает энергопотребление.

Исследуется гетероструктура из двух слоев с симметрией простой кубической кристаллической решеткой: ферромагнитной и сегнетоэлектрической. Используется метод функции Грина для расчета энергетического спектра и магнитных характеристик В узлах магнитной пленки расположены спины Гейзенберга ($S = 1/2$). Полный гамильтониан модели имеет следующий вид:

$$H = H_m + H_{an} + H_h + H_D + H_{fm} \quad (1)$$

где первое слагаемое описывает гамильтониан между соседними спинами в плоскости магнитной пленке xy, второе – гамильтониан анизотропии типа «легкая ось», третье – магнитное поле направленное перпендикулярно плоскости пленки по оси z, четвертое слагаемое – гамильтониан межслойного взаимодействия пленок, пятое – гамильтониан сегнетоэлектрической пленки.

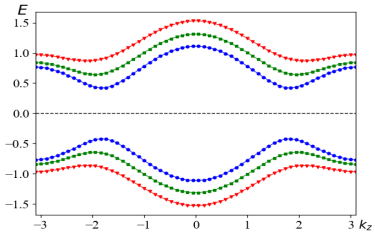


Рисунок 1. Зависимость энергии от волнового вектора k_z в случае $J = 1.25$, $I = 0.1$, $D = 0.75$, $\theta = 30^\circ$, где синий цвет – $h = 0$, зеленый – $h = 0.25$, красный – $h = 1$.

Форма зависимости энергии от волнового вектора k_z демонстрирует поведение угасающей спиновой волны. Также были выполнены исследования магнитных свойств системы, включая намагниченность, магнитную восприимчивость, теплоемкость и энергетические характеристики в зависимости от температуры.

Благодарность (финансирование)

Работа выполнена в рамках государственного задания соглашение № 075-03-2024-123/1 от 15.02.2024 тема № 324-21.

Список использованных источников

[1] J. Xu [и др.] Frontiers in Materials 7 (2020) 1-25.
[2] I. F. Sharafullina [и др.] Physics of Metals and Metallography 125 (2024) 1894-1900.

Сверхтонкие взаимодействия и магнитный порядок гомометаллического оксибората Co_3BO_5 по данным ЯМР $^{10,11}B$ и ^{59}Co

А. Г. Смольников[1]*, М. Е. Кашникова[1], Н. А. Уткин[1], А. Ф. Садыков[1], Ю. В. Пискунов[1], В. В. Оглобличев[1], и Н. В. Казак[2]

[1] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: smolnikov@imp.uran.ru*

[2] *Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, ул. Академгородок, 50, 660036, Красноярск, Россия*

Впервые получены данные о локальном зарядовом и магнитном окружении ядер $^{10,11}B$ и ^{59}Co в структуре гомометаллического оксибората Co_3BO_5 с использованием спектроскопии ЯМР. Данные получены в области температур парамагнитного магнитоупорядоченного состояния образца в магнитных полях до 117 кЭ. На позициях ядер $^{10,11}B$ получены параметры тензора градиента электрического поля и магнитного сдвига. Данные ЯМР указывают на наличии суперобменных взаимодействий в цепочках Co – O – B, которые наиболее вероятно происходят с участием sp^2-гибридизованных орбиталей иона B^{3+}. Суперобменное взаимодействие Co – O – B может играть важную роль в системе Co_3BO_5 как при формировании дальнего магнитного порядка при низких температурах [1, 2], так и в механизме спинового кроссовера при температурах выше комнатных [3]

Данные ЯМР $^{10,11}B$ и ^{59}Co в магнитоупорядоченной фазе Co_3BO_5 подтверждают наличи в структуре ионов Co^{3+} находящихся в низкоспиновам состоянии. Локальное магнитное поле на ядрах ионов Co^{3+} имеет наведенный характер, и соответствует магнитной структуре представленной на рис.1. Преставленная магнитная структура очень близка к предложенной в работе [1] выполненной с использованием дифракции нейтронов.

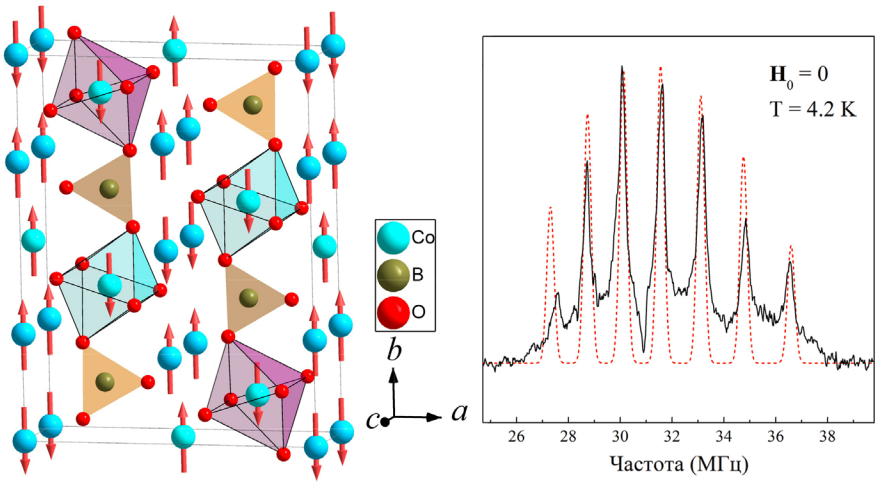


Рисунок 1. Модель магнитной структуры используемая для моделирования спектров ЯМР ^{59}Co в магнитоупорядоченной фазе Co_3BO_5

Благодарность (финансирование).
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 25-22-00507)

Список использованных источников:

[1] D. C. Freitas [и др.] Physical Review B 77 (18) (2008) 184422.
[2] D. C. Freitas [и др.] Physical Review B 94 (17) (2016) 174409.
[3] N. V. Kazak [и др.] Physical Review B 103 (9) (2021) 094445.

Magnetic properties and IR spectrum of nonstoichiometric $(MnSe)_{1-x}(Tm_{0.76}Se)_x$

S. Aplesnin[1,2]*, A. Kharkov[2], M. Sitnikov[2] O. Nikitinskiy[2], and A.M. Zhivulko[3]
[1]*Kirensky Institute of Physics, KSC SB RAS,660036, Krasnoyarsk, Russia,*
**e-mail: apl@iph.krasn.ru*
[2]*Reshetnev Siberian State University of Science and Technology, 660037 Krasnoyarsk, Russia*
[3]*Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 220072 Minsk, Belarus*

Embedding of defects and charged vacancies into the $(MnSe)_{1-x}(Tm_ySe)_x$ compound will lead to new magnetic and optoelectronic properties [1]. The electron–phonon interaction induced by defects is enhanced by variable-valence thulium ions, which can intensify the interaction between the dielectric and magnetic subsystems and give rise to the interaction between small lattice polarons with the formation of a bipolaron. Above the Neel temperature, two small maxima in magnetic susceptibility were found (Figure 1a). The paramagnetic Curie temperature abruptly drops upon substitution of thulium for manganese (Figure 1b). As a result of electron doping, in the vicinity of thulium ions, an additional ferromagnetic contribution to the exchange coupling between the manganese spins arises due to the *sd* interaction.

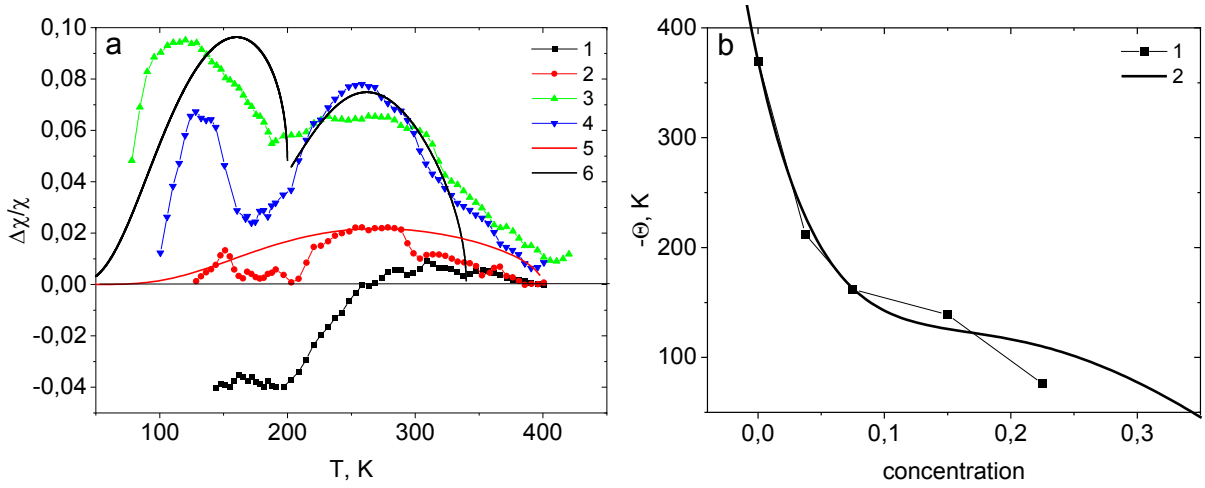


Figure 1. Relative deviation of magnetic susceptibility from the Curie-Weiss law in $(MnSe)_{1-x}(Tm_{0.76}Se)_x$ for x = 0.05 (1), 0.1 (2), 0.2 (3), 0.3 (4) , susceptibility due to the dissociation of bipolarons (5, 6), calculated using formula (3) (a). Paramagnetic Curie temperature on the concentration of thulium ions: experiment (1) and calculated in the molecular field approximation $\Theta(x) = \Theta_{MnS}\,(1 - x - \lambda_{MnMn}\,c_g - \lambda_{MnTm}\,x)$ (2)(b).

The electron–phonon and Coulomb interactions lead to the formation of bipolarons, which are found in the IR absorption. An additional contribution to the magnetic usceptibility is made by the dissociation of bipolarons, which is accompanied by a singlet–triplet transition [2]. Critical temperatures of disappearance of some lines in the IR absorption spectrum have been found. A mechanism for changing the intensity of IR spectra from temperature has been proposed.

[1] O. B. Romanova [et al.] J. Mater. Sci: Mater Electron 35 (2024) 1751.
[2] S.S. Aplesnin [et al.] , J of All. and Comp. 1010 (2025) 177925.

Исследование микроструктуры и механических свойств сплава Ni-Cr-Al, полученного методом электронно-лучевого аддитивного производства

Е.Г. Астафурова*, Е.А. Загибалова, Д.О. Астапов, С.В. Астафуров, М.А. Лысунец, и Е.А. Колубаев
ИФПМ СО РАН, Россия, пр. Академический, 2/4, 634021 г. Томск,
**e-mai: elena.g.astafurova@ispms.ru*

С использованием методов растровой и просвечивающей электронной микроскопии, микрорентгеноспектрального и рентгеноструктурного анализа проведено исследование микро- и макроструктуры сплава Ni-Cr-Al, полученного методом аддитивного производства. Исходные образцы сплава Ni-Cr-Al получали методом двухпроволочного электронно-лучевого аддитивного производства с одновременной подачей проволок NiCr (Ni-20%Cr) и Al (≥99,5%Al). Соотношение скоростей подачи проволок NiCr и Al поддерживали равным трем с целью формирования материала на основе фазы Ni_3Al. Микроструктуру образцов исследовали с помощью растрового электронного микроскопа LEO EVO 50 и просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM 2100. Механические испытания полученных образцов проводили на электромеханической машине LFM-125 при комнатной температуре.

Рентгеновские исследования и металлографический анализ показали, что полученный материал обладает гетерофазной структурой, состоящей из фаз Ni_3Al, Ni_3Cr, NiAl и γ-Ni. В процессе электронно-лучевой наплавки происходит формирование дендритной микроструктуры, а дендритные и междендритные участки состоят из смеси дисперсных фаз. Электронно-микроскопический анализ позволил установить, что обогащенная никелем дендритная фаза представляет собой смесь фаз γ-Ni + γ'-Ni_3Al, легированных хромом. В матрице γ-Ni располагаются крупные и мелкие частицы на основе упорядоченной γ'-Ni_3Al фазы. Крупные частицы имеют кубическую форму с размером граней в диапазоне от 100 до 300 нм, а между ними располагаются мелкие частицы более округлой формы (20–30нм). В междендритной фазе сформировались сферические частицы γ'-фазы, которые обогащены хромом и никелем ((40–45)%Cr-(36–38)%Ni-(15–30)%Al, ат. %). Эти частицы располагаются в обогащенной никелем и алюминием матрице ((39–40)%Al-(56–58)%Ni-(3–4)%Cr), которая представляет собой упорядоченную β-NiAl фазу, частично претерпевшую превращение в $L1_0$-NiAl мартенсит. Из-за неоднородности химического состава заготовки, полученной методом электронно-лучевого аддитивного производства, и многократного нагрева и охлаждения материала в процессе наплавки, мартенситное β→$L1_0$ превращение реализовано не во всем объеме междендритной фазы. При этом в областях, где оно прошло, сформировалась характерная микроструктура пакетного мартенсита, так как при β → $L1_0$-переходе в одном пакете часто образуются мартенситные кристаллы четырех вариантов, попарно находящихся в двойниковой ориентации с плоскостью двойникования типа $\{101\}_\beta$ [1]. Образцы сплава имеют высокую микротвердость - 4,3 ГПа, но разрушаются хрупко при комнатной температуре.

Полученные сплавы Ni-Cr-Al предназначены для использования в качестве жаропрочных и жаростойких покрытий на деталях, работающих при повышенных температурах и в коррозионных средах.

Благодарность (финансирование). Исследования выполнены по проекту государственного задания FWRW-2022-0005 с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН. Авторы выражают благодарность к.ф.-м.н. Рубцову В.Е. и к.ф.-м.н. Никонову С.Ю. за помощь в аддитивном производстве материала.

Список использованных источников:

[1] С.В. Косицын [и др.] Успехи физ. мет. 9 (2008) 195–258.

Исследование фотолюминесценции и комбинационного рассеяния света в монокристаллах гибридных металлорганических перовскитов $CH_3NH_3PbBr_3$ и $CH_5N_2PbBr_3$

М. Ахатов[1]*, Ю. В. Корх[1], А. Д. Лобанов[1], К.М. Константинова[3,4], А.Р. Иштеев[3,4], и Т. В. Кузнецова[1,2]

[1]*Институт физики металлов УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, д.18, 620108 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: max 732@mail.ru*

[2]*Уральский Федеральный Университет, ул. Мира, д. 19, 620062 г. Екатеринбург, Россия*

[3]*ГБУЗ «Научно-практический клинический центр диагностики и телемедицинских технологий Департамента здравоохранения города Москвы» ул. Петровка, д. 24, стр. 1, 127051 г. Москва, Россия*

[4]*Лаборатория Перспективной Солнечной Энергетики, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Ленинский пр., д. 4, стр. 1, 119049, г. Москва, Россия*

Гибридные металлорганические перовскиты $CH_3NH_3PbBr_3$ и $CH_5N_2PbBr_3$ (сокращенно $MAPbBr_3$ и $FAPbBr_3$ представляют значительный интерес благодаря их уникальным оптическим и электронным свойствам: ширина запрещённой зоны для $MAPbBr_3$ составляет около 2,3 эВ, а для $FAPbBr_3$ – 2,1 эВ, что делает их подходящими для применения в детекторах ионизирующего излучения [1], высокий коэффициент поглощения ($>10^4$ см$^{-1}$) и большая длина диффузии носителей заряда (до 175 мкм) обеспечивают эффективное преобразование света в фототок [2]. Наличие свинца (Z = 82) в структуре перовскитов позволяет создавать фотодетекторы, микролазеры и солнечные батареи. Гибридные перовскиты имеют несколько фазовых переходов[3]. Высококачественные образцы монокристаллов $CH_3NH_3PbBr_3$ и $CH_5N_2PbBr_3$ были получены методом осаждения из насыщенного раствора [4].

В данной работе монокристаллы $MAPbBr_3$ и $FAPbBr_3$ были исследованы при помощи методов оптической спектроскопии, а именно комбинационного рассеяния света и фотолюминесценции. Спектры фотолюминесценции (ФЛ) были получены при использовании импульсного лазера с длиной волны излучения 355 нм, в температурном диапазоне 3.5 – 300К. В полученных спектрах ФЛ обнаружены две особенности, а именно широкая примесная зона, проявляющаяся при температурах выше 80К, природа которой связана с наличием дефектов в образцах, и более узкая зона, обусловленная рекомбинацией свободных носителей, энергетическое положение зон смещается в область больших энергий по мере роста температуры. Помимо температурных зависимостей, были получены зависимости ФЛ от мощности лазерного излучения, для обоих образцов, из которых хорошо прослеживается динамика затухания люминесцентных свойств. Спектры комбинационного рассеяния (КР) были получены при использовании лазера с длиной волны 785 нм при комнатной температуре. В полученных спектрах КР прослеживаются характерные для данных образцов моды колебаний. Проведен сравнительный анализ полученных данных, в результате которого определено влияние замены органического катиона CH_3NH_3 (сокращенно MA) на CH_5N_2 (сокращенно FA) на их оптические свойства.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

Список использованных источников:

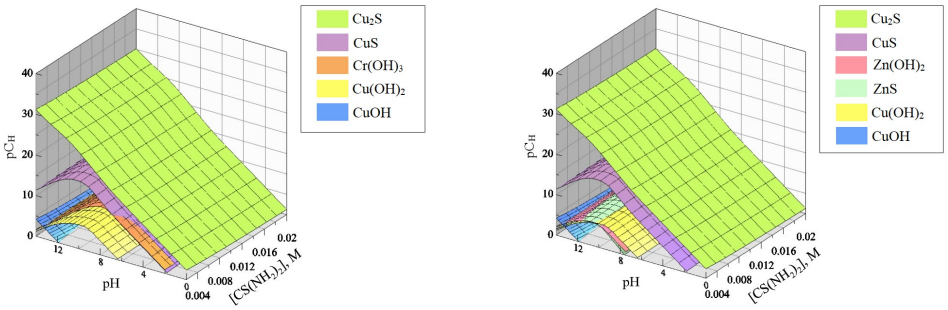
[1] F. Bridges [и др.] Phys. Rev. B 108 (21) (2023)1–16.
[2] D. Ceratti [и др.] J. Phys. Chem. C 125(9) (2021) 4938–4945.
[3] A. Ishteev [и др.] Appl. Phys. Lett. 119 (7) (2021) 1–8.
[4] A. Ishteev [и др.] J. Mater. Chem. C 10 (15) (2022) 5821–5828

Термодинамическая оценка граничных условий образования нанопорошков CuS(Cr) и CuS(Zn) химическим осаждением

Г. А. Бажина[1*], А. В. Поздин[1], и Л. Н. Маскаева[1,2]
[1] *ФГАОУ ВО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Российская Федерация,*
**e-mail: bazhg@yandex.ru*
[2] *Уральский институт ГПС МЧС России, ул. Мира, 22, 620022 г. Екатеринбург, Российская Федерация*

Фотокатализ является эффективным методом очистки сточных вод с использованием солнечного света и фотокатализаторов, среди которых сульфид меди выделяется своими уникальными характеристиками. Экспериментальные данные подтверждают, что допирование дисперсного сульфида меди ионами переходных металлов изменяет его функциональные свойства. Однако вопросы, касающиеся легирования CuS ионами Cr^{3+} и Zn^{2+}, остаются недостаточно освещенными. Следует также отметить, что сульфид меди характеризуется полистехиометрией, что затрудняет получение твердой фазы CuS.

Для определения концентрационной области совместного образования сульфидов меди и переходного металла был проведен анализ ионных равновесий в системах «$CuCl_2$ – CH_3COONa – $CrCl_3$ – $CS(NH_2)_2$» и «$CuCl_2$ – CH_3COONa – CH_3COOH – $ZnCl_2$ – $CS(NH_2)_2$» (рис.) по методике, предложенной в [1].



а *б*

Рисунок 1. Граничные условия образования труднорастворимых фаз Cu_2S, CuS, Cu(OH), $Cu(OH)_2$, $Cr(OH)_3$ в системе «$CuCl_2$ – CH_3COONa– $CrCl_3$ – $CS(NH_2)_2$» (*а*) и Cu_2S, CuS, Cu(OH), $Cu(OH)_2$, ZnS, $Zn(OH)_2$ в системе «$CuCl_2$ – CH_3COONa– $ZnCl_2$ – $CS(NH_2)_2$» (*б*) от pH среды и $[CS(NH_2)_2]$ при T= 298 K

Анализ концентрационных плоскостей показал, что во всех случаях осаждение начинается с образования твёрдой фазы сульфида меди(I). Между концентрационными плоскостями, соответствующими Cu_2S и CuS, формируется твёрдая фаза сульфида меди(II), а ниже плоскости, принадлежащей CuS в виде смеси полиморфных модификаций. В диапазоне pH от 1,8 до 6,0 возможно легирование как Cu_2S, так и CuS ионами Cr^{3+}, концентрация которого в реакторе $\geq 10^{-5}$ М. Что касается второй системы, то легирование твердых фаз Cu_2S и CuS может быть реализовано в щелочной среде (pH=8-14) при концентрациях легирующего металла, превышающей 10^{-5} М.

Следует отметить, что термодинамическая оценка граничных условий образования обсуждаемых твердых фаз проведена при стандартной температуре 298K, поэтому дальнейшими исследованиями было установлено, что температура, обеспечивающая химическое осаждение нанокристаллических фотокатализатов на основе Cu_2S, CuS, легированных хромом либо цинком находится в интервале температур от 343 до 353 K.

Список использованных источников

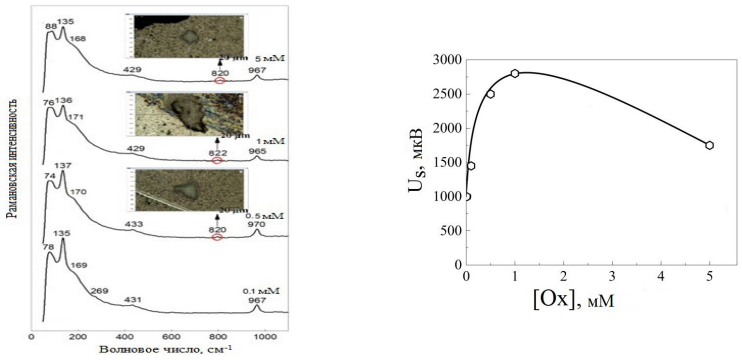
[1] В.Ф. Марков [и др.] Гидрохимическое осаждение пленок сульфидов металлов: моделирование и эксперимент. Изд-во УрО РАН (2006) 218.

Влияние окислителя на вольтовую чувствительность пленок PbS(I)

А.В. Бельцева[1]*, Д.Е. Быструшкина[1], Маскаева Л.Н.[1,2], Марков В.Ф.[1,2]
[1] *ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail:avbeltseva@mail.ru*
[2] *Уральский институт ГПС МЧС России, ул. Мира, 22, 620022 г.Екатеринбург, Россия,*

Поликристаллические тонкие плёнки сульфида свинца PbS демонстрируют значительный научный интерес в силу их уникальных физико-химических характеристик, что обуславливает им перспективность в различных областях современной фотоники. Материалы на основе PbS находят применение в качестве компонентов для инфракрасных фотоприёмных устройств, фотоэлектрических преобразователей, элементов солнечных батарей. Одним из наиболее перспективных методов получения тонких плёнок PbS является химическое осаждение из водных растворов.

В рамках настоящего исследования осуществлена модификация поверхности плёнок PbS при химическом осаждении путём введения в используемую нами ранее реакционную смесь [1] комбинированной добавки восстановителя (0.15 M NH_4I) с окислителем (Ox) при варьировании его концентрации от 0.1 до 5 мМ. На спектрах комбинационного рассеяния (КР) трех пленок PbS(I,Ox) впервые обнаружены малоинтенсивные линии на частотах 820 и 822 $см^{-1}$, соответствующие примесной фазе пентаоксида дийода I_2O_5 [2], причем при 1 мМ обнаружено его максимальное содержание (рис. 1а). Зависимость вольтовой чувствительности U_s от концентрации окислителя Ox имеет экстремальный вид (рис. 1б).



а б

Рисунок 1. КР спектры пленок PbS(Ox,I) (а) и зависимость вольтовой чувствительности U_S пленок PbS(Ox,I) от концентрации окислителя Ox в реакторе в присутствии 0.15 M NH_4I (б)

Необходимо отметить, что исходные пленки PbS обладают *n*-типом проводимости, и имеют незначительную фоточувствительность (~40 мкВ), плёнка PbS(I), легированная восстановителем (NH_4I), меняет тип проводимости на *p*-тип, а вольтовая чувствительность U_S составляет 320 мкВ. Введение в реактор NH_4I в комбинации с окислителем Ox приводит к существенному росту вольтовой чувствительности обсуждаемых плёнок, достигая максимального значения U_s~2900 мкВ при 1 мМ Ox в реакторе. Таким образом, комбинированная добавка обеспечивает получение высокофункциональных свойств пленкам сульфида свинца, которые могут быть рекомендованы для применения в качестве ИК детекторов и фотоприемных устрйств.

Список использованных источников:

[1] V.F. Markov [и др.] PCCP 24 (2022) 16085-16100.
[2] O.H. Ellestad. Acta Chem. Scand. S. B: Organic chemistry and biochem. 35 (1981) 155-164.

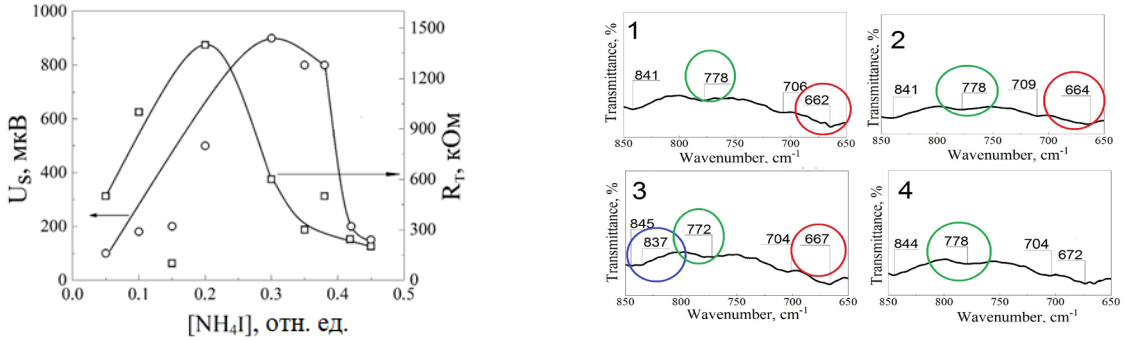
Функциональные свойства химически осажденных пленок PbSe(I)

В.А. Будкина[1]*, А.В. Бельцева[1], О.С. Ельцов[1], Л.Н. Маскаева [1,2]
[1] *ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ул. Мира, д. 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mai: vikbukina@mail.ru*
[2] *Уральский институт ГПС МЧС России, ул. Мира, 22, 620022 г. Екатеринбург, Россия*

Селенид свинца – представитель широко распространенного семейства халькогенидов. Это один из наиболее востребованных узкозонных (0,27 эВ) полупроводников с кубической структурой *B*1, работающий в ближнем и среднем ИК-диапазонах (2−5 мкм). Он применяется в таких устройствах, как детекторы инфракрасного излучения, солнечные батареи, а также в термоэлектрических системах нового поколения. Благодаря технологической простоте и экономичности большинством исследователей перспективным считается метод химического осаждения селенида свинца из водных сред по реакции

$$Pb^{2+} + Na_2SeSO_3 + 2OH^- = PbSe\downarrow + SO_4^{2-} + 2Na^+ + 2H_2O$$

Для обеспечения фоточувствительных свойств в качестве легирующей примеси в реакционную смесь добавляли йодид аммония NH_4I, затем проводили отжиг в кислородсодержащей атмосфере, результатом которого являлась гомогенизация и термоактивация пленок PbSe(I). Основными параметрами, количественно описывающими функциональные свойства чувствительных элементов размером 5×5 мм^2 на основе обсуждаемых пленок, являлись вольтовая чувствительность U_S и темновое сопротивление $R_т$, имеющие экстремальный характер (рис. а). Максимальная величина вольтовой чувствительности обусловлена оптимизацией концентрации носителей в слое за счет легирующего действия, установленных ИК спектроскопией (рис. б), йодсодержащих соединений I_2O_4 и IO_3, отвечающих характеристическим полосам поглощения в диапазонах 663-676 и 773-779 см$^{-1}$, а также фотоактивной фазе I_2O_5, установленной на частоте колебаний 837 см$^{-1}$, как это показано в [1].



а б

Рисунок – Зависимости вольтовой чувствительности U_S и темнового сопротивления $R_т$ пленок PbSe(I) от [NH_4I] в реакторе (б). ИК спектры пленок PbSe, легированных NH_4I, отн.ед.: 4 (1), 6 (2) 7(3), 9(4) (б)

Таким образом, легированные тонкопленочные соединения PbSe(I) могут существенно расширить область своего применения в качестве потенциальных компонентов для создания эффективных фотодетекторов и фотоприемных устройств.

Список использованных источников

[1] L.N. Maskaeva and et. al. Thin Solid Films, 817 (2025), 140654

Азотирование порошка железа в условиях термического сопряжения процессов СВС

Е. И. Волченко*, Т. В. Баринова, и М. И. Алымов
Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН, ул. Академика Осипьяна, д. 8, 142432 г. Черноголовка, Россия,
**e-mail: volchenko_ei@ism.ac.ru*

Важным классом материалов современного материаловедения являются нитриды железа благодаря их многообещающим применениям: в магнитных датчиках, коррозионностойких материалах, спинтронных устройствах, феррожидкостях и каталитических реакциях. Кроме того, нитриды железа демонстрируют высокую намагниченность насыщения и высокий магнитный момент, при этом имея низкую стоимость. Ранее в работе [1] была показана возможность азотирования порошка железа в присутствии мочевины в условиях термического сопряжения процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), однако не была исследована зависимость фазового состава от количества мочевины.

Целью данной работы являлось исследование зависимости фазового состава продуктов азотирования железа от содержания мочевины в условиях термического сопряжения процессов СВС.

В исследовании использовали порошок карбонильного железа (Р-100Ф2, дисперсность 2,5-5 мкм) со сферической формой частиц. В качестве азотирующей добавки в порошок железа вносили мочевину (от 5 до 35 мас. %). Для организации термического сопряжения процессов СВС использовали смесь состава Ti+C ($T_г$ = 3210 К). Синтез проводился в реакторе высокого давления в среде азота (3 МПа).

Установлено, что зависимость фазового состава от количества мочевины в порошке железа носит сложный характер. При содержании мочевины до 15 мас. % в продуктах азотирования присутствуют Fe_3N_x, Fe_4N, Fe_3C и исходный α-Fe. Доля Fe_xN (x=3,4) составляет до 65 мас. %, доля Fe_3C – 20-25 мас. %. С увеличением содержания мочевины до 35 мас. % соотношение фаз Fe_xN-Fe_3C-Fe практически не меняется. При этом в продуктах азотирования исчезает Fe_4N, остается только Fe_3N_x, где значение «x» растет от 0,9 до 1,3 с ростом количества мочевины. По данным химического анализа установлено, что с увеличением количества мочевины, при неизменном фазовом составе в продуктах азотирования растет содержание доли элементов N, C и O, входящих в состав продуктов разложения мочевины (рисунок). Независимость фазового состава продуктов азотирования от содержания мочевины, вероятно, можно объяснить образованием карбонитридной фазы $Fe_3(N,C)_x$ [2].

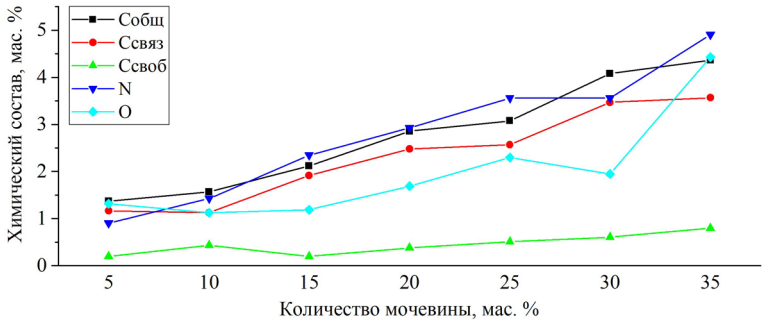


Рисунок 1. Зависимость химического состава от количества мочевины

Список использованных источников

[1] Е. И. Волченко [и др.] Металлы 4 (2024) 35–40.
[2] T. Woehrle [и др.] J. Metall Mater Trans. 44 (2013) 2548–2562.

Структура и свойства легированных и нелегированных материалов на основе $AgNbO_3$ для фотокаталитической очистки воды.

И. Г. Генов[1,2]*, Д. П. Козленко[1], О. Ю. Пономарева[1], И. Г. Виноградов[1], А. Н. Нечаев[1], Т. Н. Вершинина[1,3], О. Н. Лис[1], А. В. Руткаускас[1], А. В. Данина[1], Е. А. Корнеева[1], М. Н. Мирзайев[1,4,5]

[1]*Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980 г. Дубна, Россия, *e-mail: genov@jinr.ru*

[2]*Институт по электрохимии и энергетических систем им. Акад. Евгеня Будевского-Болгарская академия наук, ул. Акад. Г.Бончева, 10, 1113 г. София, Болгария*

[3]*Государственный университет "Дубна", ул. Университетская, 19, 141982 г. Дубна, Россия*

[4]*Институт радиационных проблем Министерства науки и образования Азербайджанской Республики, ул. Б. Вагабзаде, 9, AZ1143 г. Баку, Азербайджан*

[5]*Университет Хазар, ул. Масхети, 41, AZ1096 г. Баку, Азербайджан*

Фотокаталитические полупроводники могут расщеплять органические загрязнители до нетоксичных малых молекул посредством фотоиндуцированных реакций окисления и безвредны для окружающей среды. Многофункциональными полупроводниками, которые используются в качестве фотокатализаторов являются оксиды металлов [1]. У них гибкая запрещенная зона, которую можно адаптировать под конкретные приложения [2]. Ее энергию можно сузить путем легирования как катионами, так и анионами. Легирование является эффективным методом настройки запрещенной зоны оксидов металлов. В результате фотокатализаторы имеют более высокое поглощение видимого света по сравнению с чистым оксидом металла.

Материал $AgNbO_3$ был идентифицирован как оксид металла с полупроводниковыми свойствами, подходящими для фотокатализа, с шириной запрещенной зоны ~ 2,9 эВ. Он принадлежит к семье перовскитов и имеет орторомбическую кристаллическую структуру [3]. $AgNbO_3$ является подходящим фотокатализатором как для расщепления воды, так и для фотокаталитического разложения органических загрязнителей. Легирование $AgNbO_3$ повышает его фотокаталитическую активность [4]. Легирующие примеси могут играть важную роль в улучшении фотокатализа путем изменения структуры и морфологии $AgNbO_3$.

Целью нашей работы является повышение эффективности фотокатализатора из $AgNbO_3$. Для этого были использованы ионы Bi^{3+}, как легирующие добавки в А-узле $AgNbO_3$.

Таким образом, как нелегированные, так и легированные фотокатализаторы были изготовлены, охарактеризованы и испытаны для определения влияния легирующих эламентов в сторону улучшения фотокаталитических характеристик путем деградации красителя RhB.

Список использованных источников:
[1] C. Burda [и др.] Nano Letters 3(2003)1049–1051.
[2] J. Peng [и др.] Thin Solid Films 531 (2013) 81–87.
[3] Y. Tian [и др.] J. Mater. Chem. A 44 (2016) 17279–17287.
[4] G. Li [и др.] Dalton Transactions 13 (2009) 2423–2427.

Факторы, влияющие на эффективность магнитостатического экранирования составных цилиндрических экранов

С.С. Грабчиков[1*], Е.А. Грабчикова[1], Т.И. Зубарь[1], О.Д. Канафьев[1], Г.А. Русецкий[1]
*[1]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению» ул.П.Бровки,19, 220072 г. Минск, Республика Беларусь, *e-mail: gss@physics.by*

Известно [1], что одними из наиболее высокоэффективных электромагнитных экранов являются составные экраны. Имеется ряд теоретических работ [2, 3], в которых обосновано улучшенное экранирование объекта, помещенного в экран, состоящий из нескольких ферромагнитных слоев, разделенных не магнитными промежутками. Ранее экспериментально было показано [4], что результирующий эффект составных цилиндрических экранов системы АМАГ172/Al/$Ni_{80}Fe_{20}$ больше суммы эффективностей отдельных однослойных экранов $Ni_{80}Fe_{20}$ и АМАГ172. В настоящей работе экспериментальными и расчетными методами изучены основные факторы, влияющие на эффективность экранирования составных систем АМАГ172/Al/$Ni_{80}Fe_{20}$.

Состав, структура и размеры образцов составных экранов аналогичны приведенным в работе [4]. Расчетными и экспериментальным методами показано, что эффективность экранирования (Э) составных структур АМАГ172/Al/$Ni_{80}Fe_{20}$ значительно выше (84÷86 дБ), чем эффективность составляющих их однослойных экранов АМАГ172 и $Ni_{80}Fe_{20}$ (25÷38 дБ). При этом результирующий эффект в многослойном цилиндрическом экране максимален при определенном значении расстояния между первым и вторым экранами. Увеличение и уменьшение этого значения приводит к уменьшению эффективности экранирования многослойного экрана. Таким образом, первый фактор, влияющий на эффективность составных экранов, это расстояние между магнитными слоями.

Второй фактор связан с магнитными свойствами и характером зависимостей магнитной проницаемости (μ) отдельных магнитных слоев от напряженности внешнего магнитного поля (Н). Нелинейный и отличный характер зависимостей μ = μ(Н) первого и второго магнитных слоев существенно влияют на результирующую зависимость Э = Э(Н) градиентных экранов. Нелинейность зависимостей μ(Н) приводит к неоднородности в распределении значений магнитной проницаемости по толщине и объему магнитного экрана, и как следствие, в значительной степени влияет на поведение кривой Э(Н) составных экранов.

Третий фактор – это очередность расположения магнитных слоев составного экрана по отношению к внешнему магнитному полю. В многослойной структуре, содержащей слои АМАГ172 и $Ni_{80}Fe_{20}$, наиболее высокая эффективность экранирования достигнута при конфигурации, когда первым по отношению к внешнему магнитному полю расположен магнитный слой с эффективной зоной экранирования в области более высоких магнитных полей (40÷100 А/м, $Ni_{80}Fe_{20}$), вторым – магнитный слой с эффективной зоной экранирования в области более низких магнитных полей (1÷10 А/м, АМАГ172).

Список использованных источников:
[1] Ю.А Реутов [и др.] УрО РАН (2006) 72.
[2] A. M Gravath [и др.] Rev. Sci.Instr. 28 (1957) 659.
[3] S. Chrisos [и др.] IEEE Transactions оп Magnetic 28 (1992) 61-65.
[4] С.С. Грабчиков [и др.] APSSP (2023) 278-282.

Влияние замещения ионов Fe^{3+} на Bi^{3+} на фазовый состав, кристаллическую структуру и магнитные свойства гексаферрита бария

И.А.Греков [1,2] * и А.В.Труханов [1]
[1]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск,, Республика Беларусь, *e-mail: iag.grekov.ivan.al@gmail.com*
[2]*УО «БГУИР», ул. П. Бровки, 6, 220013 г. Минск, Республика Беларусь,*

Гексаферриты М-типа представляют собой класс магнитных многокомпонентных оксидов железа с общей формулой $AFe_{12}O_{19}$. Физические свойства гексаферритов могут быть модифицированы путем частичного замещения катионов Fe^{3+} диамагнитными ионами. Целью данного исследования является изучение влияния замещения ионов Fe^{3+} на ионы Bi^{3+}, обладающие значительно большим ионным радиусом, на фазовый состав и магнитные свойства гексаферрит-бариевой керамики $BaFe_{12-x}Bi_xO_{19}$. Для проведения исследования были синтезированы керамические образцы $BaFe_{12-x}Bi_xO_{19}$ с вариацией степени замещения (x = 0,1–0,6) методом двухстадийного твердофазного синтеза. Методом рентгеновской дифракции установлено, что образцы $BaFe_{12-x}Bi_xO_{19}$ с x = 0,1 и 0,3 являются однофазными (Пр. гр. $P6_3/mmc$). Обнаружено увеличение параметров элементарной ячейки от a = 5,865 Å и c = 23,099 Å для x = 0,1 до a = 5,904 Å и c = 23,168 Å для x = 0,3, что хорошо соответствует величинам ионных радиусов Fe^{3+}/Bi^{3+}. Для образцов с долей замещения x = 0,4 обнаружено снижение параметров кристаллической решетки, что может быть объяснено примесным фазообразованием. При дальнейшем увеличении доли замещения изменение параметров кристаллической решетки обусловлено примесным фазообразованием. В качестве примесной фазы для образцов с долей замещения x = 0,4–0,6 выступает оксид висмута (Bi_2O_3). Магнитные свойства изменяются нелинейно (рисунок 1). При доле замещения x = 0,1 намагниченность насыщения (M_s) составляет 61,33 emu/g, при x = 0,2 — 59,81 emu/g, а для x = 0,3 — 65,99 emu/g. При дальнейшем увеличении доли замещения намагниченность насыщения снижается из-за примесного фазообразования. Нелинейное изменение намагниченности насыщения при доле замещения x = 0,1–0,3 обусловлено конкурирующим замещением в подрешётках с ферромагнитным упорядочиванием (12k, 2a и $4f_1$) и подрешётках с антиферромагнитным упорядочиванием ($4f_2$ и 2b).

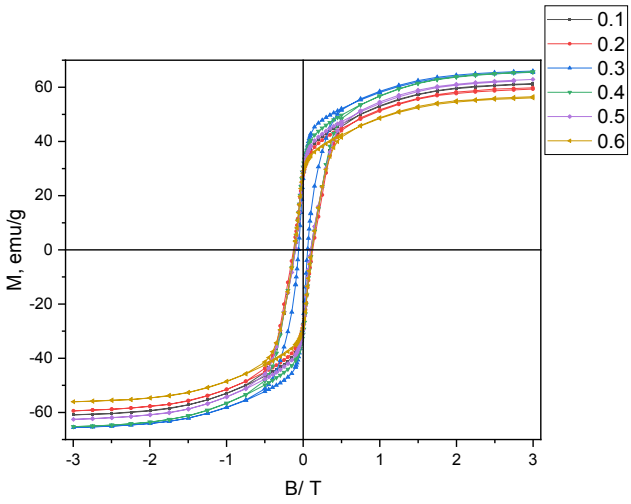


Рисунок 1. Полевые зависимости удельной намагниченности твердых растворов $BaFe_{12-x}Bi_xO_{19}$

Синтез, структура и свойства $BaFe_{12-x}Me_xO_{19}$ (Me=Al, Ga), изученные методами рентгеновской дифракции, Мессбауэроской спектроскопии, дифракции нейтронов

С. А. Гудкова[1]*, И.А. Солизода [1], В.Е. Живулин [2], С.А. Агафонов [3] и Д.А. Винник[1,2,4]
[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер. 9, 141701 г.Долгопрудный, Россия,*
**e-mail: svetlanagudkova@yandex.ru*
[2]*Южно-уральский государственный университет (Научно-исследовательский университет), пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия*
[3]*НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, 1, 123182 г. Москва, Россия*
[4]*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Университетский пр. 2, 198504 г. Петергоф, Россия*

Гексаферриты бария находят свое применения в различных областях электроники благодаря высокой анизотропии свойств. Кристаллическая решетка гексагональных ферритов позволяет расширять диапазон необходимых характеристик путем замещения ионов. Замещение центрального иона изменяет преимущественно электрические свойства, в то время как замещение ионов железа меняет магнитную подрешетку. Точное определение позиции замещения дает возможность расчета ожидаемых магнитных характеристик. Однако, методы расшифровки рентгеновской дифракции и дифракции нейтронов дают вероятностные сведения о позиции допанта, что неприемлемо для использования этих данных в реальных приборах. Для замещения немагнитными ионами авторы данной работы предлагают методику однозначного определения позиции допанта для структуры $BaMexFe_{12-x}O_{19}$, где x кратен 0.5, а Me немагнитный ион.

Суть метода заключается в сочетании метода Мессбауэровской спектроскопии, теоретического расчет дифрактограмм магнитной подрешетки и экспериментальных данных дифракции нейтронов. По экспериментальным данным дифракции нейтронов гексаферрита в ферримагнитном и парамагнитном стоянии определяется набор рефлексов, относящихся к магнитной подрешетке. Далее для данных плоскостей расчитываются интенсивности магнитной подрешетки и сравниваются с результатами эксперимента. Различия в теоретической и экспериментальной интенсивности рефлексов выявляют плоскости, содержащие немагнитные допанты. Пересечение таких плоскостей в кристаллической решетке дает информацию о координатах допанта. В случае, если на линиях пересечения плоскостей ионов больше, чем x, исключаются те ионы, которые имеют отличное кислородное окружение, чем определенное методом Мессбауэровской спектроскопии. Гексаферриты содержат ионы железа в 5 кристаллографически различных позициях, таких как *12k, 2a, 4f1, 4f2, 2b*. На основе данных Мессбауэровской спектроскопии определяется кислородное окружение позиции, в которой отсуствует ион железа.

Предложенный метод опробирован на гексагональных ферритах бария $BaMe_xFe_{12-x}O_{19}$, где Me = Al, Ga, x = 1 – 4 [1,2].

Список использованных источников

[1] S.A. Gudkova. Cer. Int. (2025) – in press.
[2] S.A. Gudkova. JMMM 603 (2024) 172229.

Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы карбоплатин-аминолевулиновая кислота-фуллеренол

Е.А. Дикусар[1*], А.Л. Пушкарчук[1], Е.А. Акишина[1], Т.В. Безъязычная[1], А.Г. Солдатов[2], С.А. Кутень[3], Д.В. Ермак[3], Т.С. Пивоварчик[3,4], Д.Б. Мигас[4], А.П. Низовцев[5], С.Я. Килин[5], В.И. Поткин[1]

[1]*Институт физико-органической химии НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь,*
**e-mail: evgen_58@mail.ru*
[2]*Научно-практический центр по материаловедению НАН Беларуси, г.Минск, Беларусь*
[3]*Институт ядерных проблем БГУ, г. Минск, Беларусь*
[4]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Беларусь*
[5]*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, г.Минск, Беларусь*

Методом квантово-химического моделирования с уровнем теории HF-3c/MINIS/MINIS1+1(d)(Cl)/def2-SV(P)ECP(Pt), учитывающим межмолекулярное взаимодействие с использованием программного пакета ORCA 5.03, изучено электронное строение и энергия связывания аддуктов карбоплатин-аминолевулиновая кислота-фуллеренол, а также их трехкомпонентных систем. Путем анализа полных энергий систем и расчетных диаграмм энергий высших занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей как исходных компонентов, так и образуемых ими молекулярных ансамблей, сделаны выводы о наиболее вероятных по устойчивости их сочетаниях. Выявлены особенности синергетических эффектов и намечены перспективы использования трехкомпонентной системы карбоплатин–аминолевулиновая кислота–фуллеренол $C_{60}(OH)_{24}$ при проведении химиотерапии в онкологической практике (рис. 1).

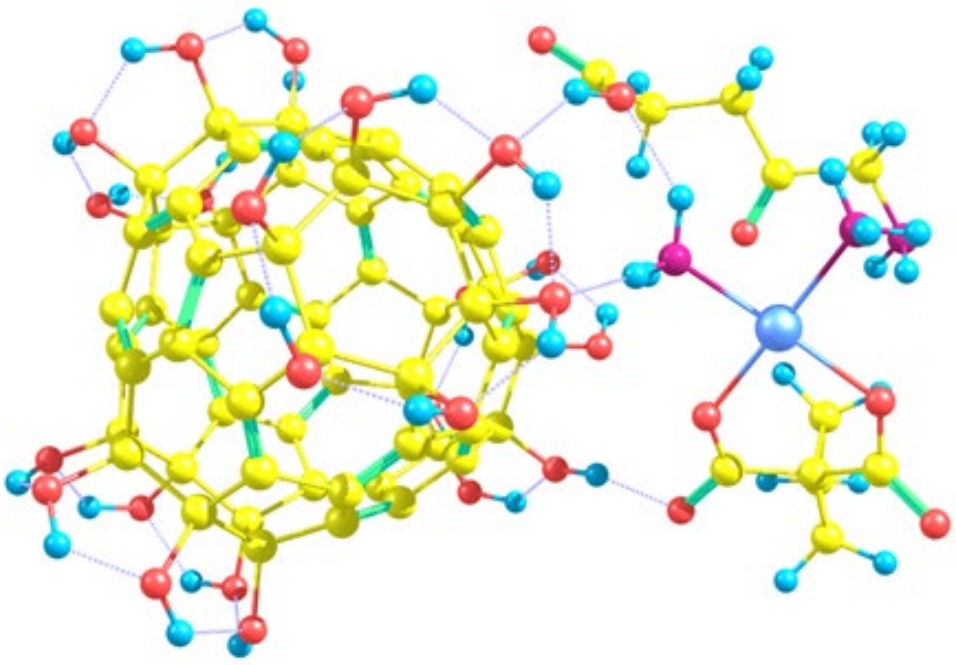


Рисунок 1. Оптимизированная структура связанной водородными связями трехкомпонентной системы карбоплатин-аминолевулиновая кислота-фуллеренол

Работа выполнена при финансовой поддержке программы «Конвергенция 2025».

Технологические основы получения функциональных наноструктур с управляемыми характеристиками

А.А. Дронов*, Ю.В. Назаркина, О.В. Воловликова, Д.А. Дронова, И.М. Гаврилин, Т.П. Савчук, Д.Д. Бутманов, Д.Г. Громов, С.А. Гаврилов

*Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, дом 1, 124498 г. Зеленоград, Россия, *E-mail: noiz@mail.ru*

Научно-исследовательская лаборатория «Технология наноматериалов» Национального исследовательского университета «Московский институт электронной техники» более 10 лет занимается проблемой синтеза наноструктурированных материалов и их использования в устройствах генерации, преобразования и хранения энергии, а также в микро-, нано-, опто- и функциональной электроники. Основными направлениями работы лаборатории являются разработка новых функциональных наноматериалов для металл-ионных аккумуляторов, топливных элементов, устройств фотовольтаики и фотокатализа, суперконденсаторов, термоэлектрических генераторов, сенсоров и устройств гибкой электроники.

В данной работе описаны основные научные результаты деятельности лаборатории, включая исследования термодинамических подходов к описанию механизмов формирования и свойств таких материалов как слои пористого кремния (por-Si) [1,2], пористый анодный оксид алюминия (ПАОА) и нанокомпозиты на его основе [3,4], наночастицы и тонкие пленки [5], нитевидные нанокристаллы германия, полученные электрохимическим методом из водных растворов [6], и области их применения. Описаны электрохимические методы получения и методики прецизионного анализа состава и структуры пористого анодного оксида титана и их влияние на фото- и электрокаталитические свойства [7-11]. Технологии формирования слоев на основе Mo-Si и Ta-Si для фазосдвигающих фотошаблонов [12].

Благодарность (финансирование)

Работа выполнена в рамках государственного задания 2023-2025 гг., соглашение FSMR-2023-0003.

Список использованных источников:

[1] S. A. Gavrilov [и др.] Semiconductors 36 (1) (2002) 98–101.
[2] О. В. Пятилова [и др.] Физика и Техника Полупроводников 51(2) (2017)182.
[3] S. A. Gavrilov Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters 70 (3), Aug. 1999, pp. 216–21.
[4] Yu. I. Shilyaeva [и др.] Physical Chemistry Chemical Physics 16 (36) (2014) 19394.
[5] D. G. Gromov [и др.] Physics of the Solid State 51(10) (2009) 2135–44.
[6] I. M. Gavrilin [и др.] Journal of Electroanalytical Chemistry 888 (2021) 115209.
[7] S. Lemeshko [и др.] Nanotechnology 12 (3) (2001) 273–76.
[8] A. Dronov [и др.] Appl. Surface Science 434 (2018) 148–54.
[9] I. Gavrilin [и др.] Appl. Surface Science 516 (2020) 146120.
[10] D. Butmanov [и др.] Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures 146 (2023) 115533.
[11] T.P. Savchuk [и др.] Catalysis Commun. 187 (2024) 106907.
[12] D.G. Gromov [и др.] Russian Microelectronics 53 (7) (2024) 641–49.

Процесс функционализации одностенных углеродных нанотрубок n - бутилбороновой кислотой для создания биологически чувствительного материала для сенсоров

П.А. Едельбекова[1,2] *, Ю.П. Шаман[1,3], и А.Ю. Герасименко[1,2]

*[1]Институт нанотехнологий микроэлектроники Российской академии наук, Ленинский пр., д. 32А., 119334 г. Москва, Российская Федерация, *e-mail: edelbekova.p@inme-ras.ru*
[2]Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, д. 1, 124498, г. Зеленоград, г. Москва, Российская Федерация
[3]Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-производственный комплекс «Технологический центр», пл. Шокина, д. 1 стр.7, 124498 г.Зеленоград, г. Москва, Российская Федерация,

Углеродные нанотрубки (УНТ), активно изучаемые в последние 20 лет, вызывают значительный интерес в области биосенсорики благодаря своей наноразмерной структуре, обширной площади поверхности, химической стабильности и выдающейся электропроводности [1]. Иммобилизированная на поверхности УНТ бороновая кислота, имеет высокое сродство к цис-диольной группе глюкозы, чем обеспечивают чувствительность композитного материала к гликированным белкам, таким как HbA1c [2].

В ходе данной работы была проведена функционализация УНТ торговой марки Tuball, стабилизированных дезоксихолатом натрия, n-бутилбороновой кислотой. Для контроля функционализации использовались методы колебательной спектроскопии, а также сканирующая электронная микроскопия.

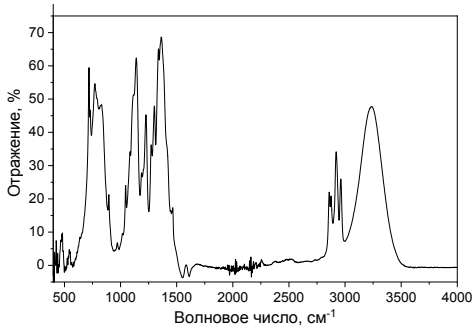


Рисунок 1. ИК-спектр хлопьев n-бутилбороновой кислоты

Данный функциональный материал представляет интерес в качестве функционального материала чувствительного элемента сенсора гликированного гемоглобина и других веществ, содержащих моно- и полисахариды.

Список используемых источников
[1] D.C. Ferrier [и др.] Biosensors 11(12) (2021) 486.
[2] H. Lin, Sensors 17(8) (2017) 1–18.

Гетероструктуры на основе легированного/нелегированного оксида цинка (n-ZnO) и кремния (p-Si) для солнечных элементов

Ш.Б. Утамурадова[1], С.А. Музафарова[1], А.С. Есбергенова[1]*
[1]*Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана им. Мирзо Улугбека, ул Янги Алмазар, д. 20, 100057 г.Ташкент, Узбекистан, *e-mail: amugul@mail.ru*

Солнечная энергия - это возобновляемая экологически чистая энергия, а фотоэлектрическая один из наиболее эффективных способов прямого преобразования солнечного света в электричество с помощью полупроводниковых солнечных элементов. Для повышения эффективности гетерогенных кремниевых тонкопленочных солнечных элементов применяются прозрачные проводящие оксиды [1].

Прозрачные проводящие оксиды, такие как оксид индия-олова (ITO), SnO_2, ZnO, (transparent conductive oxides - далее TCO) относятся к классу материалов, которые уникальны в том смысле, что два, казалось бы, противоречивых свойства – электропроводность и оптическая прозрачность - сосуществуют в одном материале. Это особое свойство *делают* их особенно интересными в качестве прозрачных проводящих электродов или функциональных слоев в оптоэлектронных устройствах.

Оксид цинка ZnO и ZnO:Al становится альтернативой дорогостоящему оксиду индия-олова (ITO) и нетоксичным, в то время, как Cd-содержащие TCO потенциально опасны для здоровья.

Интеграция ZnO (широкозонный 3,37 эВ) и Si (узкозонный 1,1 эВ) может открыть возможности для реального сочетания (взаимодополнения) уникальных функциональных возможностей, так оксид цинка обеспечивает превосходные оптические характеристики и стабильность при высоких температурах и, в то время как кремний обеспечивает высокую подвижность носителей и простоту интеграции в сложные схемы [2].

В данной работе показана возможность получения тонких сплошных пленок легированного (Al) и нелегированного оксида цинка методом реактивного магнетронного ионного распыления на поверхности подложек монокристаллического кремния. Полученные гетероструктуры с буферным слоем из оксида цинка состоят из вертикально ориентированных кристаллитов оксида цинка, образующих компактную сплошную пленку. Проведены измерения оптических и электрических свойств полученных гетероструктур Si/ZnO и Si/ZAO. Показано, что пленки легированного и нелегированного оксида цинка демонстрируют фотолюминесценцию в видимом диапазоне электромагнитного спектра с максимумом на длине волны 600–700 нм, которая связана с наличием структурных дефектов, и в ближнем УФ- диапазоне с максимумом около 380 нм, связанную с излучательной межзонной рекомбинацией. Удельное сопротивление Si/ZnO 0,7 Ом·см, а Si/ZAO 5.4×10^{-4} Ом·см. Благодаря низкому удельному сопротивлению и люминесцентным свойствам, полученных сплошных кристаллических пленок легированного и нелегированного оксида цинка, они могут быть использованы в качестве прозрачных проводящих электродов или функциональных слоев в оптоэлектронных устройствах.

Список использованных источников:

[1] D. Song. Zinc oxide TCOs and polycrystalline silicon thin-films for photovoltaic applications.
[2] Y. Yang. Research of Silicon and Zinc Oxide. Dean&Francis. ISSN 2959-6157.

Определение оптимальных параметров плазменно-электролитической обработки для синтеза композитных покрытий на магниевом сплаве AZ61

А. Л. Желудкевич[1]*, С.А. Карпушенков[1,2], Л.С. Карпушенкова[1], А.В. Куницкий[2], А.В. Коновалова[1], О.В. Игнатенко[1]

*[1]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П.Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, * e-mail: zheludkevich27@gmail.com*
[2]Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 г. Минск, Беларусь

Синтез оксидно-композитных покрытий на поверхности магниевого сплава AZ61 проводили методом плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО) в электролитах на основе фосфата и алюмината натрия.

При проведении оксидирования магниевого сплава было установлено, что равномерные покрытия формировались в алюминатном электролите в течение 5 мин при плотности тока 100 мА/см^2 в интервале напряжений от 400 до 450 В. Процесс ПЭО характеризуется несколькими стадиями и видом искровых разрядов (см. рис.1): стадия обычного анодирования (I), стадия мелкого искрения (II), стадия среднего и крупного искрения (III) и стадия дуговых разрядов (IV). Из полученных данных были определены три оптимальных усредненных значения напряжения искрового оксидирования: 400, 425 и 450 В, соответствующие искровым режимам II, III и IV.

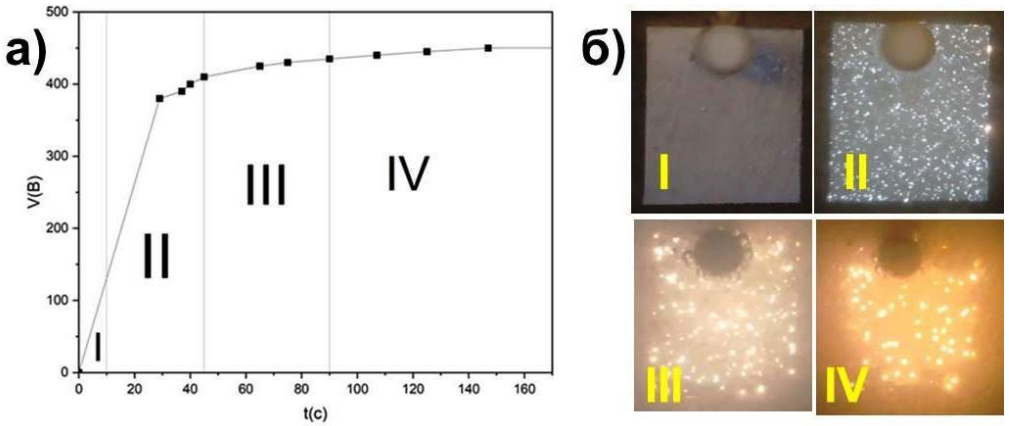


Рис.1. Зависимость изменения напряжения от времени оксидирования (а) и вид искровых разрядов в каждом режиме оксидирования (б)

Рентгенофазовый анализ показал, что все три типа ПЭО покрытий содержат мелкокристаллическую фазу алюмината мания $MgAl_2O_4$, т.е. имеют оксидно-композитную структуру смеси мелкокристаллических оксидов магния и алюминия с рентгеноаморфной составляющей.

В результате проведенной работы на поверхности магниевого сплава AZ61 в алюминатно-щелочном электролите синтезированы оксидно-композитные покрытия с характерной развитой морфологией поверхности, для синтеза которых определены алюминатный состав электролита и три оптимальных режима искровых разрядов. Установленные режимы ПЭО обработки могут использоваться для синтеза и дальнейшей модификации ПЭО покрытий на поверхности магниевого сплава AZ61 с различными функциональными добавками с целью получения новых функциональных композиционных материалов с требуемыми свойствами.

Роль концентрации электролита и напряжения оксидирования для синтеза титан-оксидных структур с каталитической активностью на поверхности алюминиевого сплава АА2024

А. Л. Желудкевич*, С. А. Карпушенков, Л. С. Карпушенкова, О. Ф. Минчукова, А. В. Коновалова, О. В. Игнатенко

ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П.Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: *zheludkevich27@gmail.com*

Методом плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО) в водном растворе калий-титанилщавелевокислого синтезированы титан-оксидные композитные покрытия на поверхности технически чистого алюминия. При проведении ПЭО обработки алюминия определены 4 режима оксидирования по характеру искровых разрядов в зависимости от приложенного напряжения (см. рис. 1). При проведении ПЭО процесса были выделены три установленных значения оксидирования, а также оптимальные плотность тока и концентрация электролита, которые соответствуют II-IV режимам ПЭО обработки: $C_{эл}$ = 0,01 М, J = 100 мА/см^2, U = 490, 510, 530 В.

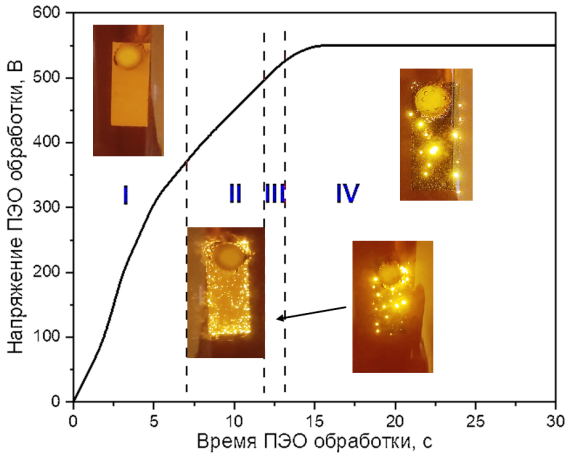


Рис.1. Зависимость напряжения от времени ПЭО обработки и вид искровых разрядов при ПЭО обработке

Полученные ПЭО покрытия обладают характерным развитым микрорельефом и пористостью, которые сильно зависят от установленного напряжения оксидирования. Методами рентгенофазового анализа и Рамановской спектроскопии было установлено, что титан-оксидные покрытия состоят не только из диоксида титана, но также содержат соединения из оксида титана Ti_2O_3 (III) и смешанного соединения $TiAl_2O_5$.

Для оценки каталитической активности были получены спектры флуоресценции титан-оксидных покрытий. Было установлено, что покрытия, синтезированные в словиях крупных искровых микроразрядов при 550 В (покрытия сине-фиолетового цвета), проявляют большую каталитическую активность. ПЭО покрытия, полученные в режимах более мелких искровых разрядов (430 и 490 В), проявляют значительно меньшую активность, что видимо обусловлено преобладанием в их составе Al_2O_3.

Синтезированные покрытия могут в дальнейшем также применяться в качестве основы для последующего нанесения слоев с фотокаталитическими свойствами с обеспечением улучшенных антикоррозионных свойств, увеличенной удельной поверхностью, твердостью и износостойкостью.

Благодарности: Работа поддержана Белорусским Республиканским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № Т25МЭ-013).

Взаимосвязь фотолюминесценции и химического травления тонких пленок $Cu_2ZnSnSe_4$

В.Д. Живулько[1*], О.М. Бородавченко[1], А.В. Мудрый[1], И.А. Могильников[2], М.А. Сулимов[2,3], И. Форбс[4], и М.В. Якушев[2,3,5]

[1]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, г. Минск, Беларусь,
**e-mail: zhivulko@physics.by*
[2]Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
[3]Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[4]Нортумбрийский университет, г. Ньюкасл, Великобритания
[5]Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

В настоящее время прямозонные полупроводники $Cu_2ZnSnSe_4$ (CZTSe) и твердые растворы $Cu_2ZnSn(S,Se)_4$ (CZTSe) со структурой кестерита являются одними из наиболее перспективных материалов для современной фотовольтаики [1]. Коэффициент полезного действия (к.п.д.) солнечных элементов, создаваемых на основе тонких пленок CZTSe и CZTSSe составляет ~ 12.5 – 15,1 % [1,2].

В работе исследовались тонкие пленки CZTSe в составе солнечного элемента со структурой ZnO/CdS/CZTSe/Mo/стекло. Пленки CZTSe наносились на покрытые молибденом натриевые стекла двухстадийным методом селенизации металлических прекурсоров. Перед нанесением слоя CdS пленки CZTSe подвергались химическому травлению в растворе KCN с различной продолжительностью. Оптические свойства полученных солнечных элементов исследовались методом фотолюминесценции (ФЛ) при возбуждении твердотельным лазером с длиной волны 532 нм. Измерения спектров ФЛ базовых поглощающих слоёв CZTSe проводились в специальном оптическом криостате при температуре 4,2 K на спектроскопическом комплексе, созданном в лаборатории оптической спектроскопии полупроводников ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению» на базе дифракционного монохроматора МДР-23У. Рентгеноструктурные исследования проводились на дифрактометре ADANI POWDIX600 с использованием CuK_λ-излучения, при комнатной температуре в интервале углов дифракции 2Θ ~ 15 – 80° в режиме сканирования с шагом 0,02° и временем накопления сигнала 3 секунды.

На основании структурных и оптических характеристик солнечных элементов, подготовленных при различных режимах химического травления, было установлено, что обработка не повлияла на структурные характеристики CZTSe и на основные параметры механизма излучательной рекомбинации. Тем не менее химическая обработка повлияла на интенсивность ФЛ тонких пленок CZTSe. Предполагается, что травление уменьшило концентрацию центров безызлучательной рекомбинации. Данный факт положительно влияет на эффективность солнечных элементов.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ Ф24–010, ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Физика конденсированного состояния и создание новых функциональных материалов и технологий их получения», задание 1.4.4 и «Спин» № АААА-А18-118020290104-2.

Список использованных источников

[1] M.A. Green [и др.] Prog. Photovolt. Res. Appl. 32(7) (2024) 425 – 441.
[2] J. Li [и др.] Advanced Materials. 32 (52) (2020) 202005268.

Магнитосопротивление на постоянном и переменном токе в селенидах марганца замещенных тулием

О.Б. Романова[1], С.С. Аплеснин[1,2], А.М. Живулько[3*], Л.В. Удод[1]
[1]*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Академгородок 50, стр.38, 660036 г. Красноярск, Россия*
[2]*Сибирский государственный университет науки и технологий им. академика М.Ф. Решетнева, пр. им. газеты Красноярский рабочий, 31, 660037 г. Красноярск, Россия*
[3] *ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: alyona_panasevich@mail.ru*

Обнаружение влияния магнитного поля на электросопротивление в исходных соединениях сульфида марганца [1] и селенида тулия [2], позволило предположить о возможности реализации значительной величины магнитотранспортных эффектов и в синтезированной на их основе системе $Tm_XMn_{1-X}Se$. Интерес к исследованию электрических свойств в магнитном поле для халькогенидных соединений остается до сих пор, что вызвано перспективностью практического применения, а именно при создании оперативной памяти и магниторезистивных датчиков. Цель данной работы - установить влияние магнитного поля и его механизм на транспортные характеристики на постоянном и переменном токе в халькогенидах марганца допированных тулием с переменной валентностью.

Поликристаллические образцы системы $Tm_XMn_{1-X}Se$ ($0,025 \le X \le 0,2$) синтезированы методом твердофазной реакции в вакуумированных кварцевых ампулах в однозонной печи сопротивления. При изоструктурном замещении селенида марганца тулием с переменной валентностью установлено сохранение гранецентрированной кубической структуры типа NaCl пространственной группы *Fm3m* (225), характерной для моноселенида марганца согласно данным рентгеноструктурного и микроструктурного анализа. Найден интервал температур с активационным уменьшением времени релаксации при нагревании и изменение энергии активации с ростом концентрацией ионов тулия. Для концентраций ионов тулия, превышающих концентрацию протекания ионов по ГЦК решетке ($X_c=0,17$), установлен дырочный тип носителей тока. Найден смешанный тип проводимости (электронный и дырочный) и малая величина подвижности носителей заряда в интервале концентраций $X=0,05 \div 0,1$, где константа Холла меняет знак. В области протекания ионов тулия по решетке определен максимум магнитосопротивления, связанный с локализацией электронов в магнитном поле в окрестности заряженных примесей. Найдено качественное отличие импеданса от электросопротивления на постоянном токе в магнитном поле для $X=0,025$ при температурах ниже комнатной и для $X=0,2$ выше комнатной температуры, обусловленное реактивной частью и магнитоемкостным эффектом. Обнаружено, что увеличение емкости в магнитном поле приводит к уменьшению импеданса.

Благодарность (финансирование).
Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Список использованных источников.
[1] С.С. Аплеснин [и др.] ФТТ 49 (2007) 1984.
[2] P. Haen [и др.] JMMM 15-18 (1980) 989.

Зависимость фазового состава поверхностного модифицированного слоя, сформированного при ионно-плазменной обработке, от размера зерна в аустенитной нержавеющей стали

Е.А. Загибалова[1]*, Е.Г. Астафурова[1], и К.Н. Рамазанов[2]
[1]*ИФПМ СО РАН, пр. Академический, 2/4, 634021 г. Томск, Россия,*
**e-mail: zagibalova.elena@ispms.ru*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076, г. Уфа, Россия*

Аустенитные нержавеющие стали (АНС) обладают рядом положительных свойств, но низкие прочностные свойства ограничивают их использование при производстве деталей/изделий с повышенным требованиями к треботехническими характеристиками. Ионно-плазменная обработка (ИПО) позволяет решить эту проблему [1]. Фазовый состав и глубина насыщения материала атомами внедрения при ИПО определяются как параметрами самого процесса насыщения (температурой, давлением, продолжительностью, составом газов), так и микроструктурой обрабатываемой стали [1]. В работе исследовали влияние размера зерна на особенности фазовых превращений и микротвердость поверхностных модифицированных слоев аустенитной нержавеющей стали, сформированных методом ионно-плазменной обработки. Для этого с помощью термомеханических обработок была изготовлена серия образцов аустенитной стали 01Х17Н13М3 с разным размером зерна: 3,7 ± 2,4 мкм (мелкое зерно, М31); 5,9 ± 3,9 мкм (мелкое зерно, М32) и 54,7 ± 31,2 мкм (крупное зерно, КЗ). Все образцы подвергали ИПО при Т=550 ± 10°С в смеси газов N_2(25%)+C_2H_2(5%)+Ar(70%) в течение 12 часов (300 Па).

После ИПО образцы имеют близкие значения толщины поверхностного модифицированного слоя, насыщенного атомами внедрения (N, C). Она составляет 40–48 мкм, но распределение азота и углерода по глубине и фазовый состав упрочненных слоев различны. В модифицированных слоях КЗ образца формируется микроструктура, для которой характерны высокая концентрация атомов N и C в твердом растворе аустенита (Fe-$\gamma_{N,C}$, a = 0,3653-0,3674 нм), формирование частиц Fe_4(N,C) внутри зерен и выделение фазы Cr(N,C) по границам. Образцы с высокой плотностью границ зерен (М31 и М32) более склонны к распаду аустенитной фазы Fe-$\gamma_{N,C}$ с образованием зернограничных и внутризеренных фаз Cr(N,C) и Fe-α, но при этом концентрация атомов внедрения в аустенитной фазе остается высокой Fe-$\gamma_{N,C}$ (a = 0,3597-0,3622 нм).

Установлено, что вызванное ИПО твердорастворное упрочнение и дисперсионное твердение способствует повышению поверхностной твердости образцов. При рассмотрении профилей микротвердости, полученных с попередных сечений ИПО-образцов, показано, что максимальное значение микротвердости для всех трех типов образцов наблюдалось вблизи поверхности насыщения, где концентрации атомов внедрения наибольшая (М31 – 14,6 ГПа; М32 – 15,3 ГПа; КЗ – 15,3 ГПа). Независимо от размера зерна значения микротвердости постепенно уменьшаются при перемещении вглубь образца до достижения исходных значений (М31 – 3,2 ГПа; М32 – 3,4 ГПа; КЗ – 3 ГПа), так как по мере удаления от поверхности насыщения концентрации атомов внедрения (N, C) в образцах АНС снижается. Установлено, что плотность границ зерен влияет на форму профиля распределения микротвердости по глубине образца, что вызвано различиями в фазовом составе материала с разным размером резна.

Благодарность (финансирование). Исследования выполнены при частичной поддержке проекта государственного задания FWRW-2022-0005 и на оборудовании ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

Список использованных источников:

[1] V.A. Moskvina [и др.] RPhJ. 823 (2021) 141777.

Первопринципное и Монте-Карло моделирование магнитных свойств сплавов Fe-*Me* (*Me* = Al, Ga) с малым содержанием *Me*

М. А. Загребин[1]*, И. А. Маркович[2], А. С. Кузнецов[1], М.В. Матюнина[1], В.В. Соколовский[1], и В.Д. Бучельников[1]
[1]*Челябинский государственный университет, ул. Братьев Кашириных, 129, 454001 г. Челябинск, Россия, *e-mail: miczag@mail.ru*
[2]*Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия,*

Многофункциональные соединения на основе железа представляют интерес благодаря своим необычным механическим, магнитным, электрическим и магнитострикционным свойствам [1]. Добавление в структуру α-Fe немагнитных атомов Al, Ga, Ge приводит к существенному увеличению величины магнитострикции в сплавах относительно чистого железа [2]. В диапазоне содержания немагнитных атомов от 0 до 10 ат.% фазовые диаграммы сплава Fe-*Me* (*Me* = Al, Ga, Ge) имеют схожий вид и характеризуется наличием неупорядоченной структуры *A*2 (группа симметрии № 229), в которой температура Кюри слабо уменьшается [3]. В данной работе проводится анализ влияния параметра кристаллической решетки на магнитных свойства сплавов $Fe_{100-x}Me_x$ (*Me* = Al, Ga, $0 \le x \le 14$).

Все расчеты выполнены с использованием теории функционала плотности, реализованной в пакете SPR-KKR (spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker code) [4]. Для обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенное градиентное приближение в виде функционала PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [5]. В работе исследовалась разупорядоченная структура *A*2. Расчеты проводились для значений параметра кристаллической решетки $2.7 \le a \le 3.0$ Å и содержания атомов Fe $0 \le x \le 14$. Были вычислены распределения параметра магнитного обменного взаимодействия между ближайшими соседними атомами Fe вычисленные в зависимости от параметра кристаллической решетки a и содержания Fe x (Рис. 1). Из рисунка видно, что величина параметров магнитного обменного взаимодействия имеет нелинейный характер зависимости как от содержания Fe, так и параметра кристаллической решетки.

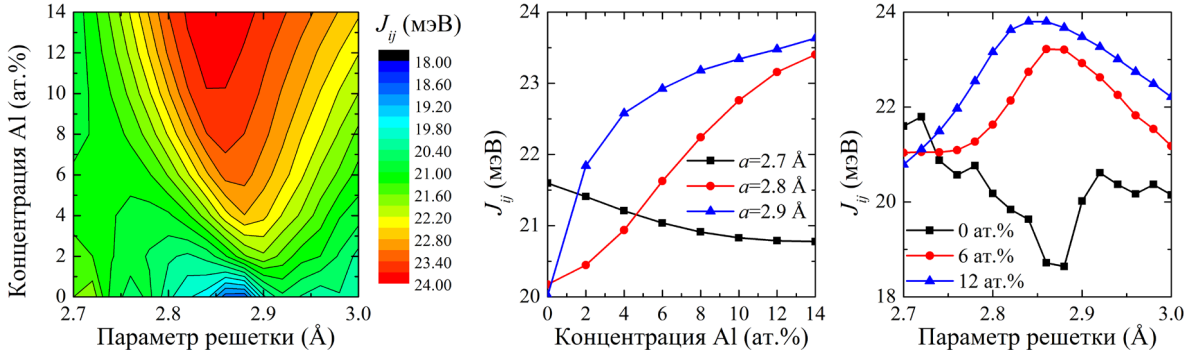


Рис. 1. Распределение параметра магнитного обменного взаимодействия между ближайшими соседними атомами Fe в зависимости от параметра кристаллической решетки a и содержания Fe x.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) проект № 24-22-20086, https://rscf.ru/project/24-22-20086/.

Список использованных источников:

[1] И.С. Головин [и др.] ФММ 121 (2020) 937-980.
[2] A.E. Clark [и др.] IEEE Trans. Magn. 36 (2000) 3238.
[3] O. Kubaschewski. Iron-Binary phase diagrams. Springer-Verlag (1982) 185.
[4] H. Ebert [и др.] Rep. Prog. Phys. 74 (2011) 096501.
[5] J.P. Perdew [и др.] Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865–3868.

Взаимодействие Дзялошинского-Мория в мультиферроиках-манганатах RMn_2O_5

И. А. Зобкало*
Петербургский институт ядерной физики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Орлова Роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия,
e-mail: zobkalo_ia@pnpi.nrcki.ru

Магнитные взаимодействия в орторомбических редкоземельных оксидах марганца RMn_2O_5 вызывают большой интерес в связи с магнитоэлектрическими свойствами этого семейства. Электрическая поляризация в них возникает за счет упорядочения магнитных ионов марганца, при этом в RMn_2O_5 существуют две марганцевые системы: одна образована ионами Mn^{3+}, расположенными вблизи основания кислородной пирамиды, и вторая – ионами Mn^{4+} - в окружении кислородных октаэдров.

Для объяснения мультиферроичности RMn_2O_5 чаще используется модель симметричной обменной стрикции [1], которая связана с почти коллинеарным магнитным порядком. Однако существуют экспериментальные данные, позволяющие предположить, что в качестве магнитного механизма, обеспечивающего возникновение ферроэлектрической поляризации, следует также рассматривать модель «обратного эффекта Дзялошинского-Мория (ДМ)», в которой атомные смещения обусловлены минимизацией энергии взаимодействия ДМ, т.е. антисимметричная стрикция [2].

Для экспериментального уточнения применимости той или иной модели для описания механизмов мультиферроичности в этих соединениях были исследованы монокристаллы RMn_2O_5 (R = Eu, Tb, Nd) [3 - 6] с помощью дифракции поляризованных нейтронов.

Результаты, полученные для всех измеренных кристаллов, указывают на наличие хирального вклада в магнитное рассеяние в этих системах. Так, измерения интенсивности рассеянных нейтронов для двух направлений поляризации падающих на кристалл нейтронов, выполненные на $TbMn_2O_5$, показывают наличие хирального рассеяния в трех магнитно упорядоченных фазах [4]. Хиральное рассеяние наблюдалось также в соединениях $EuMn_2O_5$ [3], $NdMn_2O_5$ [5] и $Nd_{0.8}Tb_{0.2}Mn_2O_5$ [6]. Определяя направление закручивания магнитных спиралей в этих кристаллах, именно антисимметричное взаимодействие ДМ обеспечивает наличие хирального вклада в магнитное рассеяние. Более того, этот тип рассеяния отсутствовал при тех температурах, при которых отсутствует электрическая поляризация. О связи антисимметричного ДМ-взаимодействия с электричеством свидетельствует и тот факт, что в ходе исследований удалось изменить заселенность хиральных доменов путем приложения внешнего электрического поля [4 - 6].

Проведенные расчеты позволили сделать оценку энергии ДМ-взаимодействия в соединениях RMn_2O_5.

Список использованных источников:
[1] P.G. Radaelli [и др.] J.Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 434213.
[2] I.A. Sergienko [и др.] Phys. Rev. B 73 (2006) 094434.
[3] I.A. Zobkalo [и др.] Solid State Phys. 38 (1996) 725.
[4] I.A. Zobkalo [и др.] J. Phys.: Condens. Matter 30 (2018) 205804.
[5] I.A. Zobkalo [и др.] Phys. Rev. B 101 (2020) 064425.
[6] I.A. Zobkalo [и др.] IEEE Trans. Magn. 58 (2022) 1.

Температурная зависимость электропроводности заряженных доменных стенок в химически восстановленных кристаллах ниобата лития

А. М. Кислюк*, И. В. Кубасов, А. В. Турутин, В. П. Иванов, А. А. Темиров, В. В. Куц, М. Д. Малинкович, и Ю. Н. Пархоменко
Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1.,119049 г. Москва, Россия,
E-mail: akislyuk94@gmail.com

Заряженные доменные стенки (ЗДС) в сегнетоэлектрических материалах интересны как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения, так как они обладают электрофизическими свойствами, отличными от объёмных. В число перспективных устройств на основе резистивного переключения ЗДС входят устройства памяти и нейроморфные вычислительные системы. Перспективными для создания устройств, реализующих уникальные свойства ЗДС являются ниобат лития ($LiNbO_3$, LN), поскольку это модельный одноосный сегнетоэлектрик со 180º доменными стенками, обладает высокой температурой Кюри, температурной и химической стабильностью. Отсутствие в составе свинца и наличие на рынке пластин различных диаметров и кристаллических срезов с воспроизводимыми свойствами делают этот материал одними из наиболее технологически важных сегнетоэлектриков.

В образцах конгруэнтного монокристалла LN, кристаллографического Z-среза была сформирована бидоменная структура типа голова-к-голове методом высокотемпературного восстановительного отжига в бескислородной атмосфере в печи Saftherm STG-60-18. Переключение поляризации обусловлено аут-диффузией кислорода и оксида лития при отжиге при температурах, близких к температуре Кюри. На неполярной X-стороне образца методом электронно-лучевого напыления были нанесены титановые электроды, покрывающие монодоменные области кристалла и области с ЗДС. Измерительный стенд включал в себя систему нагрева и термостабилизации образца, поддерживающей фиксированную температуру в интервале от 25 до 100 °C. Измерения токов проводились при помощи электрометра Keithley 6517B в интервале напряжений от -1000 В до 1000 В.

Исследована температурная зависимость вольт-амперных характеристик, полученных в области кристалла с и без ЗДС с шагом в 5 °C. Построены семейства ВАХ, снятых с использованием биполярного сигнала ступенчатой формы, с шагом 10 вольт и выдержкой 100 секунд при каждом напряжении. Получены значения энергии активации поляронной проводимости ≈0,49 эВ для монодоменной области и ≈0,28 эВ для области ЗДС.

Благодарность (финансирование)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-20303, https://rscf.ru/project/24-29-20303/.

Изучение влияния ионизирующего излучения на структурные особенности композитных керамик

А. Л. Козловский[1,2]*, Р. Б. Елшибеков[2]
[1]*Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, пр. Абылай хана 2/1, 010008 г. Астана, Казахстан, *e-mail: kozlovksiy.a@inp.kz*
[2]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, пр. Сатпаева, 2, 010008 г. Астана, Казахстан*

Расширение возможностей применения керамических композитных материалов в ядерной и термоядерной энергетике требует большого внимания, направленного на проведение экспериментов, выявляющих эволюцию поведения керамик в экстремальных условиях, включающих имитацию воздействий максимально приближенных к реальным условиям эксплуатации. Интерес к композитным керамическим материалам обусловлен в первую очередь возможностями сочетания свойств каждой компоненты, используемой в композите для повышения устойчивости к внешним воздействиям, а также увеличения сопротивляемости к механическим напряжениям, возникающим как с внешней стороны при внешних воздействиях на образцы, так и внутренних напряжений, вызванных структурными искажениями кристаллической структуры, возникающие при накоплении радиационных повреждений или вызванных процессами высокотемпературного окисления.

Цель данного исследования заключается в определении влияния вариации фазового состава композитных керамик на основе SiC – ZrO_2 на устойчивость к накоплению радиационных повреждений, вызванных воздействием тяжелых ионов, сравнимых с осколками деления ядерного топлива. Композитные керамики были получены с применением метода механохимического твердофазного перемалывания и термического спекания в муфельной печи, при этом вариация соотношения компонент позволила получить керамик с различным фазовым составом, вариация которого приводит к изменению прочностных характеристик, и как следствие, увеличению устойчивости к внешним воздействиям, вызванным облучением тяжелыми ионами и накоплением радиационно – индуцированных повреждений в приповерхностном слое. Определено, что изменение фазового состава керамик за счет вариации соотношения компонент приводит к увеличению сопротивляемости к охрупчиванию приповерхностного слоя, при этом ключевым механизмом сдерживания процессов разупрочнения является наличие межфазных границ в приповерхностном слое, удерживающих диффузию точечных и вакансионных дефектов вблизи границ.

Исследования влияния вариации фазового состава на теплофизические параметры композитных керамик

А. Л. Козловский[1,2]*, И. К. Тлеулесова[2]
[1]*Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, пр. Абылай хана 2/1, 010008 г. Астана, Казахстан, *e-mail kozlovksiy.a@inp.kz*
[2]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, пр. Сатпаева, 2, 010008 г. Астана, Казахстан*

Интерес к многокомпонентным оксидным керамикам, представляющим собой многофазные композиты, обусловлен в первую очередь достаточно большим потенциалом их применения в качестве материалов для экранирования ионизирующего излучения, а также созданию высокопрочных защитных покрытий, с возможностью эксплуатации их в экстремальных условиях. При этом, в последние несколько лет большое внимание в данном направлении исследований уделяется оценке возможности повышения устойчивости композитных керамик не только к внешним механическим воздействиям, но и термическому нагреву, который как известно, сопровождается процессами окисления и деструкции при длительном воздействии высоких температур.

В работе показаны результаты оценки изменений теплофизических параметров в композитных керамиках $(0.5–x)TeO_2–0.2WO_3–0.1Bi_2O_3–0.1MoO_3–0.1SiO_2–xCND$ в зависимости от вариации соотношения компонент оксидов в составе, а также результаты экспериментальных работ, направленных на изучение перспектив применения данных композитных керамик в качестве термобарьерных защитных покрытий, обладающих также высокой экранирующей способностью. В ходе проведенных экспериментальных работ было установлено, что изменение соотношения компонент путем вариации концентрации углеродных наноалмазов (CND) в составе керамик приводит к увеличению прочности керамик за счет возникновения армирующего эффекта. При этом изменение фазового состава при вариации основных компонент приводит к снижению теплопроводности, что в свою очередь увеличивает теплоизоляционные свойства. Результаты экспериментов на определение теплоизоляционных свойств показали, что полученные керамики позволяют сдерживать процессы теплопередачи в течение длительного времени, что позволяет рассматривать данный тип керамик как один из перспективных термобарьерных материалов, эксплуатирующихся в экстремальных условиях.

Примесный состав и катодолюминесценция HPHT- алмазов типа IIb с концентрацией бора от 0.03 до 60 ppm

В.А. Кравец[1]*, И.В Клепиков[2,3], Е.А. Васильев[4], Б.Е. Бураков[1], С.Н. Бочаров[5], К.Н. Орехова[1], П.А. Дементьев[1], и М.В.Заморянская[1]
[1] *ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия,*
**e-mail: vladislav2033@yandex.ru*
[2] *ООО «НПК «Алмаз», 197706 г. Санкт-Петербург, Россия*
[3] *Лаборатория «Алмазная СВЧ-электроника» РТУ МИРЭА, 119454 г. Москва, Россия*
[4] *Санкт-Петербургский Горный Университет, 199106 г. Санкт-Петербург, Россия*
[5] *ООО «НИЦ Передовые Синтетические Исследования», 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*

Алмаз типа IIb – это полупроводник с шириной запрещенной зоны 5.5 эВ и акцепторным уровнем 0.37 эВ замещающего углерод атома бора. В алмазах всех типов при возбуждении квантами с энергией более 5.5 эВ регистрируется также широкая бесструктурная «полоса А» в области 2.3-3.2 эВ. Природа люминесценции «полосы А» на сегодняшний день до конца не выяснена. Вероятно, что в этом диапазоне энергий присутствует наложение полос разного происхождения. Возможно, что «полоса А» обусловлена рекомбинацией электронов и дырок на парах донор-акцептор (DA). В предлагаемой модели центра люминесценции предполагается, что донором является димер азота, а акцептором - замещающий атом бора. Согласно другим моделям, эта полоса связана с собственными дефектами кристаллической структуры алмаза, в частности с sp2 гибридизацией электронных орбиталей на дислокациях и дефектах упаковки атомов углерода. Люминесценция алмазов типа IIb неоднократно изучалась, и в настоящее время признана ее рекомбинационная природа. Люминесцентные характеристики полосы должны зависеть от концентрации легирующей примеси (бор и азот), но систематические исследования затруднены сложностью контроля дефектно-примесного состава природных и синтетических алмазов.

Проведено исследование монокристаллических многосекторных пластин из HPHT-алмазов типа IIb методами локальной катодолюминесценции (CL) при температуре 77 К и ИК спектроскопии. Исследованы особенности катодолюминесценции секторов роста (100), (110), (113), (111) алмаза, выращенного по HPHT технологии. В люминесценции полосы с максимумом 2.3 эВ выделены две компоненты, находящиеся в зависимости от вида сектора роста с временами жизни в диапазонах - 1-13 μs и 19-115 μs соответственно. Время жизни полосы с максимумом 3.0 эВ меньше 100 ns. Сделано предположение, что каждая ростовая грань представляет собой отдельный люминесцирующий материал со своими характерными катодолюминесцентными свойствами. Построена диаграмма захвата примеси бора различными ростовыми гранями в условиях роста с низким содержанием азота. Показанно, что различные грани алмаза, обладают различной диффузионной длинной носителей заряда. Оценка диффузионной длинны производилась по распределению интенсивности катодолюминесценции в области взаимодействия электронного пучка собразцом.

Обратный магнитокалорический эффект в соединении системы Mn-Cu-Sb

А. С. Кузнецов[1]*, А. В. Маширов[1], К. А. Колесов[1], В.И. Митюк[2], и В. В. Коледов[1]
[1]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, ул.Моховая,1, стр.7, 125009 г. Москва, Российская Федерация,*
**email: kuznetsovalserg@gmail.com*
[2] *ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Республика Беларусь*

Особый интерес исследователей среди многофункциональных материалов, претерпевающих магнитные и магнитоструктурные фазовые превращения представляют соединения на основе Mn [1]. В частности, привлекательны сплавы, в которых фазовое превращение (ФП) осуществляется при низких и криогенных температурах. Одной из возможных композиций на основе Mn представляющих такой интерес, являются соединения системы Mn-Cu-Sb [2, 3].

В настоящей работе проведено исследование магнитных и магнитокалорических свойств соединения системы $Mn_{2-x}Cu_xSb$ (x = 0.25). Магнитные свойства поликристаллических образцов соединения $Mn_{2-x}Cu_xSb$, исследовались с помощью системы Cryogenics по индукционной методике. Измерения температурных зависимостей намагниченности *M(T)* осуществлялось в магнитных полях 1 Тл и 5 Тл диапазоне температур от 5 K до 290 K в режимах FC – FH, а также в низком магнитном поле 0.01 Тл в диапазоне от 40 K до 120 K в режиме ZFC. Полевые измерения намагниченности *M(H)* выполнялись в диапазоне температур от 40 K до 120 K в магнитных полях до 13.5 Тл. Исследование магнитокалорических свойств осуществлялось прямым методом измерения с помощью с сверхпроводящей криомагнитной системы в диапазоне температур от 40 K до 100 K в магнитном поле 5 Тл при адиабатическом намагничивании и размагничивании (рис. 1).

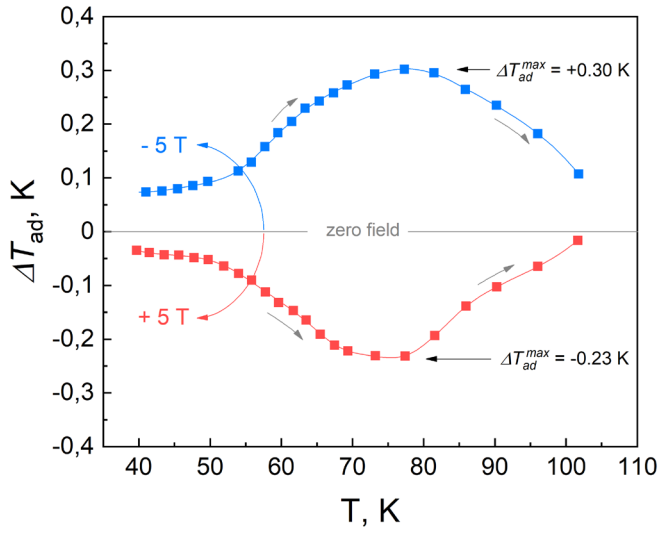


Рисунок 1. Значение МКЭ в зависимости от температуры в магнитном поле 5 Тл

По результатам измерений магнитных свойств наблюдается типичное для ФП 1-го рода поведение кривых *M(T)*. Используя низкополевые кривые *M(T)*, определена температура T_m метамагнитного ФП. Показано, что максимальная величина магнитокалорического эффекта при адиабатическом намагничивании составила ΔT_{ad} = 0.2 K в магнитном поле 5 Тл при начальной температуре T_0 = 78 K, тогда как при размагничивании величина ΔT_{ad} составила уже 0.3 K. По результатам измерений полевых зависимостей намагниченности *M(H)*, выполнен расчет изотермического изменения энтропии ΔS_{mag}. Согласно полученым данным, максимальное значение ΔS_{mag} = 1.7 Дж (кг K)$^{-1}$ в магнитном поле 9 Тл.

Список использованных источников:
[1] M. Doerra [и др.] Physica B 137 (2004) 346.
[2] Y. Matsumoto [и др.] IEEE Trans. Magn. 50 (2014) 1000704.
[3] V.I. Mitsiuk [и др.] J. Comm. Tech. Elect. 68(4) (2023) 431.

Термомагнитный эффект Нернста-Эттингсгаузена в тонких многослойных металлических плёнках Co/Pt

Ю. М. Кузнецов[1,2]*, Д. А. Здоровейщев[1,2], М. В. Дорохин[1,2], и А. В. Здоровейщев[2]
*[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, д. 23, к. 3, 603022 г. Нижний Новгород, Россия, *e-mail: y.m.kuznetsov@unn.ru.*
[2]Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачесвкого, пр. Гагарина, д. 23, к. 3, 603022 г. Нижний Новгород, Россия

Эффект Нернста-Эттингсгаузена (ЭНЭ) – явление возникновения поперечного напряжения в образце во внешнем магнитном поле, при создании на противоположных гранях градиента температур. Термомагнитное напряжение может аддитивно складываться с эффектом Зеебека и термо-ЭДС в металлах [1].

Работа посвящена исследованию ЭНЭ на примере ферромагнитных плёночных структур Co/Pt, полученных последовательным осаждением десяти слоёв методом электронно-лучевого испарения в вакууме на подложку i-GaAs. Толщина Pt задавалась равной 5 Å. Была подготовлена серия из пяти образцов с варьированием толщины Co в диапазоне (1-5) Å. Приводится сопоставление магнитополевых зависимостей ЭХ и ЭНЭ исследуемых образцов. С методиками измерения можно ознакомиться в [2].

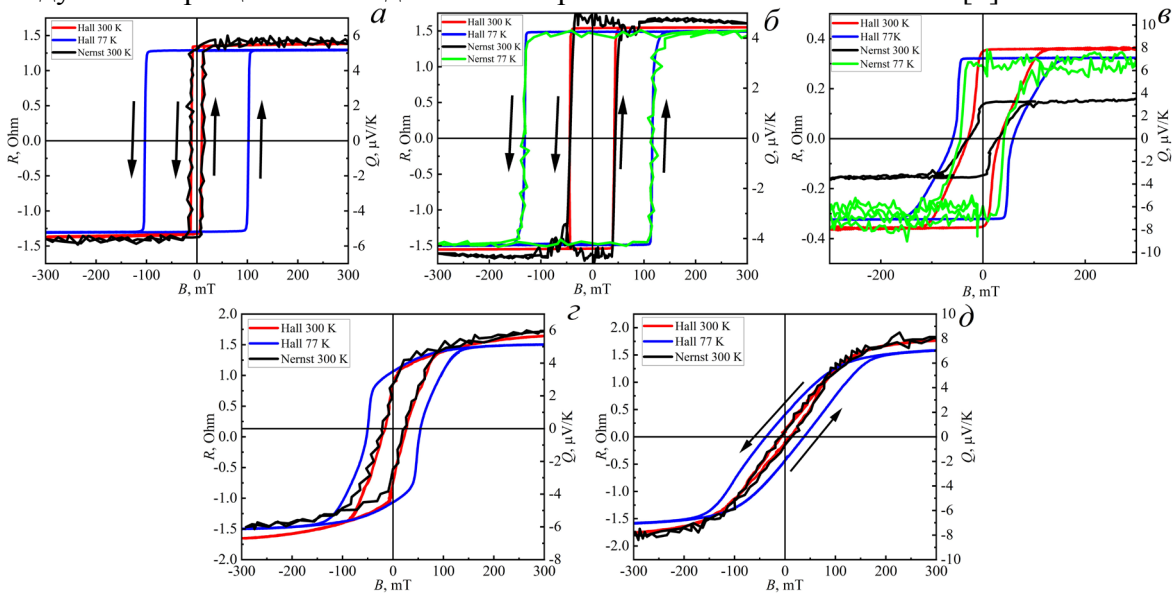


Рисунок 1. Сопоставление магнитополевых зависимостей коэффициентов Холла и Нернста-Эттингсгаузена исследуемых образцов с толщиной слоёв Co: а – 1 Å, б – 2 Å, в – 3 Å, г – 4 Å, д – 5 Å

Установлено, что для всех образцов ЭХ и ЭНЭ подобны (рис. 1). Показано, что состав плёнки определяет характер петель гистерезиса. В образцах с малым и большим содержанием кобальта магнитополевые зависимости сильно наклонены, что приводит к перемагничиванию плёнок даже в отсутствии внешнего магнитного поля. Описанный эффект является демонстрацией тепловой спинтроники.

Благодарность (финансирование)
Работа поддержана грантом РНФ (проект № 24-79-00065).

Список используемых источников

[1] Y. Sakuraba [и др.] Scr. Mater. 111 (2016) 29.
[2] Yu. M. Kuznetsov [и др.] Phys. Uspekhi 66 3 (2022) 312.

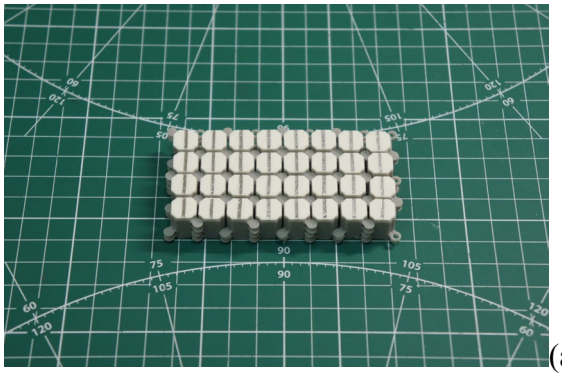
Электромагнитные свойства ауксетика в диапазоне 2.14-3.20 ГГц (S-band)

В.Д. Лавреченко[1]*, Г.В. Горохов[1], А.Г. Любимов[2], В.О.Говоровский[3], О.М. Касперович[2], и Д.С. Быченок[1]
[1]*НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, 220006 г. Минск, Беларусь,*
e-mail: vlauranenka@gmail.com
[2] *Белорусский государственный технологический университет, 220006 г.Минск, Беларусь*
[3] *ЗАО "Беспилотные летательные аппараты", 220015 г.Минск, Беларусь*

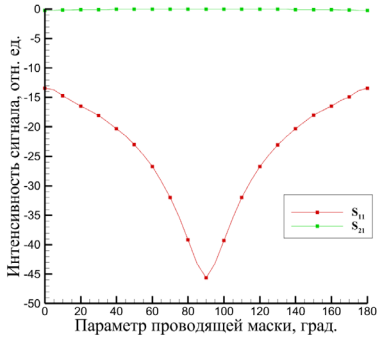
Ауксетики – материалы, характеризуемые отрицательным коэффициентом Пуассона. Одной из важных прикладных особенностей данных материалов является возможность плотно покрывать выпуклые поверхности подобными материалами без возникновения внутренних напряжений, если они изначально были спроектированы в виде плоского слоя [1]. Уникальные механические свойства ауксетиков позволяют создавать на их основе материалы с контролируемыми перестраиваемыми электромагнитными характеристиками в СВЧ-диапазоне [2].

В данной работе исследовалась возможность перестройки электромагнитного отклика ауксетика в диапазоне частот 2.14-3.20 ГГц (S-band). Была построена и создана при помощи 3D-печати однослойная ячеистая шарнирная структура, обладающая аукстетическими свойствами. На поверхность каждой ячейки было нанесено проводящее покрытие в виде тонких полосок (Рис.1 (а)). Конструкция разработанного ауксетика позволяет изменять угол между поляризацией падающего излучения и направлением проводящих полосок и тем самым перестраивать его отклик.

Представлено сравнение результатов численного моделирования с экспериментально измеренными S-параметрами данной структуры, помещённой в волновод 90x45 мм. Также рассчитаны величины S-параметров структуры во всём диапазоне углов между поляризацией падающего излучения и направлением проводящих полосок (Рис.1 (б)).



(а)



(б)

Рис.1 (а) Общий вид разработанного ауксетика; (б) Результаты численного расчёта зависимости S-параметров ауксетика от угла между направлением полосок и поляризацией падающей волны на частоте 2,45 ГГц.

Список использованных источников:

[1] K. Evans. Endeavour, 15 (4) (1991) 170–174.
[2] D. Fan [и др.] Chemical Engineering Journal 427 (2022) 131635.

Исследование структуры нанокристаллического сплава FeSiAl

А. О. Ларин*, О. Ф. Минчукова, А. Л. Желудкевич, К. А. Павлович, А. И. Макейчик
ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. Петруся Бровки, д. 19, 220072 г.Минск, Беларусь * e-mail: *larin@physics.by*

В работе представлены исследования структуры нанокристаллического сплава FeSiAl. Исследование направлено на анализ фазового состава и структуры этого материала, что имеет важное значение для понимания их свойств и потенциальных областей применения.

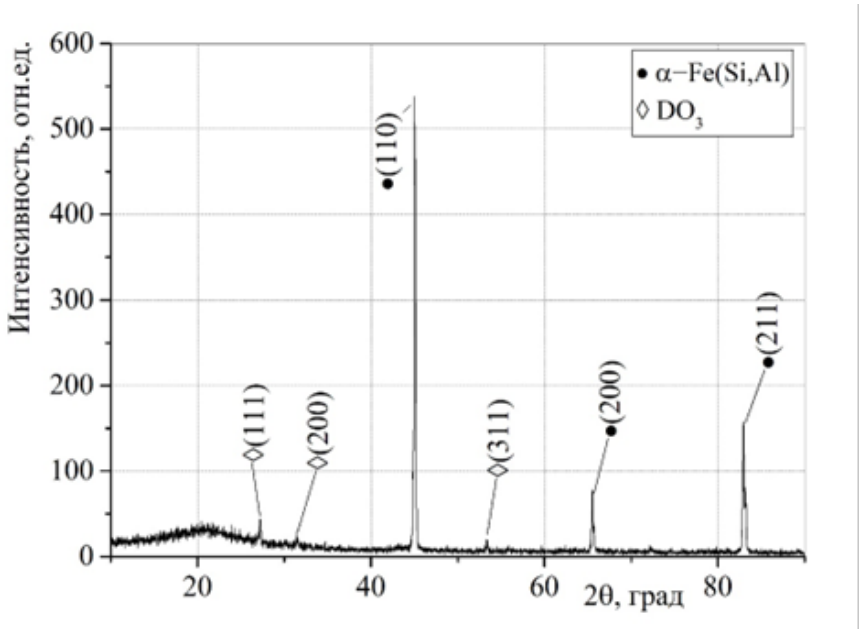


Рисунок 1. Экспериментальный спектр рентгеновской дифракции аморфного порошка FeSiAl

Изучение структуры нанокристаллического сплава FeSiAl выполнено в CuK_α – излучении с помощью модифицированного дифрактометра ДРОН-3 М в диапазоне углов $20° \leq 2\theta \leq 90°$ при комнатной температуре. Анализ рентгеновской дифракции (XRD) образца FeSiAl (рис.1) показал наличие четких дифракционных пиков, соответствующих фазе α-Fe, что свидетельствует о высокой степени кристалличности материала. Поскольку дифракционные пики атомов Si и Al не обнаружены в этом спектре, это может свидетельствовать о том, что их содержание не превышает 5%. На рентгенограмме в позициях (111), (200) и (311) кристаллических плоскостей наблюдаются дифракционные пики сверхрешётки $D0_3$, которая может возникать в некоторых сплавах, особенно в системах на основе железа [1].

Результаты данной работы могут быть полезны для дальнейших исследований и практического применения в области создания эффективных электромагнитных устройств.

Благодарность (финансирование): Работа поддержана Белорусским Республиканским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № Т24КИТГ-018 от 01.10.2024).

Список использованных источников

[1] T.D. Zhou [и др.] J. Alloys and Comp. 484 (2009) 545-549.

Структура и электрические свойства твердых растворов $BiFeO_3$-$BaTiO_3$-$SrTiO_3$ в области морфотропной фазовой границы

М.В. Силибин[1], М.С. Михайлова[1], Д.В. Желудкевич[1,2], С.И. Латушко[1,2]*, и Д.В. Карпинский[1,2], *e-mail: *latushkasi@physics.by*

[1]*Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, 1, 124498 г. Зеленоград, г.Москва, Россия*
[2]*ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению", ул. П.Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь*

Твердые растворы (1-y)$BiFeO_3$-(y)$Ba_{1-x}SrxTiO_3$ с составами в области морфотропной фазовой границы «ромбоэдр-куб» ($x \leq 0.3$; $y \approx 0.3$) получены методом твердофазных реакций. Кристаллическая структура твердых растворов исследована методом дифракции рентгеновского излучения и спектроскопии комбинационного рассеяния. Диэлектрические свойства составов были исследованы методом импедансной спектроскопии в широком интервале температур и частот.

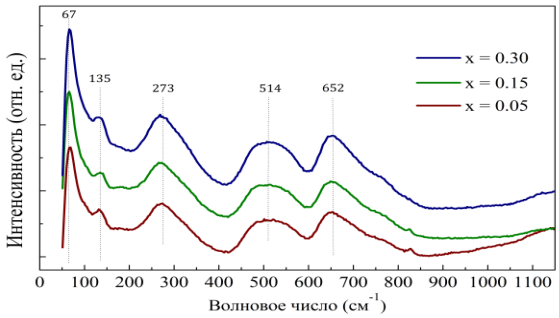


Рисунок 1. Спектры комбинационного рассеяния твердых растворов $0.7BiFeO_3$ - $0.3Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$ при комнатной температуре

Анализ рентгенограмм указывает на отсутствие примесных фаз, замещение ионов бария ионами стронция приводит к увеличению объемной доли кубической фазы. Спектры комбинационного рассеяния составов свидетельствуют о наличии активных рамановских фононных мод, которые соответствуют ромбоэдрическим искажениям. Низкочастотные фононные моды, являются характерными для ромбоэдрических искажений и обусловлены полярными колебаниями ионов висмута в кислородных полиэдрах (рисунок).

Измеренные температурные зависимости проводимости указывают на полупроводниковый характер проводимости во всем исследованном интервале температур. Анализ зависимостей проводимости указывает на незначительное уменьшение проводимости составов с замещением ионами стронция. Частотно-зависимый характер проводимости обусловлен прыжковым типом электронной проводимости, что подтверждается малыми значениями оцененной величины энергии активации составов ~0.2 – 0.6 эВ. Уменьшение энергии активации с частотой электрического поля согласуется с моделью, согласно которой поверхностный слой зерен с большим количеством структурных дефектов вносит наибольший вклад в проводимость составов, что становится наиболее заметно при высоких частотах. Проводимость составов при комнатной температуре практически не зависит от типа их структурного состояния, при температурах выше 400 °C структурное состояние всех исследуемых твердых растворов становится однофазным кубическим, при этом их проводимость также почти не зависит от химического состава.

Благодарность (финансирование): Работа выполнена при поддержке РНФ (23-19-00347).

ЯМР спиновая релаксация протонов функциональных групп на поверхности алмазных наночастиц и молекулярных комплексов на их основе

В.Т.Лебедев[1]*, Н.П.Евлампиева[2], М.В.Попова[1], М.А.Вовк[2], А.В. Швидченко[3], Б.Б.Тудупова[3], и В.И.Куулдар[3]
[1]*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, НИЦ КИ «Курчатовский институт», Орлова роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия, *e-mail: lebedev_vt@pnpi.nrcki.ru*
[2]*Санкт-Петербурский государственный университет, Университетская наб., д. 7–9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Иоффе институт, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д.26, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия*

Синтезированы комплексы детонационных наноалмазов [1] и эндофуллеренолов с магнитными и фото-каталитическими свойствами [2,3] для тераностики. В ЯМР экспериментах (20ºC, спектрометр Bruker Avance 500, поле11.7 Тл) в D_2O-дисперсиях наноалмазов DNDZ+, DNDZ- (размер ~4.5 нм, положительный (отрицательный) потенциал (30-70 мэВ) за счет привитых групп H,OH, либо COOH) и комплексов $Gd@C_{82}(OH)_{30}$+DNDZ±, $Ho@C_{82}(OH)_{40}$+DNDZ±, $Fe@C_{60}(OH)_{30}$+DNDZ± измерены времена продольной и поперечной спиновой релаксации (T_1,T_2) у протонов в составе наночастиц (комплексов). Магнито-контрастные свойства компонент и комплексов сравнивали с данными для H_2O-дисперсий, где наблюдали суммарный релаксационный эффект у протонов в составе частиц и воды. Контрастирующую способность (relaxivity) образцов в D_2O (Δr_{HW}) оценивали по разности обратных времен (T_1,T_2) с коррекцией на вклады растворителей и нормировкой на доли действующего вещества (металлов, углерода в чистых алмазах). В D_2O наибольшую величину $\Delta r_{HW} \sim 13$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ показал комплекс $Fe@C_{60}(OH)_{30}$+DNDZ- (пропорция 1:2 масс.) против $\Delta r_{LW} \sim 52$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ в H_2O, возросшего за счет воды в окружении комплексов. Частицы $Gd@C_{82}(OH)_{30}$+DNDZ+ в D_2O показали меньший эффект $\Delta r_{HW} \sim 3$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ против $\Delta r_{LW} \sim 11$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ в H_2O. Комплексы с гольмием были менее эффективны, чем молекулы $Ho@C_{82}(OH)_{40}$, в D_2O-растворе, где показатель $\Delta r_{HW} \sim 10$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ был выше значения $\Delta r_{LW} \sim 7$ $с^{-1}ммоль^{-1}л$ в H_2O ввиду усиления молекулярной кластеризации в менее плотной и вязкой, но более полярной H_2O. Результаты расширяют представления о магнитно-релаксационных свойствах эндофуллеренов и производных, возможностях усиления этих свойств путем размещения этих объектов на алмазных платформах для медицинских применений.

Благодарность (финансирование)

Авторы благодарят Ресурсный центр ЯМР, Санкт-Петербургского Государственного Университета за проведение экспериментов. Работа поддержана РНФ (грант № 25-45-01024).

Список использованных источников:

[1] A.E. Aleksenskii. Technology of preparation of detonation nanodiamond. In: Detonation Nanodiamonds. Science and Applications; Vul, A.Y., Shenderova, O.A. (Eds.). Pan Stanford Publishing. (2014) 37–72.
[2] V.P.Sedov [и др.] Patent Rus. Ru 2659972 C1. Reg. 04.07.2018. Published: 04.07.2018.
[3] V.P.Sedov [и др.] Patent Rus. Ru 2664133 C1. Reg. 15.08.2018. Published: 15.08.2018.

Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронные и магнитные свойства гексаферрита бария $BaFe_{11}Ti_{0.5}Al_{0.5}O_{19}$

А. Д. Лобанов[1]*, Ю. В. Корх[1], С.А. Маслова[1], Д. А. Шишкин[1,2], Н. А. Черкасова[3], В. Е. Живулин[3], С. А. Гудкова[4,5], Д. А. Винник[3,4,5], Е. И. Патраков[1], Р.Г. Чумаков[6], М. Н. Сарычев[2], В. Ю. Иванов[2], и Т.В. Кузнецова[1,2]

[1]*Институт физики металлов УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: lobaleks1999@mail.ru*

[2]*Уральский Федеральный Университет, ул. Мира, 19, 620062 г. Екатеринбург, Россия*

[3]*Южно-Уральский государственный университет, пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия*

[4]*Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, 141701 г. Долгопрудный, Россия*

[5]*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб., 7-9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*

[6]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, 1, 123182 г. Москва, Россия*

Гексаферрит бария $BaFe_{12}O_{19}$ является ферримагнетиком и обладает высокой намагниченностью насыщения, высокой коэрцитивной силой и высокой температурой Кюри, имеет структуру гексагонального феррита М-типа. Благодаря указанным свойствам $BaFe_{12}O_{19}$ широко применяется в постоянных магнитах, магнитопроводах, в силовой низкочастотной электронике. Гексаферрит бария с добавлением алюминия и титана является перспективным материалом для создания элементов СВЧ-электроники. На их основе изготавливаются устройства для передачи и приёма информации. Поскольку подобные устройства могут работать при постоянном воздействии ионизирующего излучения, необходимо исследовать влияние электронного, протонного, нейтронного, гамма-облучения на электронные и магнитные свойства гексаферрита бария с добавлением алюминия и титана. [1].

В данной работе исследуется соединение $BaFe_{11}Ti_{0.5}Al_{0.5}O_{19}$ методами сканирующей электронной микроскопии, магнито-силовой микроскопии, вибрационной магнитометрии, спектроскопии комбинационного рассеяния и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии до и после облучения электронами с энергией 10 МэВ и с электронным флюенсом $2 \cdot 10^{17}$ см$^{-2}$. Образцы $BaFe_{11}Ti_{0.5}Al_{0.5}O_{19}$ были выращены методом твёрдофазного синтеза. Для $BaFe_{11}Ti_{0.5}Al_{0.5}O_{19}$ были измерены спектры комбинационного рассеяния до и после облучения. После облучения отмечается значительное уменьшение интенсивности пиков, что может быть связано с разрушением некоторого числа химических связей в кристаллической структуре. Измерены зависимости намагниченности (М) от напряжённости магнитного поля (Н), получены изображения магнитных доменов до и после электронного облучения. Обнаружено уменьшение коэрцитивной силы после электронного облучения, при этом значение намагниченоти насыщения почти не изменилось. Уменьшение коэрцитивной силы после электронного облучения может быть связано с разрушением магнитной доменной структуры: исчезают свойственные для данного гексаферрита домены в виде “макарон”, увеличивается ассимметрия доменной структуры.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержки проекта РНФ № 23-72-00067 (https://rscf.ru/project/23-72-00067/).

Список использованных источников

[1] И.А. Солизода [и др.] Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Химия» 14 (2022) 105-113.

Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронные и магнитные свойства гексаферрита стронция $SrFe_{11.3}Ti_{0.4}Al_{0.3}O_{19}$

Ю. В. Корх[1], А. Д. Лобанов[1]*, Д. А. Шишкин[1,2], Н. А. Черкасова[3], В. Е. Живулин[3], С. А. Гудкова[4,5], Д. А. Винник[3,4,5], Е. И. Патраков[1], В. Ю. Ирхин[1], М. Н. Сарычев[2], В. Ю. Иванов[2] и Т.В. Кузнецова[1,2]

[1]*Институт физики металлов УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: lobaleks1999@mail.ru*

[2]*Уральский Федеральный Университет, ул. Мира, 19, 620062 г. Екатеринбург, Россия*

[3]*Южно-Уральский государственный университет, пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия*

[4]*Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, 141701 г. Долгопрудный, Россия*

[5]*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб., 7-9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*

Гексаферрит стронция $SrFe_{12}O_{19}$ является ферримагнетиком, демонстрирует высокую магнитокристаллическую анизотропию, имеют большую намагниченность насыщения, высокую коэрцитивную силу и обладают коррозионной стойкостью. Благодаря указанным свойствам данный гексаферрит применим в постоянных магнитах, фазовращателях, спинтронных устройствах, в телекоммуникационном оборудовании, в качестве материала для поглощения микроволнового излучения. Гексаферрит стронция обладает гексагональной кристаллической решёткой (P63/mmc), которая состоит из 5-ти подрешёток: три октаэдрические (2a, 12k, $4f_2$), одна тетраэдрическая ($4f_1$), одна тригонально-бипирамиэдальная (2b). Добавление алюминия и титана приводит к увеличению анизотропии магнитных свойств гексаферрита. Ионизирующее излучение может значительно измененять его электронные и магнитные свойства. В данной работе кристаллы $SrFe_{11.3}Ti_{0.4}Al_{0.3}O_{19}$ исследуются методами сканирующей электронной микроскопии, магнито-силовой микроскопии, вибрационной магнитометрии и спектроскопии комбинационного рассеяния до и после электронного облучения с энергией электронов 10 МэВ. Максимальный флюенс облучения $2 \cdot 10^{17}$ см$^{-2}$. Кристаллы $SrFe_{11.3}Ti_{0.4}Al_{0.3}O_{19}$ были выращены методом спонтанной кристаллизации из флюса. После облучения отмечается значительное уменьшение интенсивности пиков и смещение частоты мод комбинационного рассеяния. Наиболее устойчивой к электронному облучению является мода A_{1g}, соответствующая колебаниям связей Fe–O в октаэдрической подрешётке $4f_2$ при частоте 617 см$^{-1}$. Были измерены зависимости намагниченности (M) от напряжённости магнитного поля (H) до и после облучения. Получены изображения магнитных доменов до и после электронного облучения. Обнаружено увеличение коэрцитивной силы после электронного облучения, при этом значение намагничености насыщения почти не изменилось. Увеличение коэрцитивной силы после электронного облучения может быть связано с уменьшением среднего фрактального размера магнитных доменов и увеличением магнитной анизотропии после образования радиационных дефектов. Также анализ производных *dM/dH* до и после электронного облучения демонстрирует, что облучение электронами приводит к уменьшению магнитной восприимчивости [1].

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 23-72-00067 (https://rscf.ru/project/23-72-00067/).

Список использованных источников:

[1] Y. V. Korkh [et al.] J. Alloys Compd. 1008 (2024) 176672.

Исследование микромеханизмов разрушения сплава системы Ni-Cr-Al, полученного методом электронно-лучевого аддитивного производства

М.А. Лысунец*, Е.А. Загибалова, Д.О. Астапов, Е.Г. Астафурова, и Е.А. Колубаев
*ИФПМ СО РАН, пр. Академический, 2/4, 634021 г. Томск, Россия, *mal27@tpu.ru*

Метод двухпроволочного электронно-лучевого аддитивного производства (ЭЛАП) позволяет получить соединения различного химического состава из элементарных проволок и формировать покрытия различного назначения. Сплавы системы Ni-Al-Me востребованы в аэрокосмической промышленности, и они могут быть использованы в качестве жаропрочных и жаростойких покрытий для деталей, работающих при повышенных температурах и в коррозионных средах. Цель работы – проанализировать микроструктуру и механизмы разрушения сплава Ni-Cr-Al, сформированного методом ЭЛАП с использованием промышленных проволок NiCr и Al.

Заготовки сплава Ni-Cr-Al были получены методом ЭЛАП с одновременной подачей двух проволок промышленного производства: NiCr (Ni-(20-23)%Cr) и Al (≥99,5%Al). Соотношение скоростей подачи проволок составляло NiCr:Al = 3:1 (3NiCr+Al). Параметры процесса описаны в работе [1]. Микроструктуру и микромеханизмы разрушения образцов исследовали с помощью растрового электронного микроскопа LEO EVO 50. Механические испытания образцов, вырезанных из полученного наплавкой материала, проводили на электромеханической машине LFM-125 в интервале температур 24-900°C с начальной скоростью деформации 5×10^{-4} c^{-1}.

Полученный аддитивным способом образец обладает дендритной микроструктурой, объемная доля дендритной фазы – 63%, междендритной – 37%. Согласно результатам рентгенофазового и EDS анализов, образец 3NiCr+Al – сплав на основе фаз Ni_3Al, Ni_3Cr, NiAl и γ-Ni. Среднее значение микротвердости образца составляет 4,3 ГПа [1]. При температуре 24°C образец разрушается макроскопически хрупко после незначительной пластической деформации. На микроуровне разрушение идет по смешанному типу: на поверхностях излома наблюдаются хрупкие транс- и интеркристаллитные трещины, а по границам транскристаллитных фасеток видны элементы вязкого излома. Наблюдается множество вторичных интеркристаллитных трещин, их морфология аналогична структуре хрупких сколов. Образование сколов вызвано разрушением фаз Ni_3Al, Ni_3Cr и NiAl, а элементы вязкого излома обусловлены последующим вязким «доломом» участков образца, где формировалась γ-фаза на основе никеля. Разрушение образца при растяжении в интервале $T \leq 600$°C аналогично разрушению образца при комнатной температуре. Но с повышением температуры на боковых поверхностях образцов более явно проявляются следы пластической деформации. При температурах выше 600°C образец разрушается вязко с образованием ямочного излома, а на боковых поверхностях деформированных образцов видны следы значительной пластической деформации и формирования «шейки» перед разрушением. На поверхности излома видны частицы сферической формы.

Таким образом, с помощью метода ЭЛАП были получены образцы сплава системы Ni-Cr-Al с соотношением компонентов NiCr:Al = 3:1 и показано, что при одноосном статическом растяжении этот сплав является хрупким вплоть до температуры испытания 600°C. Это вызвано формированием интерметаллидных фаз Ni_3Al, Ni_3Cr и NiAl в полученном аддитивно-изготовленном материале.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено при поддержке проекта государственного задания ИФПМ СО РАН FWRW-2022-0005.

Список использованных источников:

[1] E.G. Astafurova [и др.] RPhJ 67 (2024) 1125-1132.

Смещение характерных температур метамагнитоструктурного фазового перехода под действием внешнего магнитного поля с сплавах $Ni_{50-x}Mn_{33.4}In_{15.6}V_x$

А. В. Маширов[1]*, Д. Д. Кузнецов[1], С. В. Таскаев[2], И. И. Мусабиров[3], и В. И. Митюк[4]
*[1]ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, ул. Моховая, 11/7, 125009 г. Москва, Россия, *e-mail: a.v.mashirov@mail.ru*
[2]ЧелГУ, ул.Братьев Кашириных, 129, 454001 г. Челябинск, Россия
[3]ИПСМ РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001 г. Уфа, Россия
[4]ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению", ул. Петруся Бровки, 19,220072 г. Минск Беларусь

Сплавы Гейслера семейства Ni-Mn-In активно исследуются, в связи их потенциалом применения в технологии магнитного охлаждения и магнитоуправляемых микроэлекромеханических системах [1]. В центре исследований лежит метамагнитостуктурный фазовый переход (ММСФП), в области которого наблюдаются высокий обратный магнитокалорический эффект и магнитный эффект памяти формы. Изменение концентрации композизии Ni-Mn-In или введение легирующих элементов повышает или понижает характерные температуры и температурный гистерезис ММСФП. Сплав Ni-Mn-In-V показал одно из самых низких значений температурного гистерезиса ММСФП $\Delta T_{hys}=(A_s+A_f-M_s-M_f)/2$ [2]. В свою очередь синтезирование нами образцы $Ni_{51-x}Mn_{33.4}In_{15.6}V_x$ (x = 0, 0.3, 1) продемонстрировали следующие параметры ММСФП (см. рисунок 1). При приложении магнитного поля от 0.01 Тл до 1 Тл наблюдается изменение характерных температур с разным знаком. Выше 1 Тл смещение температуры начала мартенситного превращения k_{Ms} равно -0,5 К/Тл, -1,6 К/Тл, -3,5 К/Тл, соответсвенно, а температурные гистерезисы ΔT_{hys} равны 5,6 К, 5,0 К, 9,1 К, с увеличением ширины около 0 К/Тл, 0,33 К/Тл, 0,45 К/Тл. Таким образом, мы ожидаем осуществление обратимого магнитоиндуцированного ММСФП в магнитом поле 5 Тл.

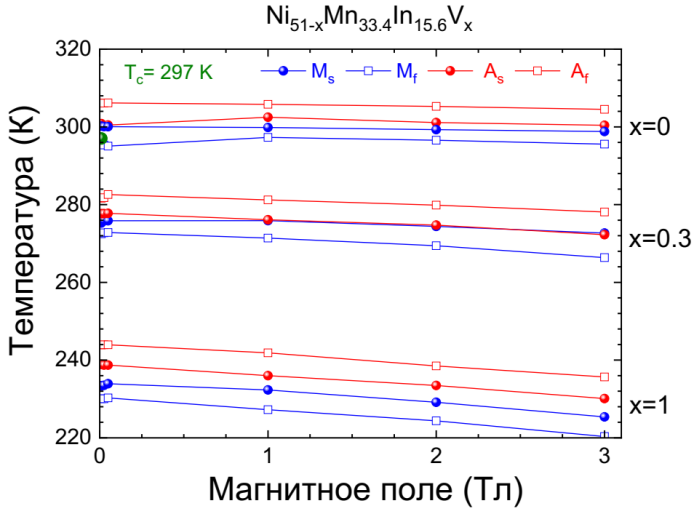


Рис.1. Значения смещения характерных температур ММСФП от магнитного поля

Данные характеристики зависят от скорости нагрева и охлаждения при термомагнитном анализе методом вибрационного магнитометра и не так сильно подвержены кинетическим эффектам при измерениям на СКВИД-магнитометре.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН.

Список использованных источников

[1] T. Krenke [и др.] Phys. Rev. B. 75 (2007) 104414.
[2] J. Liu [и др.] Phys. Rev. Materials. 3 (2019) 084409.

Формирование растяжимых светоизлучающих структур на основе $CsPbBr_3$ и нитевидных нанокристаллов A3B5

Д. М. Митин[1]*, А. А. Якубова[1], Ф. М. Кочетков[1], Д. Е. Колесина[1], Р. Кенесбай[1], А. С. Тойкка[1,2], и И. С. Мухин[1,3]
[1]*СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, ул. Хлопина, д.8, к.3, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: mitindm@mail.ru*
[2]*Университет ИТМО, Кронверкский пр., д. 49, лит. А, 197101 г. Санкт-Петербург, Россия*
[3]*СПбПУ, ул. Политехническая, д. 29, 195251 г. Санкт-Петербург, Россия*

В последние годы наблюдается интенсивное развитие технологий гибких и растяжимых оптоэлектронных устройств. Основу современных гибких систем составляют органические материалы, обладающие высокой механической гибкостью, но характеризующиеся рядом фундаментальных ограничений: низким квантовым выходом светоизлучения, термической и химической нестабильностью, а также ограниченным сроком службы, особенно в светоизлучающих диодах.

Появление галогенидных перовскитных эмиттеров вызвало значительный интерес благодаря высокой электролюминесценции в широком спектральном диапазоне, низкой себестоимости и возможности низкотемпературного производства. Однако реализация гибких и особенно растяжимых перовскитных устройств остаётся сложной задачей из-за трудностей в создании соответствующих электродов и механически стабильных подложек.

Используемые сегодня решения с электродами из TiO_2, оксида индия-олова (ITO) или NiO оказываются недостаточно эффективными: их электрические характеристики заметно ухудшаются после нескольких циклов деформации.

В данной работе применяются массивы вертикально-ориентированных нитевидных нанокристаллов (ННК) фосфида галлия (GaP), частично инкапсулированные в силиконовые мембраны. Эти структуры выполняют функцию распределённого электрода и одновременно служат механическим опорным слоем для перовскитной активной области на основе $CsPbBr_3$.

GaP демонстрирует отличные транспортные свойства, может быть легирован по обоим типам проводимости, а благодаря непрямозонной структуре — прозрачен в видимом и ближнем ИК-диапазонах. ННК GaP обладают высоким отношением длины к диаметру и выраженной механической прочностью. Они внедряются в перовскитный слой для эффективной инжекции носителей заряда (НЗ). Латеральный транспорт НЗ обеспечивают прозрачные слои одностенных углеродных нанотрубок (УНТ), покрывающие массив ННК.

Разработанный подход оптимизирован для растяжимых устройств: композит ННК/полимер обладает превосходной гибкостью, а УНТ-контакты сохраняют проводимость при деформации. Важной особенностью является способность распределённого электрода на основе GaP ННК обеспечивать локально независимую инжекцию НЗ при повреждении перовскитной области. На основе предложенной технологии реализовано гибкое и растяжимое светоизлучающее устройство с длиной волны электролюминесценции 530–540 нм, сохраняющее излучательные характеристики при растяжении до 10%.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-79-10286, https://rscf.ru/project/22-79-10286).

Оптимизация емкостных характеристик сульфида кобальта

Т.А. Моисеева, Д. А. Королев и Т.Н. Мясоедова*
*Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения, Южный федеральный университет, ул. Чехова, д.2, 347922 г. Таганрог, Россия, *e-mail: tnmyasoedova@sfedu.ru*

В последние годы сульфиды кобальта были исследованы в качестве материалов для электродов высокоэффективных устройств накопления энергии благодаря мультивалентным состояниям атома Co, разнообразной морфологии и высокой окислительно-восстановительной активности [1,2]. Однако невысокие электропроводность и скорость переноса заяда у сульфида кобальта по сравнению с углеродными материалами ограничивают его применение в суперконденсаторах. Для устранения этих недостатков возможна модификация углеродсодержащими материалами.

В данной работе на подложку из никелевой пены наносили кремний-углеродную пленку (КУП) методом электрохимичекского осаждения из раствора на основе гексаметилдисилазана и метанола в двухэлектродной ячейке при напряжении 100 В по методике описанной ранее [3]. Далее, на поверхности кремний-углеродной пленки формировали слой сульфида кобальта (CoS) из 0,005М раствора $CoCl_2 \cdot 6H_2O$ и 0,75М раствора тиомочевины (50 мл) методом циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от -1240 мВ до 160 мВ (Elins PX-20). Электродом сравнения выступал электрод Ag/AgCl (3,5 М KCl), противоэлектродом – углеродная пластина.

Емкость образцов оценивалась из кривых заряда-разряда (Таблица 1), измеренных при различной плотности тока в трехэлектродной ячейке относительно электрода Ag/AgCl (3,5М KCl) в 1М KOH.

Таблица 1. Рассчитанные значения емкости для образцов при различной плотности тока

Ток, А/г		1,3	1,6	2	2,3	2,6	3	3,3	3,6	4	4,3	4,6	5
Емкость, Ф/г	CoS	178	180	208	242	176	174	160	176	168	173	168	160
	КУП+CoS	490	483	488	480	464	468	460	498	496	485	476	450

Из данных таблицы следует, что добавление подслоя из кремний-углеродной пленки значительно увеличивает удельную емкость электрода за счет создания дополнительных мостиков проводимости и увеличения скорости диффузии ионов. Образец КУП+CoS демонстрирует высокие значения емкости во всем диапазоне плотности токов, что говорит о высокой стабильности образцов .Для пленки CoS максимальная емкость составялет 242 Ф/г при плотности тока 2,3 А/г, а далее, наблюдается снижение до 160 Ф/г.

Таким образом, полученная сэндвич-структура продемонстрировала улучшеныне характеристики емкости, сравнимые с известными псевдоемкостными материалами.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 25-23-00514 (https://rscf.ru/project/25-23-00514/) в Южном федеральном университете.

Список использованных источников:
[1] Ioannis Poimenidis [и др.] Surfaces 6 (2023) 493-508.
[2] Mahir Gulen J Mater Sci. 57 (2022) 3512-3524.
[3] Nina N. Plugotarenko [и др.] Nanomat. 9 (2019) 1754.

Конкуренция обменных взаимодействий и их влияние на магнитную структуру в ортоферрите $HoFeO_3$

А. К. Овсяников*, О. В. Усманов, и И. А. Зобкало
[1]*Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Орлова Роща, д.1, 188300 г. Гатчина Россия, *e-mail: ovsianikov_ak@pnpi.nrcki.ru*

Редкоземельный ортоферрит $HoFeO_3$ является хорошим модельным объектом для исследований т.к. в нём был обнаружен магнитокалорический эффект с магнитной анизотропией $\Delta S_M \sim 20$ Дж/кг К в полях от 0–1 до 0–7 Т при температуре Т=5К, а также спонтанная электрическая поляризация при Т=210К. Магнитная структура соединения обусловлена сочетанием обменного взаимодействия с антисимметричным взаимодействием Дзялошинского –Мория (ДМ), а конкуренция взаимодействия 4f –3d, второго и четвертого порядков спиновой анизотропии 3d-подрешетки и кристаллического поля на редкоземельных 4f –ионах приводит к наличию нескольких спин-ориентационных переходов.

В данной работе представлены результаты исследований редкоземельного ортоферрита $HoFeO_3$ методами нейтронной дифракции, дифракции поляризованных нейтронов и неупругого рассеяния нейтронов.

Получена фазовая диаграмма $HoFeO_3$ во внешнем магнитном поле [1], а также показано, что поворот магнитного момента Fe в плоскости *ac,* при спин-ориентационном переходе из фазы Г4 в фазу Г1, происходит через ось *b*[2]. Конкуренция обменных взаимодействий и изменение внешнего магнитного поля приводит к значительным изменениям в энергетическом балансе системы, что даёт богатую фазовую диаграмму. Взаимодействие внутри подсистемы Fe $J^{Fe}_{c} = 4.901$ мэВ, $J^{Fe}_{ab} = 4.764$ мэВ является самым сильным, и оно определяет антиферромагнитное упорядочение [3].

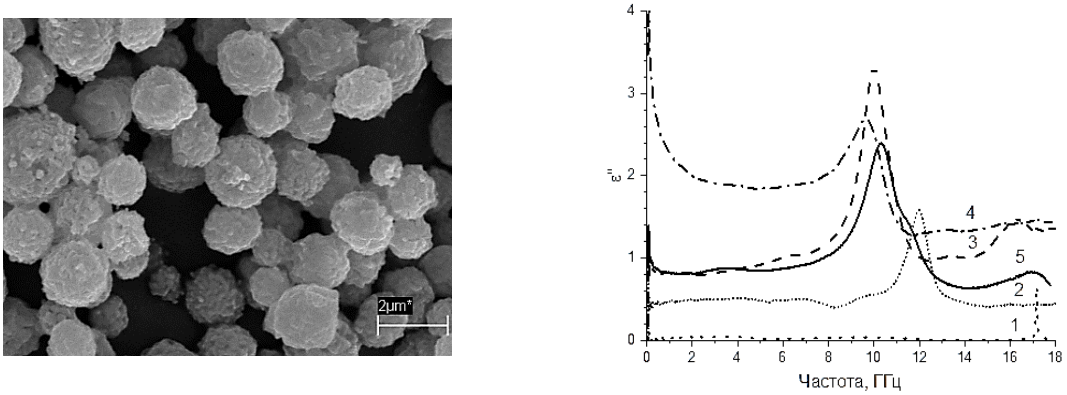
Список использованных источников

[1] A. K. Ovsianikov [и др.] JMMM 557(2022) 169431.
[2] A. K. Ovsianikov [и др.] IEEE Trans. Magn. 58 (2022) 2500105.
[3] A. K. Ovsianikov [и др.] JMMM 507 (2020) 166855.

Композит феррит - углерод со сферической формой частиц, взаимодействие с электромагнитным полем.

В. В. Паньков[1]*, И. С. Окунев[2], Д. В. Ивашенко[1]
*[1]Белорусский государственный университет, ул. Ленинградская, 14, г. Минск, Республика Беларусь, *e-mail: pankovbsu@gmail.com*
[2] НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Ленинградская обл., г.Гатчина, Российская Федерация

С непрерывным развитием электронных технологий настоятельно требуются материалы для поглощения микроволн, и поиск таких материалов по-прежнему остается большой проблемой. Среди различных доступных структур, сферические структуры привлекли большое внимание из-за их значительной внутренней контактной области, большого количества границ зерен и высокой площади удельной поверхности. Все это вносит значительный вклад в диэлектрические потери. В настоящей работе полые сферы ферритов с размерами до 2 мкм (Рис. 1) были получены методом распылительного термолиза.



а) б)

Рис.1 а) Микрофотография частиц – $(Co,Zn)Fe_2O_4$ б) Полевые зависимости мнимой диэлектрической проницаемости для композитов Ba-феррит/ Сажа. Кривые: 1- 0%, 2 - 25%, 3 - 50%, 4 - 75%, 5 - 100% сажи

СВЧ и радиопоглощающие свойства исследовались на композитах $BaFe_{12}O_{19}$ - фуллереновая сажа, $(Co,Zn)Fe_2O_4$ - фуллереновая сажа, с изменением концентраций составляющих компонентов от 0 до 100% коаксиальным методом при помощи векторного анализатора цепей Микран Р4М на образцах, диспергированных в массе расплавленного парафина. На графиках наблюдались отчетливые широкие резонансные пики в области 8-12 ГГц. Кривая диаэлектрической проницаемости для чистых ферритов не показывала никаких аномалий поведения по всему диапазону, частота резонанса смещается при изменении концентрации сажи в композите для обоих ферритов. Таким образом эффект широкого резонансного рассеяния надо целиком отнести к рассеванию на наноуглероде электродуговой сажи.

Электродуговая сажа немагнитна, но имеет хорошую проводимость. Поэтому возникновение магнитной проницаемости на немагнитной, но проводящей саже можно объяснить за счет микротоков Фуко, которые наводятся и взаимодействуют с падающим СВЧ излучением. То есть мы наблюдаем эффект динамической магнитной проницаемости. Скорее всего в нашем случае это связанно с пространственной (вероятно кластерной) структурой заполнения образцов сажей и ее микроструктурой, которые определяют параметры ячеек токов Фуко. Ранее эффект резонансной, динамической магнитной проницаемости на наноуглеродных материалах не наблюдался.

Влияние условий синтеза на состав и свойства твердых растворов (1-x)$Cu_{1-\delta}GaSe_2$ – (x)$Ag_{1-\delta}GaSe_2$ ($0 \le x \le 1$, $0 \le \delta \le 0.3$), применяемых в качестве фотокатодов

В. В. Ракитин[1,*], М. В. Гапанович[1,2], Е. .В. Рабенок[1], Д. С.Луценко[1,2], А. В. Станчик[3], и В. Ф. Гременок [3]

[1]*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, пр. Академика Семенова, д. 1, 142432 г. Черноголовка, Россия, *e-mail: domi-tyan@yandex.ru*

[2]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Ленинские Горы, 1, стр. 51, 119234, г. Москва, Россия*

[3]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь*

В настоящее время возникает все больший интерес к применению фотоэлектрохимических ячеек в качестве источников получения водорода. Для осуществления фотоэлектрохимического разложения воды необходимо, чтобы ширина запрещенной зоны полупроводникового электрода была более чем E_g=1.23 эВ, при этом оптимальным является значение в диапазоне 1.7-1.8 эВ [1, 2]. Такими веществами могут быть твердые растворы на основе (1-x)$Cu_{1-\delta}GaSe_2$ – (x)$Ag_{1-\delta}GaSe_2$ ($0 \le x \le 1$, $0 \le \delta \le 0.3$). Однако эти соединиения остаются недостаточно изученными. В данной работе методом многостадийного твердофазного ампульного синтеза были получены модельные образцы - порошки твердых растворов (1-x)$Cu_{1-\delta}GaSe_2$ – (x)$Ag_{1-\delta}GaSe_2$.

Комбинацией методом РФА и спектроскопии комбинационного рассеяния проведено совместное исследование по влиянию стехиометрии на фазовый состав полученных образцов твердых растворов (1-x)$Cu_{1-\delta}GaSe_2$ – (x)$Ag_{1-\delta}GaSe_2$. Установлено, что структура всех образцов тетрагональная (пространственная группа *I*-42d). При этом для системы $Ag_xCu_{1-x}GaSe_2$ зависимость параметров кристаллической решетки от x не соответствует закону Вегарда до x~0.4, а для системы $(Ag_xCu_{1-x})_{0,7}GaSe_2$ с $0 \le x \le 1$ область твердых растворов более узкая, чем для $Ag_xCu_{1-x}GaSe_2$ и лежит в диапазоне $0.8 \le x < 1$. По-видимому, это обусловлено реакцией диспропорционирования, при которой часть меди переходит из состояния Cu^I в Cu^{II}.

Комбинацией методов низкотемпературной люминесценции и времяразрешенной микроволновой фотопроводимости проведено совместное исследование по влиянию дефектов, создаваемых стехиометрией, на времена жизни фотогенерированных носителей тока в синтезированных порошках (1-x)$Cu_{1-\delta}GaSe_2$ – (x)$Ag_{1-\delta}GaSe_2$. Показано, что для серии образцов $Ag_xCu_{1-x}GaSe_2$ с x от 0 до ~0.4, а затем на участке с $x > 0.4$, а также для серии образцов нестехиометрического состава $(Ag_xCu_{1-x})_{0,7}GaSe_2$ с $x = 0$ и $0.8 \le x < 1$ характерно увеличение времен жизни фотогенерированных носителей тока. Наблюдаемое явление, по-видимому, обусловлено заменой глубоких ловушек носителей заряда, таких как вакансии селена V_{Se}, более мелкими катионными вакансиями меди V_{Cu} и ассоциатами V_{Se}-V_{Cu}.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (Соглашение №24-43-10003) и БРФФИ (грант № Т23РНФМ-029) с использованием УНУ «Установка для измерения времен жизни фотогенерированных носителей тока методом микроволновой фотопроводимости в диапазоне частот 36 ГГЦ» и оборудования АЦКП ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Авторы благодарят к.х.н. Д.В. Корчагина и к.ф.-м.н. Г.Ф. Шилова за предоставление рентгенограмм и к.ф.-м.н. Д.М. Седловец за предоставление рамановских спектров.

Список использованных источников:

[1] J.A. Turner. Science 305 (2004) 972–4.

[2] L. Barreto [и др.] Int. J. Hydrogen Energy. 28 (2003) 267–84.

Влияние типа подложки на структуру нанокомпозитов на основе CdTe, полученного методом электрохимического осаждения

У. Р. Бакланова[1,2], В. В. Ракитин[2] *, и М. В. Гапанович[1,2]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Ленинские Горы, 1, стр. 51, 119234, г. Москва, Россия, *e-mail: domi-tyan@yandex.ru*
[2]*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, пр. Академика Семенова, д. 1, 142432 г. Черноголовка, Россия*

Теллурид кадмия является перспективным материалом для солнечной энергетики, так как имеет ширину запрещенной зоны близкую к оптимальной (1,45 эВ) и высокий коэффициент поглощения света (>10^5 $см^{-1}$) [1]. При этом нанокомпозиты на его основе – возможный путь создания новых высокоэффективных устройств [2]. Среди методов получения наноразмерного теллурида кадмия выделяется электрохимическое осаждение, в котором используются металлические подложки (например, Al и Ti), позволяющие контролировать размер и форму получаемых частиц. Кроме того, система, включающая пористую структуру анодированного металла и электрохимически осажденный наноразмерный CdTe, способна к сенсибилизации, что может улучшить оптические свойства композита. Однако влияние типа подложки на получаемый нанокомпозит в литературе практически не изучается. В данной работе исследуется влияние типа подложки на состав, структуру и свойства нанокомпозитов на основе CdTe, полученного методом электрохимического осаждения.

Электрохимическое осаждение проводилось в трехэлектродной электрохимической ячейке. В качестве рабочего электрода использовалась анодированная алюминиевая или титановая пластина, электрода сравнения – 1 М хлорсеребряный электрод, противоэлектрода – графитовая пластина. Синтез проводился в течение 1 часа при потенциале E= -520 мВ и температурах 20, 40, 50, 60, 70 °C при непрерывном перемешивании.

Для установления состава полученных образцов применялись методы РФА (дифрактометр PANalitical Aeris (Cu-K_α)) и КР-спектроскопии (спектрометр Bruker Senterra micro-Raman system). Морфология исследовалась методом СЭМ (сканирующий автоэмиссионный электронный микроскоп Helios G4 PFIB).

В полученных образцах методом РФА были обнаружены фазы CdTe кубической модификации и фазы Te гексагональной модификации. Исходя из характера дифрактограмм можно предположить, что состав полученного теллурида кадмия нанокристаллический. Результаты КР-спектроскопии подтверждают наличие CdTe с избытком теллура в образцах. Методом СЭМ показано, что поверхность состоит из 2-х типов - равномерной кратерообразной структуры CdTe/Te и избыточного количества вещества Te, имеющего различную морфологию в зависимости от температуры синтеза.

Благодарность (финансирование). Авторы благодарят к.х.н. Корчагина Д.В. за предоставление дифрактограмм и к.ф.-м.н. Седловец Д.М. за предоставление спектров КР.
Работа выполнена в рамках государственного задания № 124013000686-3.

Список использованных источников:
[1] S. Kapoor [и др.] J. Alloys Compd. 809 (2019) 151765.
[2] I. Gur [и др.] Science. 310 (2005) 462-465.

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ n-Si<Pt>, ОБЛУЧЕННОГО АЛЬФА-ЧАСТИЦАМИ

Ш. Б. Утамурадова[1], Д. А. Рахманов[1]*, А.С. Дорошкевич[2], В.А. Кинев[3]
[1]*Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при НУУз, ул. Янги Алмазар 20, 100057 г. Ташкент, Республика Узбекистан,*
**e-mail: dilmurod-1991@bk.ru*
[2]*Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980 г. Дубна, Россия*
[3]*Государственный университет «Дубна», ул. Университетская 19, 141982 г. Дубна, Россия*

Известно, что в кремнии, выращенном методом Чохральского, затем подвергнутом воздействию радиации, образуются различные кислородсодержащие радиационные дефекты в зависимости от примесного состава. Кроме того, наличие в объеме кремния примесей переходных элементов (ППЭ), в частности платины, приводит к повышению его устойчивости к воздействию радиации [1].

Для исследования использовался *n*-тип кремний с удельным сопротивлением 40 Ом · см, выращенный методом Чохральского. На поверхность исходных образцов напылялся слой металлической платины, далее проводилась высокотемпературная диффузия в течение 2 часов при температуре T = 1200 °C.

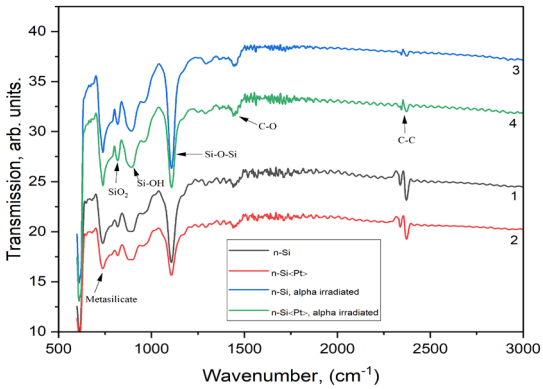


Рисунок 1. ИК-спектры монокристаллического Si *n*-типа до (кривая 1) и после (кривая 2) легирования Pt и облучения альфа-частицами (кривые 3 и 4 соответственно)

На рисунке 1 приведены ИК-спектры образцов исходного кремния (кривая 1), Si , легированного платиной (кривая 2) и Si, облученного альфа-частицами (кривая 3, 4). В режиме пропускания были обнаружены некоторые пики при значениях волновых чисел: 2373, 1440, 1106, 950, 885, 820 и 740 $см^{-1}$. Данные пики соответствуют различным типам химической связи: C-C (2373 $см^{-1}$), C-O (1440 $см^{-1}$), Si-O-Si (1106 $см^{-1}$), Si-OH (885 $см^{-1}$), SiO_2(820 $см^{-1}$) и метасиликатной (SiO_3) связи (740 $см^{-1}$).

С помощью ИК-спектроскопии изучено изменение концентрации технологических примесей в кремнии, после легирования и облучения альфа-частицами. ИК-спектры показывают, что легирование атомами платины приводит к уменьшению концентрации оптически активного кислорода почти в 2 раза из-за создания соединений типа Pt-O в кремнии после легирования. Дальнейшие облучение альфа-частицами с энергией 2 МэВ и дозой $5 \cdot 10^{14}$ $см^{-2}$ приводит к увеличению $N_O^{опт}$ в кремнии (почти в 1,5 раза). Это свидетельствует о том, что альфа-облучение создает некоторые радиационные дефекты и разрушает Pt-O соединения в кремнии.

Список использованных источников:

[1] Sh. B.Utamuradova [и др.] New materials, compounds and applications. 6 (3) (2022) 214-219.

Фотоиндуцированные изменения импеданса поликристаллических пленок $CuInSe_2$

О.Б. Романова[1]*, С.С. Аплеснин[1,2], Т.М. Гаджиев[3], М.А. Алиев[3], Н.А. Черемных[2], О.С. Никитинский[2], Л.В. Удод[1], Х.Т. Гаджиева[4]
[1]*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Академгородок, 50, стр.38, 660036 г. Красноярск, Россия, *e-mail: rob@iph.krasn.ru*
[2]*Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, пр. им. газеты Красноярский рабочий, 31, 660037 г. Красноярск, Россия*
[3]*Институт физики им. Х.И. Амирханова, ДФИЦ РАН, ул. Ярагского 94, 367015 г. Махачкала, Россия*
[4]*ФГБОУ ВО «ДГУ», ул. Магомета Гаджиева, 43а, 367000 г. Махачкала, Россия*

В настоящее время особый интерес исследователи проявляют к полупроводникам способным конкурировать с традиционными фотопреобразователями на основе кремния и арсенида галлия. В системе Cu–In–Se соотношение концентраций атомов меди и индия прямо влияет на кристаллическую решетку и упорядочение атомов Cu и In. Полученные в работе [1] спектры фотопроводимости пленок $CuInSe_2$ показали сильную зависимость от условий их синтеза и, в особенности, от температуры источника. Цель данной работы заключалась установлении оптимальной температуры селенизации для синтеза поликристаллических пленок $CuInSe_2$, обнаруживающих максимальное фотоиндуцированное изменение импеданса.

Тонкие пленки $CuInSe_2$, со структурой халькопирита, получены двухэтапным методом управляемой селенизации предварительно нанесенных на стеклянные подложки интерметаллических прекурсоров Cu-In. Температура в зоне реакции слоев Cu-In с Se (температура селенизации $T_{сел}$) варьировалась в интервале $200° \leq T_{сел} \leq 550°C$. Исследована морфология поверхности синтезированных пленок толщиной около 1 мкм. Установлено, что синтезированные образцы системы $CuInSe_2$ являются электрически неоднородными, на транспортные характеристики, которых влияет величина электрического поля, понижая величину потенциального барьера между локализованными зарядами. Следующий влияющий фактор - это частота переменного электрического поля. Если время измерения отклика на внешнее поле меньше времени релаксации, т е носитель тока остается вблизи заряженного дефекта, то фотоэлектроны из зоны попадают в новые ловушки и фототок отсутствует. В противоположном случае если время измерения превышает время релаксации, то формируется фототок. Технология синтеза проявляется в концентрации дефектов и расстояния между дефектами. Было установлено, что перспективными являются пленки $CuInSe_2$ синтезированные при $T_{сел} = 500$ и 550 К, когда импеданс и сопротивление на переменном токе уменьшаются на 5-8%.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Список использованных источников:
[1] В.Ю. Рудь [и др.] ФТП 31 (2011) 1336

Магнитная фазовая диаграмма в соединениях на основе MnGe и ее эволюция под воздействием внешего давления

Д. О. Сканченко[1]*, Е. В. Алтынбаев[2,1,4], Р. А. Садыков[3,2], и А. В. Цвященко[4]
[1]*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 188300 г. Гатчина, Россия,*
e-mail: skanchenko_do@pnpi.nrcki.ru
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 г. Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Институт ядерных исследований РАН, 108840 г. Москва, Россия*
[4]*Институт физики высоких давлений РАН, 142190 г. Троицк, г. Москва, Россия*

Мы сообщаем о результатах исследования соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ (x=0.1 и 0.3) методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) при высоком давлении до P = 1 ГПа и сильном магнитном поле до 9 Тл. Для проведения исследования была разработана немагнитная ячейка высокого давления, совместимая со стандартными условиями размещения образца и позволяющая достигать давления до 1.2 ГПа. [1,2]

Соединения $Mn_{1-x}Fe_xGe$ кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20. Формирование скирмионной решетки (СкР) в соединениях на основе MnGe с замещением атомов Mn на Fe наблюдалось под действием внешнего магнитного поля в широком диапазоне полей при температурах значительно ниже Tc [3]. С увеличением давления все критические поля при низких температурах возрастают для обоих соединений, в то время как температура упорядочения снижается. Температурные и полевые диапазоны существования СкР сужаются при повышении давления. Мы полагаем, что эти эффекты связаны со стабилизацией магнитной структуры соединений на основе MnGe под давлением. Данный процесс противоположен эффекту замещения Mn на Fe, несмотря на продолжающееся уменьшение параметра решетки.

Поскольку замещение Mn на Fe в соединении $Mn_{1-x}Fe_xGe$ изменяет как минимум два параметра, критически важных для стабилизации магнитной структуры — концентрацию электронов и параметр ячейки, — применение высокого давления позволяет разделить эти компоненты. Таким образом, появляется возможность оценить влияние каждого из процессов на эволюцию фазовой диаграммы в координатах «поле-температура».

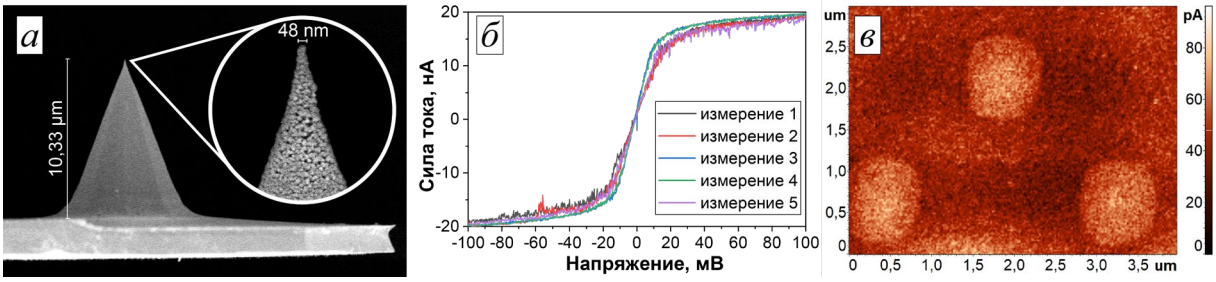
Список использованных источников:
[1] D. Skanchenko [и др.] J. Alloys Compd. 862 (2021) 158606.
[2] D. Skanchenko [и др.] J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 17 (2023) S1-S5.
[3] E. Altynbaev [и др.] Phys. Rev. B 101 (2020) 100404.

Формирование тонких проводящих плёнок вольфрама для кантилеверов и испытание полученных зондов методом электросиловой микроскопии

А. М. Соколов[1,2]*, А. В. Новак[1,2], И. В. Сагунова[1], В. Д. Ковалев[2], Д. А. Дронова[1]
[1]*НИУ «МИЭТ», Россия, г. Зеленоград, пл. Шокина 1, 124498*
[2]*АО «Ангстрем», Россия, г. Зеленоград, пл. Шокина 2с3, 124498*
*e-mail am.sokolov.imbox@gmai.com**

Для изучения и картирования электрофизических свойств поверхности микро- и наноразмерных объектов в электросиловой микроскопии (ЭСМ) применяют зонды-кантилеверы с высокой электропроводностью. Одной из распространённых техник создания таких кантилеверов является формирование проводящих плёнок на поверхности стандартных Si или SiN кантилеверов. В настоящее время пленки из W представляют большой интерес в качестве проводящих покрытий кантилеверов благодаря достаточно низкому удельному сопротивлению (5,3 мкОм·см) и высокой износостойкости. Наличие тонкого оксидного слоя на поверхности W может быть некритичным, поскольку при сканировании в контактных методиках ЭСМ происходит некоторый износ острия и покрытия, из-за чего может происходить удаление тонкой оксидной плёнки. Также для предотвращения окисления W возможно формироване тонких плёнок из Pt, W_xN, W_xC или WTiN, имеющих досточную стойкость к окислению.

Имеется относительно небольшое количество работ, посвящённых формированию тонких плёнок W на различных поверхностях, однако технологические особенности формирования покрытия W для кантилеверов ЭСМ недостаточно изучены и отработаны. Целью работы является исследование процесса формирования проводящих пленок W для кремниевых кантилеверов ЭСМ при помощи метода магнетронного распыления и последующего отжига в атмосфере азота.



РЭМ-изображение кантилевера с плёнкой W (а), его ВАХ контакта иглы к подложке графита (б) и ЭСМ-изображение для участка плоской тестовой решётки с областями различного типа проводимости, полученное с помощью данного кантилевера (в)

В работе было установлено, что с увеличением температуры отжига в атмосфере азота в интервале температур 400 – 900 °С удельное сопротивление плёнок W уменьшается с 75 до 21 мкОм·см, в то время как удельное сопротивление для исходных плёнок W составляло 166 мкОм·см. Обнаружено, что до отжига плёнки W были аморфными с гладкой поверхностью (шероховатость S_q = 0,3 нм, S_z = 2,9 нм), а после отжига при 900 °С они кристаллизовались, что приводило к значительному увеличению проводимости, развитию морфологии поверхности (S_q = 1,4 нм, S_z = 12,4 нм) и появлению кристаллитов. Для кремниевых кантилеверов, покрытых W и отожжённых в азотной атмосфере при 700 °С, испытание показало, что контакт зонда к подложке графита был невыпрямляющим, электрический ток в цепи возникал при приложении напряжения от нескольких милливольт, а ВАХ контакта зондов с вольфрамовым покрытием при многократных измерениях, вплоть до 5, были идентичны. Таким образом, кантилеверы с плёнками W, сформированными представленными методами, могут быть рекомендованы к проведению измерений в различных методиках ЭСМ.

Эволюция электронной структуры и топологических свойств в $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4$ (A = Ge, Sn, Pb)

А. В. Тарасов*, А. В. Ерыженков, и А. М. Шикин
*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9, Россия, *e-mail: artem.tarasov@spbu.ru*

Топологические изоляторы (ТИ) находятся в центре внимания современной физики благодаря уникальным электронным свойствам, главным образом — топологическим поверхностным состояниям (ТПС). Эти состояния устойчивы к локальным возмущениям и обратному рассеянию, что делает их перспективными для спинтроники и квантовых технологий. Нарушение симметрии обращения времени, например за счёт магнитного взаимодействия, открывает щель в спектре ТПС и позволяет реализовать квантовый аномальный эффект Холла и топологический магнитоэлектрический эффект.

Ярким примером магнитных ТИ является $MnBi_2Te_4$ — антиферромагнитный материал, в котором топологические и магнитные свойства обусловлены регулярным размещением атомов Mn в решётке. Комбинированная симметрия обращения времени и трансляции обеспечивает его топологически нетривиальный характер [1]. Один из способов настройки этих свойств — изоэлектронное замещение Mn немагнитными элементами IV группы (Ge, Sn, Pb).

В легированных системах $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4$ (A = Ge, Sn, Pb) формируются Рашба-подобные поверхностные состояния (РПС), взаимодействующие с ТПС. Во всех рассмотренных составах РПС воспроизводятся в *ab initio* расчётах и демонстрируют устойчивую эволюцию с ростом концентрации A [2, 3]. Согласно расчётам, при варьировании состава происходит переход от нетривиальной фазы с щелью к тривиальной фазе и возвращение к модифицированной нетривиальной [4]. Эксперименты по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) подтверждают энергетическое смещение и усиление выраженности РПС при увеличении содержания Ge, Sn или Pb. При высоких концентрациях A РПС распространяются вглубь кристалла и формируются с участием орбиталей замещающего элемента, проявляя признаки орбитального эффекта Рашбы.

Таким образом, системы $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4$ представляют собой универсальную платформу для изучения взаимодействия между РПС и ТПС, а также управляемых топологических фазовых переходов. Их электронная структура отличается высокой степенью вариативности, что делает эти материалы перспективными для спинтронных и квантовых технологий.

Благодарность (финансирование). Работа проведена в рамках и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00016).

Список использованных источников:
[1] M.M. Otrokov [и др.] Nature 576 (2019) 416.
[2] A.M. Shikin [и др.] Phys. Rev. B 111 (2025) 115158.
[3] A.V. Tarasov [и др.] Phys. Rev. B (2025), in press.
[4] A.V. Tarasov [и др.] Symmetry 15 (2023) 469.

Вольфрам-углеродные композиты с графеноподобной структурой: тепло- и радиационная стойкость

Д.И. Тишкевич[1]*, С.А. Герман[1], И.В. Рязанов[1], В.Д. Живулько[1], А.А. Бондарук[1], А.А. Роткович[1], Т.Н. Вершинина[2,3], Т.И. Зубарь[1], и А.В. Труханов[1]

*[1] ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки,19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: dashachushkova@gmail.com*
[2] Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980 г. Дубна, Россия
[3] Университет «Дубна», ул. Университетская, 19, 141982 г. Дубна, Россия

В данной работе исследованы композиционные материалы на основе вольфрама (W) и графеноподобного углерода (ГПУ), полученные методом горячего изостатического прессования (ГИП) при температуре 1500 °C и давлении 5 ГПа. Основной целью исследования было изучение влияния добавления ГПУ на структуру, плотность, тепловые и радиационно-защитные свойства композитов.

Установлено, что добавление ГПУ снижает плотность композитов и значительно уменьшает окисление вольфрама. Образец с содержанием 0,1 мас.% ГПУ ($W_{99.9}C_{0.1}$) показал наибольшую плотность (17,52 г/см³) и минимальное содержание оксида WO_2 (7 об.%), что свидетельствует о повышении структурной стабильности материала.

Микроструктурный анализ выявил наличие графеновых слоев в полостях композитов, что подтверждает сохранение ГПУ даже после высокотемпературного спекания. Рентгеноструктурный анализ показал, что основная фаза композитов — объемно-центрированный кубический вольфрам, при этом содержание оксида WO_2 снижается с увеличением доли ГПУ.

Рамановская спектроскопия подтвердила наличие ГПУ в ноднородностсях, а также выявила увеличение дефектности структуры углерода. Теплопроводность композитов снижается с добавлением ГПУ из-за рассеяния фононов на границах W-C, однако при концентрации ГПУ 1,0% наблюдается увеличение теплопроводности, связанное с формированием перколяционной сети графеновых слоев. Механические свойства композитов ухудшаются с увеличением содержания ГПУ, что обусловлено разрушением в областях, обогащенных графеноподобным углеродом.

Важным результатом исследования является высокая эффективность композитов в защите от гамма-излучения. Образец $W_{99.9}C_{0.1}$ продемонстрировал превосходство над свинцом по коэффициенту линейного ослабления, слою половинного ослабления и средней длине свободного пробега в диапазоне энергий 0,826–2,506 МэВ. Это делает композиты перспективными для применения в условиях, требующих одновременной радиационной и тепловой защиты, например, в аэрокосмической отрасли и ядерной энергетике. Однако для улучшения механической прочности необходимо дальнейшее снижение концентрации ГПУ и уменьшение размера графеновых чешуек.

Таким образом, композиты на основе вольфрама и ГПУ представляют собой перспективные материалы для экстремальных условий эксплуатации, сочетающие высокую радиационную стойкость и улучшенные тепловые характеристики.

XRF анализ сплавов феррита кобальта с различными стехиометрическими составами

А.Ф.Тураев*
*Бухарский государственный университет, ул. Мухаммада Икбала, 11, 705018 г. Бухара, Узбекистан, *e-mail: akbarjontorayev079@gmail.com*

В этой работе, для синтеза структур феррита кобальта ($CoFe_2O_4$), была использована Большая Солнечная Печь, находящаяся в Паркентском районе республики Узбекистан. Образцы были приготовлены из смесей оксида кобальта (CoO) и оксида железа (Fe_2O_3) в стехиометрическом соотношении CoO:Fe_2O_3 3:1, 1:1, 1:2.13, 1:3.

Таблица 1. XRF анализ полученных сплавов феррита кобальта с различными стехиометрическими составами

	№1-$Co_3FeO_{1.2}$	№2-$CoFeO_{2.5}$	№3-$CoFe_2O_4$	№4-$CoFe_{2.8}O_4$
Состав	Солержание, масс. %			
Cl	0,0080	0,0401	0,0065	0,0064
Al_2O_3	0,2280	0,2260	0,1970	0,2020
SiO_2	0,2330	0,2250	0,1970	0,1820
SO_3	0,0259	0,0409	0,0248	0,0247
Cr_2O_3	0,0495	0,0440	0,0358	0,0390
MnO	0,7640	0,531	0,3370	0,4020
Fe_2O_3	26,4	50,3	67,1	73,7
CoO	64,8	48,0	31,5	24,8
ZrO_2	0,1970	0,2370	0,3280	0,2550
SnO_2	0,0102	0,0108	0,0658	0,1270

Результаты рентгенофлуоресцентной спектрометрии (XRF) показали, что изменение стехиометрического состава сплавов кобальтита феррита напрямую влияет на их оксидный состав (таблица 1). В сплаве №1 наблюдается высокий уровень содержания CoO (64,8 мас.%) и относительно низкое содержание Fe_2O_3 (26,4 масс.%). Это указывает на избыток кобальта по отношению к железу в начальном составе, что приводит к формированию соединения с отклонением от идеального стехиометрического состава.

По мере увеличения содержания железа и уменьшения содержания кобальта (например, в образцах № 2 и № 3) наблюдается закономерное снижение доли CoO и рост содержания Fe_2O_3. В сплаве №3 достигается практически идеальное соотношение основных оксидов: CoO составляет 31,5 масс.%, а Fe_2O_3 - 67,1 масс.%, что соответствует теоретическим расчетам для данной стехиометрии.

При дальнейшем увеличении содержания железа, как в сплаве № 4, доля Fe_2O_3 возрастает до 73,7 масс.%, тогда как содержание CoO снижается до 24,8 мас.%. Это подтверждает зависимость оксидного состава от стехиометрического соотношения кобальта и железа в сплаве.

Таким образом, проведенные исследования XRF показали связь между стехиометрическим составом сплавов феррита кобальта и их оксидного состава, а также выявили присутствие примесей. Далее, для исследования фазового состава полученных сплавов были проведены исследования фазового состава полученных сплавов с помощью рентгено-фазового анализа.

XRD анализ сплавов феррита кобальта с различными стехиометрическими составами

А.Ф. Тураев*
*Бухарский государственный университет, ул. Мухаммада Икбала, 11, 705018 г. Бухара, Узбекистан, *e-mail: akbarjontorayev079@gmail.com*

В этой работе, для синтеза структур феррита кобальта ($CoFe_2O_4$), была использована Большая Солнечная Печь, находящаяся в Паркентском районе республики Узбекистан. Образцы были приготовлены из смесей оксида кобальта (CoO) и оксида железа (Fe_2O_3) в стехиометрическом соотношении $CoO:Fe_2O_3$ 3:1, 1:1, 1:2.13, 1:3. На рисунке 1 представлены рентгеновские дифрактограммы сплавов $CoFe_2O_4$ с различным стехиометрическим составом.

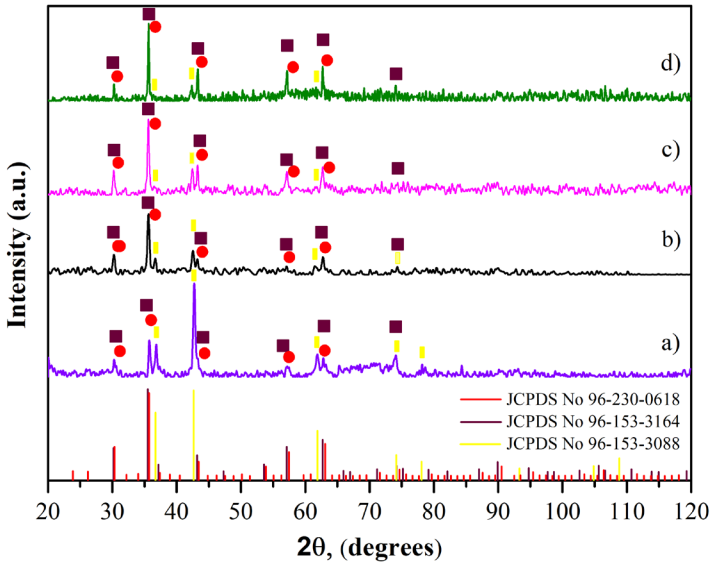


Рисунок 1. Рентгеновские дифрактограммы сплавов феррита кобальта с различным стехиометрическим составом: a) №1-$Co_3FeO_{1.2}$ (фиолетовая кривая), b) №2-$CoFeO_{2.5}$ (черная кривая), c) №3-$CoFe_2O_4$ (розовая кривая) и d) №4-$CoFe_{2.8}O_4$ (зеленая кривая).

Для идентификации фаз в сплавах использовалась программа Match! 4 с базой данных PDF-2, что позволило определить составы на основе соответствия данным JCPDS.

Сплав №1 (фиолетовая кривая) содержит 4,4% $CoFe_2O_4$, 59,2% CoO и 36,4% Fe_2O_3. Кубическая структура $CoFe_2O_4$ имеет параметры a=b=c=8.3806 Å (Fd-3m, 227). В сплаве также выявлены фазы Fe_2O_3 (P4332, 212) и CoO (JCPDS No 96-153-3088) с характерными пиками при 2θ: 36,71°, 42,65°, 61,90°, 74,17° и 78,16°.

Сплав №2 (черная кривая) состоит из 39,8% $CoFe_2O_4$, 32,8% CoO и 27,3% Fe_2O_3. С увеличением CoO возрастает содержание феррита кобальта. Сплав №3 (розовая кривая) содержит 58,1% $CoFe_2O_4$, 18,5% CoO и 23,4% Fe_2O_3, что максимально приближено к теоретическому составу чистого $CoFe_2O_4$.

В сплаве №4 (зеленая кривая) доля $CoFe_2O_4$ снижается до 27,9%, а содержание CoO и Fe_2O_3 возрастает до 24,3% и 47,8% соответственно. Таким образом, из представленных образцов наибольшее содержание фазы $CoFe_2O_4$ наблюдается у сплава с эмпирической формулой $CoFe_2O_4$, что соответствует его теоретическому составу. Эти результаты подчеркивают важность точного контроля стехиометрии для достижения желаемых фазовых составов и свойств материалов.

Структурные и магнитные переходы в композите $BiFeO_3/Bi_2Fe_4O_9$

Л. В. Удод[1]*, С. С. Аплеснин[1,2], и О. Б. Романова[1]
[1]*Институт физики имени Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Академгородок, 50, 660036 г. Красноярск, Россия, *e-mail: luba@iph.krasn.ru*
[2]*Сибирский государственный университет науки и технологий им. М. Ф. Решетнева, пр. Красноярский рабочий, 31, 660037 г. Красноярск, Россия*

Феррит висмута $BiFeO_3$ относится к мультиферроикам и характеризуется сильной взаимосвязью между магнитной и ферроэлектрической подсистемами, высокой температурой магнитного T=643 К и сегнетоэлектрического T_c=1083 К упорядочения. Кристаллическая структура ромбоэдрическая (*R3c*). Муллит $Bi_2Fe_4O_9$ также относится к классу мультиферроиков с орторомбической *Pbam* кристаллической структурой. При T=264±3 К объемный $Bi_2Fe_4O_9$ переходит в антиферромагнитное состояние.

Целью данной работы является, подавление пространственно модулированной структуры $BiFeO_3$ путем синтеза композитного соединения $Bi_2Fe_4O_9/BiFeO_3$ и определение влияния технологии синтеза, концентрации фаз композита и размера его частиц на структурные и магнитные свойства.

Композит $BiFeO_3/Bi_2Fe_4O_9$ (33 и 67 %) синтезирован метиодом твердофазной реакции. Рост концентрации муллита и увеличение среднего размера его частиц приводят к изменению магнитных свойств соединений, входящих в его состав. Согласно исследованию морфологических свойств, кристаллиты $Bi_2Fe_4O_9$ имеют средний размер 1.5-4.0 μm и окружены кристаллитами $BiFeO_3$ с размером меньше 100 нм. При температуре магнитного фазового перехода муллита (T=250 К) наблюдается излом в температурном поведении магнитной восприимчивости композита. Зависимость намагниченности от поля имеет гистерезис, где намагниченность не достигает насыщения. Кривая коэрцитивного поля H_c от температуры проходит через максимум при T=50 К и исчезает при T=150 К. Величина остаточной намагниченности при нагревании уменьшается, при T=4.2 К остаточная намагниченность равна 0,0015 emu/q и при T=150 К резко уменьшается в 3.5 раза.

Коофициент магнитострикции при T=200 и 250-260 К меняет знак вблизи температуры спин-ориентационного перехода в кристаллитах $BiFeO_3$ и при температуре Нееля в муллите. Установлен рост коэффициента магнитострикции от магнитного поля в окрестности температуры поверхностного фазового перехода (T=140 К) и при температуре спин-ориентационного перехода (T=200 К) в $BiFeO_3$ в композите. В обласи магнитных фазовых переходов наблюдается смягчение фононных мод ИК спектров $BiFeO_3/Bi_2Fe_4O_9$.

Установлено взаимодействие между фазами в композите, корреляция между структурными и магнитными свойствами. Найдено влияние предыстории на поверхностный структурный фазовый переход в композите при охлаждении в магнитном поле.

Благодарность (финансирование)

Работа выполнена при поддержке государственного задания Института физики им. Киренского.

Список использованных источников

[1] L.V. Udod и др. J. Alloy. Comp. 958 (2023) 170445.

Синтез и магнитные свойства гидроантимонатов тербия

М. Н. Ульянов[1]*, К. А. Агеев[1], и А. С. Волегов[2]
*[1]Челябинский государственный университет, ул. Братьев Кашириных, 129, 454001 г. Челябинск, Россия, *e-mail: max-39@yandex.ru*
[2]Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия

В последние годы наблюдается значительный рост интереса к сжижению водорода и других промышленных газов с применением технологии магнитного охлаждения [1]. В первую очередь, интерес к зеленому водороду вызван тем, что произведенный из возобновляемых источников энергии, он является одним из самых экологически чистых видов топлива, в идеале не выделяющим углерод и не загрязняющим атмосферу [2]. Несмотря на обилие различных материалов, поиск оптимального, перспективного для технологии магнитного охлаждения, в том числе при криогенных температурах, соединения продолжается. Поэтому целью исследования является разработка методики синтеза новых функциональных материалов на основе полисурьмяной кислоты (ПСК).

Настоящее исследование является продолжением цикла работ по изучению свойств ПСК [3-5]. В настоящей работе сообщаются результаты исследований синтеза и комплексного анализа влияния тербия на физико-химические свойства и структуру, магнитные свойства ПСК. Тербий был выбран не случайно. Соединения на основе тербия обладают гигантским магнитострикционным эффектом [6], являются одними из самых мощных магнитотвердых материалов и обладают гигантским магнитокалорическим эффектом [7]. Определена температура Кюри–Вейсса (θ_{CW} = −5 К). Отрицательное значение θ_{CW} свидетельствует о наличии слабых антиферромагнитных суперобменных взаимодействий в системе Tb-ПСК. Показано, что изменение магнитной энтропии ΔS при T = 3 К составляет ~2.2 Джкг$^{-1}$К$^{-1}$, 4.7 Джкг$^{-1}$К$^{-1}$ и 6.2 Джкг$^{-1}$К$^{-1}$ для μ_0H = 1 Тл, 3 Тл и 7 Тл соответственно. Соответствующие значения RC составляют около 8.4 Джкг$^{-1}$ и 89 Джкг$^{-1}$ для μ_0H = 1 Тл и 7 Тл соответственно.

Список использованных источников

[1] J. Lai [и др.] Acta Mater. 220 (2021) 117286.
[2] N. Sazali. Int. J. Hydrog. Energy 45 (2020) 18753-18771.
[3] F. Yaroshenko [и др.] J. Electrochem. Sci. Eng. 13(6) (2023) 911-921.
[4] F. A. Yaroshenko Chel. Phys. Math. J. 8(4) (2023) 605-616.
[5] M. N. Ulyanov [и др.] J. Magn. Magn. Mat. 604 (2024) 172294.
[6] I. V. Aleksandrov [и др.] JETP Lett. 34(2) (1981) 63-66.
[7] S. Taskaev [и др.] AIP ADVANCES 8 (2008) 048103.

Термолиз $Tb_xH_{2-3x}Sb_2O_6 \cdot nH_2O$ (x = 0.33, 0.67) пирохлоров

М. Н. Ульянов*, К. А. Агеев, и Д. А. Захарьевич
*Челябинский государственный университет, ул. Братьев Кашириных, 129, 454001 г. Челябинск, Россия, *e-mail: max-39@yandex.ru*

На сегодняшний день полисурьмяная кислота (ПСК) ($Sb_2O_5 \cdot nH_2O$, где $2<n<6$) и соединения на ее основе являются перспективными ионообменными протонпроводящими материалами. Чаще всего ПСК имеет структуру типа пирохлора [1], но встречаются сурьмяные кислоты со структурой типа ильменита или кубической типа $KSbO_3$ [2]. Высокую проводимость сурьмяных кислот со структурой типа пирохлора связывают с ее особенностями, которые заключаются в наличии каналов, пронизывающих каркас соединения. Каналы заполнены ионами оксония и молекулами воды. Удаление последних приводит к образованию безводных форм, содержащих только ОН-группы или относительно изолированные протоны. А при увеличении количества молекул воды на мольную единицу Sb_2O_5 наблюдается существенный рост проводимости (более 3 порядков) [3] Ионобменные и магнитные свойства, термолиз ПСК подробно изучались в работах [4-7].

В настоящей работе приводятся результаты исследований состава и структуры фаз, образующихся при термолизе гидроантимонатов тербия $Tb_xH_{2-3x}Sb_2O_6 \cdot nH_2O$, и определение температурных интервалов их устойчивости.

Термические исследования $Tb_xH_{2-3x}Sb_2O_6 \cdot nH_2O$ проводились с помощью синхронного термоанализатора Netzsch STA 449F5 Jupiter с фиксацией изменения массы образца и скорости ее изменения при нагреве со скоростью 10 град/мин в диапазоне температур 30-700°C. Показано, что с увеличением температуры от 30 до 700°C для соединения $Tb_{0.67}Sb_2O_6 \cdot nH_2O$ происходит монотонное уменьшение массы вещества. Потеря массы, связанная с удалением газообразных продуктов, составила 18.28%. При нагреве до 700°C наблюдается 3-х стадийное термическое превращение – до 260°C (1 стадия), 260-430°C (2 стадия), 430-700°C (3 стадия). На основе анализа газообразных продуктов, полученных с помощью масс-спектроскопии, предложены уравнения реакций термических превращений, а также на основе полученных данных определен состав химических фаз на каждой стадии термолиза, предполагая, что число атомов сурьмы при термических превращениях не изменяется, а термические превращения при увеличении температуры до 700°C в $Tb_{0.67}Sb_2O_6 \cdot nH_2O$ протекают в структуре типа пирохлора [7].

Список использованных источников

[1] F. A. Belinskaya [и др.] Russ. Chem. Rev. 49 (1980) 933-952.
[2] J. Roziere [и др.] Ann. Rev. Mater Res. 33 (2003) 503-555.
[3] A. B Yaroslavtsev [и др.] Russ. Chem. Rev. 72(5) (2003) 393-421.
[4] F. Yaroshenko [и др.] J. Electrochem. Sci. Eng. 13(6) (2023) 911-921.
[5] F. A. Yaroshenko [и др.] Chel. Phys. Math. J. 8(4) (2023) 605-616.
[6] M. N. Ulyanov [и др.] J. Magn. Magn. Mat. 604 (2024) 172294.
[7] L.Y. Kovalenko [и др.] Inorg. Mater. 55(6) (2019) 586-592.

Структурно-химическое исследование n-кремния, легированного хромом и эрбием, при различных режимах охлаждения

Ш.Б. Утамурадова, Ж.Ж. Хамдамов, К.М.Файзуллаев*, и Ж.Ш.Зарифбаев
*НИИ физики полупроводников и микроэлектроники при НУУз, ул. Янги Олмазор, 20, 100057 г. Ташкент, Узбекистан, *e-mail: jonibek.uzmu@gmail.com*

Легирование переходными (Cr) и редкоземельными (Er) элементами рассматривается как эффективный способ модификации электрических и оптических свойств кремния. Cr, внедряясь в междоузлия, образует глубокие рекомбинационные уровни E_c−0,23 эВ и увеличивает плотность дефектов [1, 2]. Er, напротив, склонен к формированию низкоомной фазы $ErSi_{2-x}$ с барьером Шоттки 0,3–0,4 эВ и проявляет фотолюминесценцию на 1,54 мкм [3]. Совместное введение Cr + Er почти не изучено; немногие работы [4] указывают на возможность пассивации Cr-центров за счёт образования комплексных соединений, однако влияние скорости охлаждения после отжига остаётся открытым вопросом. Настоящая работа направлена на заполнение этого пробела.

Монокристаллы n-Si (ρ = 2,5–10 Ω·см) последовательно легировали Cr и Er твёрдофазной диффузией (T = 1 200 °C, 1, 15 ч). Охлаждение осуществляли либо быстрым закалом (10^3 К/с), либо медленным печным способом (2 К/мин). Структуру исследовали методами Raman (λ = 532 нм), XRD (Cu Kα), SEM/EDS и TEM. Смещение главного LO-фононного пика Δω конвертировали в эквивалентное напряжение по коэффициенту −0,7 □см⁻¹/ГПа.

Быстро охлаждённый n-Si<Cr+Er> демонстрирует Δω = −2,9 см□¹ (растяжение ≈ +4,1 ГПа) и FWHM = 13,7 см□¹. При медленном охлаждении наблюдаются слабое сжатие (Δω = +0,8 см□¹; σ ≈ −1,1 ГПа) и минимальная ширина пика (8,0 см□¹). Сужение рефлекса Si (400) и появление слабых пиков $ErSi_{2-x}$ подтверждают образование упорядоченной интерметаллидной фазы. При быстром охлаждении фиксируются нанокластеры Cr-обогащённых областей (d ≈ 5 нм); медленное охлаждение приводит к их коагуляции в ориентированные наночастицы $ErSi_{2-x}$ и выравниванию распределения примесей.

Полученные данные согласуются с литературой: Cr индуцирует растягивающие напряжения и глубокие уровни [1, 2], тогда как Er способствует релаксации решётки [4, 5]. Новым является факт, что медленное охлаждение активирует «пассивационную» роль Er: образуются комплексы Cr–Si–Er, снижающие концентрацию одиночных Cr-дефектов и переводящие напряжённое состояние в лёгкое сжатие. Это подтверждает предположение [6] о потенциальной синергии Cr + Er, но конкретизирует механизм через контроль скорости охлаждения.

Быстрое охлаждение фиксирует междоузельные Cr-дефекты, приводя к растяжению решётки и росту FWHM до 13–14 см□¹.

Медленное охлаждение после совместного легирования Cr + Er формирует фазу $ErSi_{2-x}$ и комплексы Cr–Si–Er, что снижает FWHM до 8 см□¹ и переводит напряжения в сжатие.

Оптимальный технологический маршрут: последовательное введение Cr и Er с последующим медленным охлаждением, обеспечивающим высокое кристаллическое качество n-Si и перспективные опто- и электро-характеристики.

Список использованных источников

[1] M. J. Sze. Physics of Semiconductor Devices. Wiley (1981).
[2] V. P. Yarykin [и др.] Semicond. Sci. Technol. 23 (2008) 085011.
[3] J. R. Hayes [и др.] Appl. Phys. Lett. 59 (1991) 2210.
[4] S. K. Gopalakrishnan [и др.] J. Electrochem. Soc. 165 (2018) H3059.

Синаптическое поведение композитной мультиферроидной структуры ЦТС-Ni при резонансном возбуждении

Ф. А. Федулов*, Д. В. Савельев, Е. В. Болотина, М.В. Джапаридзе, и Ю.К. Фетисов
*МИРЭА - Российский технологический университет, пр. Вернадского, 78, 119454 г. Москва, Россия, * e-mail: ostsilograf@ya.ru*

В работе впервые продемонстрировано синаптическое поведение композитной мультиферроидной структуры на основе пьезокерамики цирконата-титаната свинца и магнитострикционного никеля при резонансном возбуждении магнитоэлектрического (МЭ) эффекта и приложении импульсов магнитного поля различной амплитуды и полярности.

В измерениях использовали гетероструктуру, содержащую слой из пьезокерамики цирконата-титаната свинца состава $PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$ (ЦТС-19) толщиной 250 мкм с Ag-электродами и слой электролитически осаждённого Ni толщиной 62 мкм (рис.1). Размеры гетероструктуры в плоскости составляли 19 мм × 8 мм. Осаждение Ni на поверхность Ag-электродов проводили в водном растворе солей $NiCl_2$ и $NiSO_4$. Скорость осаждения Ni при плотности тока 1 А/см^2 составляла 1 мкм/мин.

При исследовании влияния импульсов магнитного поля на величину МЭ коэффициента α_E к гетероструктуре прикладывали импульсы магнитного поля различной полярности с амплитудой H = 0-600 Э и длительностью τ = 100 мс, а после измеряли величину выходного МЭ напряжения на частоте резонанса при амплитуде возбуждающего переменного поля h = 3 Э.

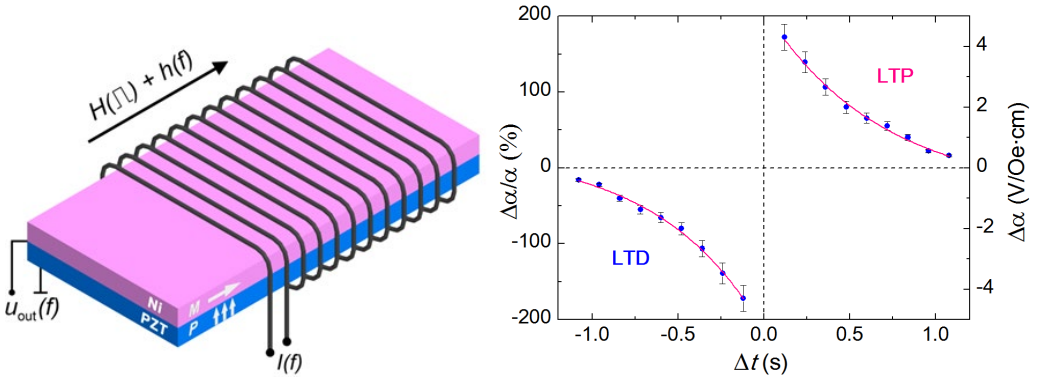


Рисунок 1. Схематическое изображение исследуемой МЭ структуры (слева) и зависимости абсолютного $\Delta\alpha_E$ и относительного $\Delta\alpha_E/\alpha_{Ei}$ изменения МЭ коэффициента α_E по асимметричному STDP-правилу Хебба от временного окна Δt (справа)

МЭ коэффициент α_E рассматривали в качестве аналога синаптического веса, а выходное электрическое напряжение гетероструктуры интерпретировали как возбуждающий (excitatory postsynaptic potential, EPSP) или тормозной (inhibitory postsynaptic potential, IPSP) постсинаптический потенциал. В ходе исследования показана возможность изменения значения коэффициента α_E за счёт изменения остаточной намагниченности никеля M_r при приложении импульсов магнитного поля. Продемонстрирована возможность имитации долгосрочного возбуждения (long-term potentiation, LTP) и угнетения (long-term depression, LTD) в МЭ структуре, а также синаптической пластичности, зависящей от времени прихода спайка (spike-timing-dependent plasticity, STDP).

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-01053, https://rscf.ru/project/23-72-01053/. Часть измерений проведена на оборудовании Объединенного Центра коллективного пользования РТУ МИРЭА.

Исследование кристаллической структуры и магнитного упорядочения семейства теллуратов $K_2Ni_2TeO_6$ и $Li_2Ni_2TeO_6$ методом нейтронной дифракции

Н. С. Фокин*, А. Е. Суслопарова, и А. И. Курбаков
*ФГБУ«ПИЯФ им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Орлова Роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия, *e-mail: Fokin_ns@pnpi.nrcki.ru*

Слоистые оксиды семейства $A_2M_2TeO_6$, где A –щелочной, а M – переходный металл, относятся к большому классу квазидвумерных (или природных двумерных) соединений, которые в последние годы всесторонне исследуются из-за их разнообразных, нетривиальных магнитных и транспортных свойств [1].

В настоящей работе, методом нейтронной порошковой дифракции изучены кристаллическая структура и особенности магнитного упорядочения в двух квазидвумерных оксидах стехиометрического состава $Li_2Ni_2TeO_6$, полученных путём ионообменного синтеза из разных прекурсоров: $Na_2Ni_2TeO_6$ и $K_2Ni_2TeO_6$.

Эксперименты проводились на нейтронных порошковых дифрактометрах G4.1 (LLB, Сакле, Франция) в диапазоне температур 1,5-35 K (λ=2,4283 Å) и SPODI (RNSH Maier-Leibnitz, Мюнхен) при температуре T=300K (λ=2,5362 Å).

Обработка полученных экспериментальных данных осуществлялась с применением полнопрофильного анализа методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

Изученный, в настоящей работе прекурсор - $K_2Ni_2TeO_6$ кристаллизуется в гексагональную пространственную группу *$P6_3/mcm$,* которая характеризуется попеременным чередованием (вдоль направления оси *c*) магнитоактивных слоев, образующих сотообразную упаковку из ионов Ni^{2+} и Te^{6+} координированных с кислородом с немагнитоактивными слоями, состоящими из ионов K^+. Оба образца $Li_2Ni_2TeO_6$, вне зависимости от прекурсора кристаллизуются в орторомбическую пространственную группу *Cmca*, которая относится к типу T2. Данная кристаллическая конфигурация также характеризуется попеременным чередованием магнитоактивных слоев, состоящих из ионов Ni^{2+} и Te^{6+} с немагнитоактивными слоями, содержащими ионы Li^+.

Существенным отличием двух образцов является координация щелочного металла (Ионы K^+ в образце прекурсора образуют призматическую координацию с ионами кислорода) и расстояние между соседними магнитоактивными слоями, связанное с существенными различиями в размерах ионов.

С использованием подхода базисных векторов неприводимых представлений (BASIreps, программный пакет Fullprof), были предложены решения в виде магнитных структур на основании экспериментальных нейтронограмм, измеренных при самой низкой температуре T = 1,5 K. Модели характеризуются сотовой слоистой структурой, внутри которой реализуется упорядочение типа “страйп”, где присутствуют выделенные полосы антиферромагнитно упорядоченных магнитных моментов ионов никеля, лежащих в одной плоскости. Величины магнитных моментов для образца, полученного из $Na_2Ni_2TeO_6$ составляют $M = 3.34(6)\mu_B/Ni^{2+}$и $M = 2.48(6)\mu_B/Ni^{2+}$ для образца, полученного из $K_2Ni_2TeO_6$.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, грант № 24-12-00217

Список использованных источников

[1] J. M. Tarascon. Nature 414 (2001) 359-367.

Исследование влияния фазовых трансформаций на термостойкость композитных керамик

Ш. М. Хаметов*
*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, пр. Сатпаева, 2, 010008 г. Астана, Республика Казахстан, *e-mail: kh.shyngys@gmail.com*

Целью данного исследования является выявление влияния структурных особенностей и изменений фазового состава композитных $Al_2O_3 – ZrO_2$ керамик при добавлении в них стабилизирующих добавок в виде Y_2O_3, добавление которых приводит к инициализации процессов фазовых полиморфных трансформаций в диоксиде циркония, что в свою очередь сопровождается изменением плотности, и как следствие, размерными эффектами. Немаловажную роль в исследованиях занимают экспериментальные работы, направленные на выявление устойчивости стабилизированных композитных керамик на устойчивость к термошоковым воздействиям, вызванным резким изменением температуры, а также длительному воздействию высоких температур, приводящих к инициализации процессов окисления. Интерес к данной тематике исследований обусловлен в первую очередь возможностью оценки применимости предложенных композитных керамик в качестве термобарьерных или теплоизоляционных керамических материалов, способных выдерживать длительное воздействие высоких температур, а также служить в качестве жертвенных керамических покрытий в реактивных двигателях.

В ходе проведенных исследований было установлено, что добавление в малых весовых долях содержания Y_2O_3 в состав композитных керамик приводит к уплотнению керамик, без инициализации процессов полиморфных трансформаций диоксида циркония. Однако в случае концентрации Y_2O_3 выше 0,1 М наблюдаемые процессы полиморфных трансформаций в диоксиде циркония приводят к формированию плотной фракции зерен, равновероятно распределенной в матрице оксида алюминия. Результаты экспериментальных работ по выявлению устойчивости к термическому воздействию, включающему быстрый нагрев и резкое остывание образцов, показали, что стабилизированные композитные керамики обладают более выраженной стабильностью к сохранению прочностных характеристик, включая твердость и устойчивость к однократному сжатию и трехточечному изгибу. Определено, что основным упрочняющим фактором в данном случае является стабилизация диоксида циркония Y_2O_3, приводящее к полиморфным трансформациям, с последующим доминированием тетрагональной или кубической фазы (в зависимости от концентрации стабилизирующего допанта Y_2O_3). При испытаниях на длительный термический отжиг, моделирующий процессы термического старения было установлено, что стабилизация композитных керамик допантом Y_2O_3 приводит к увеличению термостойкости за счет сдерживания процессов коррозии, возникающих в результате проникновения кислорода в приповерхностные слои керамик, наиболее подверженные контакту со средой при термическом нагреве.

Влияние дисперсности порошков, полученных из монокристаллического кремния, и режимов изготовления на теплофизические свойства экспериментальных образцов

А. А. Шевченок*, М. В. Королевич, и В. Н. Болодон
УО «Белорусский государственный аграрный технический университет», пр. Независимости, 99/1, 220023 г.Минск, Беларусь
* e-mail: *alexshev56@mail.ru*

Важной задачей при конструировании оснований гибридных интегральных микросхем (ГИМС) является отвод тепла от большого количества близко расположенных на подложке тепловыделяющих компонентов, поэтому представляют интерес исследования теплофизических характеристик таких материалов.

Исследование теплового расширения образцов оснований из субмикронных и микрометрических порошков кремния, полученных из отходов микроэлектронного производства, было осуществлено дилатометрическим методом (как на сырых, так и на спеченных образцах с использованием дифференциального дилатометра фирмы «Netsch». Исследуемые образцы имели прямоугольную форму длиной 50 мм размером диагонали 5 мм. Установка позволяла работать в интервале температур от 20 до 1500 ^{0}C в вакууме 10^{-4} – 10^{-5} мм рт. ст. со скоростью нагрева от 0,2 до 200 град/мин. Экспериментальные данные по линейной усадке статически спрессованных образцов измельченного кремния в зависимости от температуры обработки при нагреве в вакууме в дилатометре со скоростью нагрева 5^{o}C/мин до температуры 1000 ^{o}C показали следующее. Наиболее интенсивно процесс усадки в исследованном интервале температур шел в диапазоне 600-900^{o}C, начиная с 80-й минуты от начала спекания. После 160 минут спекания процесс усадки экспериментальных образцов существенно замедлялся и примерно сравнивался с начальным этапом усадки (до 15 мин). Перегибы на кривой $\Delta L=f(T)$ свидетельствовали о возможной смене механизмов уплотнения экспериментальных образцов при нагреве в вакууме. Полученное в наших экспериментах значение температурного коэффициента линейного расширения для чистого кремния (1300 ^{o}C, 2 ч) составило ~ $4*10^{-6}$ К$^{-1}$.

Проведены исследования по определению коэффициента теплопроводности экспериментальных образцов, полученных по разным технологическим режимам из измельченных порошков монокристаллического кремния различной дисперсности. Установлено, что более высокий коэффициент теплопроводности имели экспериментальные образцы, полученные из более крупного порошка кремния (дисперсностью 1-3 мкм, $\lambda \sim 20 \div 25$ Вт/м·К). Образцы из ультрадисперсного порошка (d ~ 0,1 – 0,2мкм) имели более низкий коэффициент теплопроводности ($\lambda \sim 13 - 14$ Вт/м·К). Вероятно, полученные нами более низкие значения теплопроводности (почти в 2 раза) для образца из ультрадисперсного порошка (d ~ 0,1-0,2 мкм), чем для образца из микронного порошка (d ~ 1- 3 мкм), соответственно 13 и 25 Вт/м·К, связаны с дополнительным рассеянием фононов на границах зерен у более мелкозернистого образца. Следует отметить, что хотя полученное нами значение теплопроводности для образцов из микрометрического порошка кремния (d ~ 1- 3 мкм) без легирующих добавок, спеченного на воздухе при 1200 ^{0}C, 2 ч., составило 25 Вт/м·К, и это ниже значения теплопроводности монокристаллического кремния 83,8 Вт/м·К, но сравнимо с теплопроводностью сапфира (18 ÷ 27 Вт/м·К) и гораздо выше теплопроводности монокристалла кварца (12 Вт/м·К)и ситаллов (1 ÷ 2 Вт/м·К).

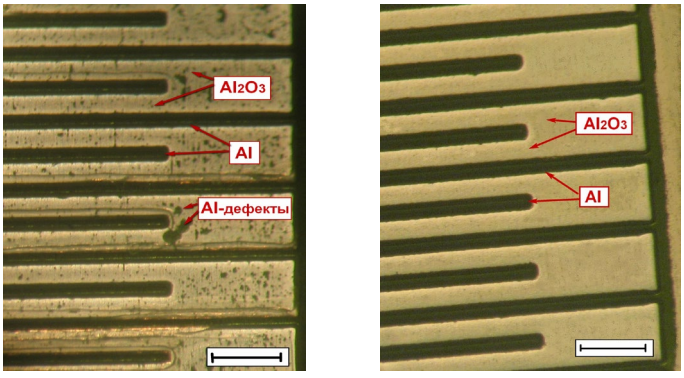
Влагозависимые чувствительные элементы на основе двухслойных нанопористых мембранных Al_2O_3-структур со встроенной системой алюминиевой металлизации

Д. Л. Шиманович*
*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 г. Минск, Беларусь, *e-mail: ShDL@tut.by*

К вопросу технологии изготовления сенсоров влажности и проблеме повышения их чувствительности и стабильности характеристик уделяется много внимания в научном плане. Известно, что получаемые в процессе электрохимического анодирования алюминия пористые анодные оксидные пленки [1, 2] хорошо адсорбируют влагу и являются весьма перспективным материалом для применения их в качестве влагочувствительных сенсорных элементов контроля параметров окружающей среды.

Отличительной особенностью в конструкции и способе изготовления разработанных сенсоров влажности является то, что они содержат чувствительный к влаге элемент (конденсатор гребенчатого типа, представляющий собой встречно-штыревую решетку с обкладками из алюминия), сформированный на основе двухслойной свободной анодной мембраны оксида алюминия, которая выполняет роль межэлектродной диэлектрической среды такого конденсатора и одновременно роль несущей диэлектрической подложки. Другими словами, предлагается изготовление сенсорных структур не по тонкопленочной технологии, предусматривающей вакуумное напыление тонкого слоя Al (не более 3 мкм) на диэлектрическую подложку и последующее электрохимическое анодирование открытых от фоторезистивных масок участков напыленного Al на всю его толщину, а путем проведения двухстороннего толстослойного анодирования образцов из фольги Al (до 200 мкм) с предварительно сформированным фоторезистивным рисунком. Это позволяет получать систему, где обкладки конденсатора расположены (вмонтированы) в объеме свободной мембранной пластины анодного Al_2O_3. Причем, толщину обкладок встречно-штыревого конденсатора можно задавать любую по толщине исходной Al фольги.

Была оптимизирована методика биполярного анодирования в двухкамерной электрохимической ячейке для устранения дефектных алюминиевых включений внутри двухслойных мембранных алюмооксидных Al_2O_3-структур, которые создавали электрические замыкания встречно-штыревых конденсаторов емкостных чувствительных элементов (рисунок 1).



(а) (б)

Рисунок 1 – Фото мембранных Al_2O_3-пластин до (а) и после (б) проведения биполярного анодирования

Список использованных источников

[1] Д.Л. Шиманович [и др.] Известия НАН Беларуси 2 (2014) 19-23.
[2] Д.Л. Шиманович. Наноматериалы и наноструктуры - XXI век 5 (2014) 18-22.

Конструктивно-технологические приемы создания топологических зон для открытого выхода на несущие алюминиевые основания в толстослойных Al_2O_3-покрытиях

Д. Л. Шиманович*
*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 г. Минск, Беларусь, e-mail: ShDL@tut.by**

Исследованы технологические приемы толстослойного анодирования алюминия [1-5] в локальных топологических областях при различных методах маскирования для формирования открытых зон выхода на несущие алюминиевые основания с целью потенциальной возможности дальнейшего контактного монтажа мощных кристаллов непосредственно на металлизированные площадки (контакт «Al-основание – термоплощадка кристалла»). Такой технологический подход позволяет исключить диэлектрическую составляющую на основе анодного оксида алюминия с низким параметром коэффициента теплопроводности в местах контакта и тем самым увеличить эффективность теплоотвода в технологии создания матричных многокристальных систем.

Проведены экспериментальные исследования по определению коэффициента объемного роста толстослойных покрытий на основе пористого оксида алюминия и показано, что эти значения варьируются технологическими (электрохимическими, температурными) режимами оксидирования. Установлен линейный характер зависимостей коэффициента объемного роста от напряжения анодирования при формировании пленок Al_2O_3 в 15%-ной H_2SO_4 и в 5%-ной $H_2C_2O_4$ при различных температурах электролитов. Экспериментально выявлено, что при анодировании алюминиевого сплава АМГ-2М в потенциостатическом режиме при напряжении формовки U ~70 В в 5%-ной $H_2C_2O_4$ при температуре T ~22-24 ^oC, коэффициент объемного роста составляет ~1,46. Осуществлен сравнительный анализ методов маскирования (в присутствии фоторезистивной маски и маски из плотного анодного оксида) и с помощью методики поперечного микрошлифа изучены профили бокового ухода под маску на границе раздела «Al–Al_2O_3» при локальном глубоком анодировании Al. Отработаны и оптимизированы 4 варианта технологических методов формирования открытых зон выхода на Al-основания в Al_2O_3-покрытиях: метод локального химического травления в предварительно сформированном сплошном Al_2O_3-слое; метод локального толстослойного анодирования в присутствии фоторезистивной маски; метод локального глубокого анодирования с защитным маскированием на основе плотного Al_2O_3; метод локального двухстадийного анодирования с промежуточным травлением Al_2O_3, сформированного на 1-ой стадии. Установлено что для исключения рельефности поверхности («колодцев») и для создания планарных топологических зон выхода на Al-основания (на линии поверхностной системы «Al–Al_2O_3») при условии коэффициента объемного роста ~1,5 при формировании конечных Al_2O_3-покрытий определенной толщины двухстадийным анодированием, необходимо на 1-ом этапе формировать Al_2O_3 толщиной в 2 раза меньше, чем на 2-ом этапе.

Список использованных источников

[1] Д.Л. Шиманович [и др.] Доклады БГУИР 3 (2019) 5-11.
[2] Д.Л. Шиманович [и др.] Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения 14 (2014) 163-165.
[3] Д.Л. Шиманович. Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения 15 (2015) 79-82.
[4] В.А. Сокол. Анодные оксиды алюминия. Бестпринт (2011) 432.
[5] Д.Л. Шиманович [и др.] Известия НАН Беларуси 2 (2014) 19-23.

Гранулированный МОКП фумарат алюминия с полимерным связующим

А. С. Мурашко[1,2], В. В. Паньков[2], и Т. Г. Шутова[1]*
[1]*ГНУ «Институт химии новых материалов НАН Беларуси», ул. Ф.Скорины, 36, 220084 г.Минск, Беларусь, e-mail: shutova@ichnm.by**
[2]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 г. Минск, Беларусь*

Металл-органические координационные полимеры (МОКП) представляют собой кристаллические порошки, которые благодаря своей пористой структуре и развитой удельной поверхности могут выступать в качестве дессикантов. Влагопоглощение некоторых МОКП при средней и высокой относительной влажности (RH) более чем в 3 раза превосходит цеолит 4 Å. Нерешенной остается проблема гранулирования порошков МОКП в более крупные частицы, с целью улучшения механических свойств композитов и уменьшения образования пыли при их использовании [1].

Фумарат алюминия (Al-fum) синтезировали согласно [2]. Порошок Al-fum растирали в ступке и просеивали через сито 200 мкм. Для получения гранулированного композита порошок Al-fum смешивали с дисперсией поливинилацетатата (ПВА, 13 % масс., KAPRAL) или раствором поливинилового спирта (ПВС, 16/1, ГОСТ 10779-72) с соотношением масс, равным 9 : 1. Полученную вязкую массу протирали через сито 1,5 мм и формованные гранулы обкатывали в мелкоизмельченном порошке Al-fum. Две фракции гранул с размерами 1,5 мм и 200 мкм выделяли последовательным просеиванием через калибровочные сита. Гранулы сушили на воздухе при комнатной температуре 15 ч и досушивали при 100°C не менее 5 ч. Влагопоглощение (W) гранулированного Al-fum определяли гравиметрически после выдерживания 24 ч при заданной RH, которую создавали в закрытой ячейке согласно [2].

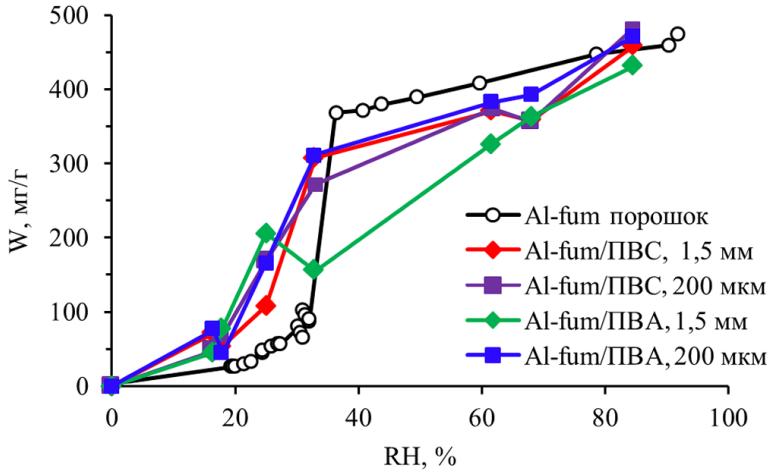


Рисунок 1. Зависимость влагопоглощения гранул Al-fum с различными связующими полимерами от относительной влажности. T = 20±1 ^{0}C

Гранулирование с ПВА и ПВС улучшает поглощение водяного пара Al-fum при RH<30 %, что расширяет рабочий диапазон дессиканта. При высокой относительной влажности (RH 80%) влагопоглощение порошка Al-fum и гранулированного композита сравнимы.

Список использованных источников

[1] T. Shutava [и др.] **Dalton Trans 51** (2022) 7053-7067.
[2] T. Shutava [и др.] Open Chem. Eng. J. 19 (2025) e18741231366263.

Связь между фотоупругостью и поляризуемостью в кристаллах типа силленита

Ф.Р. Ахмеджанов и М.И. Элбоева*
*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АНРУз, ул.Дурмон йули 33, 100125 г. Ташкент,Узбекистан, *e-mail: elboyevamoxinur1990@gmail.com*

Кристаллы со структурой силленита ($Bi_{12}SiO_{20}$, $Bi_{12}GeO_{20}$, $Bi_{12}TiO_{20}$) имеют кубическую симметрию, в них отсутствует инверсная симметрия, и они обладают пьезоэлектрическим, фотоупругим, электрооптическим и электрогирационным эффектами. Благодаря этим свойствам кристаллы широко используются в качестве активной среды в различных устройствах обработки информации.

В данной работе исследования фотоупругих свойств этих кристаллов проводились с помощью Брэгговской дифракции света на звуке [1, 2]. В качестве источника света использовался лазер (λ_0=632.8 нм). Акустические волны возбуждались с помощью пьезопреобразователей из кварца. Эффективные фотоупругие константы определялись модифицированным методом Диксона-Коэна. При этом акустическая волна возбуждалась попеременно со стороны эталона, или со стороны образца. При возбуждении звука со стороны эталона определяются значения интенсивности света, дифрагированного в эталоне I_{1S} и образце I_{1X}. При возбуждении звука со стороны образца определяются интенсивности света в образце I_{2X} и эталоне I_{2S}. В качестве эталона использовался образец плавленного кварца

Значение эффективной фотоупругой константы $p_{эфф}$ для каждой исследованной геометрии Брэгговской дифракции света определялось из соотношения [9]:

$$\left[\frac{p_{эфф}^2 n^6}{\rho V^3}\frac{n^2}{(n+1)^4}\right]_x = \left[\frac{p_{эфф}^2 n^6}{\rho V^3}\frac{n^2}{(n+1)^4}\right]_s \left(\frac{I_{1x}I_{2x}}{I_{1s}I_{2s}}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

где ρ - плотность кристалла; n – показатель преломления; V – скорость акустической волны, на которой происходит дифракция, $p_{эфф}$ - эффективная фотоупругая постоянная. В выражении (1) обозначения «s» и «x» указывают соответственно на характеристики эталонного (стандартного) и исследуемого образцов Точность определения $p_{эфф}$ по отношению к эталону составляла ~10%.

Исследования проводились для таких геометрий дифракции, когда $p_{эфф}$ было равно одной из компонент тензора фотоупругости p_{11} или p_{44} этих кристаллов. На рис.1 показана зависимость этих констант от радиуса катионов Ge, Si и Ti. Видно, что значения фотоупругой константы p_{11} увеличивается прямо пропорционально ионному радиусу катионов (сплошная линия). Такая же зависимость от радиуса катионов (штриховая линия) наблюдалась для кристаллов фторидов щелочноземельных металлов в [2].

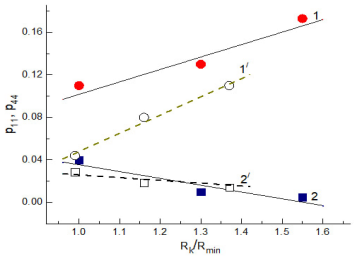


Рисунок 1. Зависимость фотоупругих коэффициентов кристаллов $Bi_{12}SiO_{20}$, $Bi_{12}GeO_{20}$, $Bi_{12}TiO_{20}$ от радиуса катионов (1 - красные точки - p_{11}, 2 - синие точки - p_{44})

Таким образом, результаты исследования показывают связь между фотоупругостью и поляризуемостью в кристаллах типа силленита.

Список использованных источников

[1] Э.Д. Дьелесан [и др.] Упругие волны в твердых телах. Наука (1982) 342.
[2] О.В.Шакин ФТТ 13(12) (1971) 3714-3716.

Диод с барьером Шоттки на основе Ga_2O_3 с напряжением пробоя более 1 кВ

Н. Н. Яковлев*, А. В. Алмаев
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
*634050 г. Томск, Россия, *e-mail: nik_mr_x@mail.ru*

В настоящее время необходимость повышения эффективности работы систем связи, электротехнического оборудования, контроллеров индуктивных моторов и источников питания, требует разработки компонент силовой электроники, отличающиеся от приборов на основе Si, GaN и SiC более высокими характеристиками. В качестве базового материала таких компонент представляет интерес β-Ga_2O_3. Коммерческие кристаллы β-Ga_2O_3 являются более совершенными в сравнении с другими широкозонными полупроводниками (GaN и SiC). Достигнута плотность дислокаций для кристаллов β-Ga_2O_3 - 10^4 $см^{-2}$.

Оценки показали, что Baliga и Johnson figures of merit, используемые для выбора полупроводника при создании силовых металл-оксид-полупроводник полевых транзисторов (MOSFET), β-Ga_2O_3 примерно в 3000 раз выше, чем у Si. Также по этим параметрам β-Ga_2O_3 значительно превосходит широкозонные GaN и SiC. Возможность легирования оксид галлия мелкими донорами до концентрации 10^{21} $см^{-3}$ является значительным преимуществом перед ультра-широкозонными $Al_{0,7}Ga_{0,3}N$ и алмазом.

Полученные, в данной работе, образцы диодов были протестированы на испытательном стенде. В ходе проведенных тестов были измерены ВАХ и ВФХ диодов. На первом этапе тестирование измерения проводились при низком напряжения до 2 В с шагом 0.02 В, для определения электрофизических характеристик полученных структур с высокой точностью. Диоды демонстрируют выпрямляющие свойства.

Пробивные напряжения Vbr для диода с барьером Шоттки с охранным кольцом из NiO составляют 1019 В, ток утечки при 1000 В 4,67 нА (рисунок 1). Измерения проводились в диапазоне напряжений от 0 до 1100 В, с шагом 0,5 В и ограничением по току 1 А. После наступления пробоя, происходит выгорание омического контакта, образец не разрушается, но теряет выпрямительные свойства.

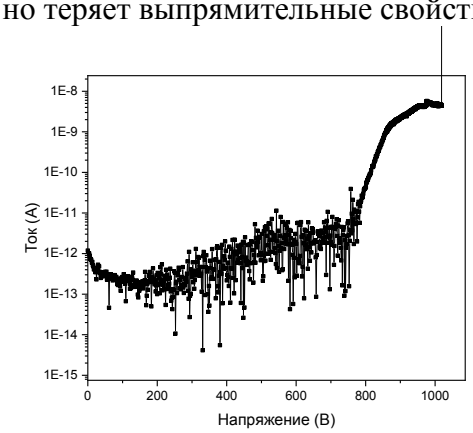


Рисунок 1. Обратная ветвь ВАХ при комнатной температуре в полулогарифмических координатах.

Получены значения высоты барьера Шоттки, коэффициента идеальности и плотность тока насыщения составила 1,72 эВ, 1,35 и $8{,}05 \cdot 10^{-12}$ $А/см^2$ соответственно. Диоды показали высокий коэффициент выпрямления – $6{,}2 \cdot 10^{10}$ отн. ед. при приложенном напряжении ±2 В и могут быть использованы в силовой электронике.

Благодарность (финансирование). Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-0021

Гетеропереход NiO/β-Ga_2O_3, полученный на объемном кристалле оксида галлия

Н. Р. Матрос[1]*, А. Я. Поляков[1], В. И. Николаев[1,2,3], И. В. Щемеров[1], А. А. Васильев[1], А. В. Черных[1], Д. С. Саранин[1], Л. А. Алексанян[1], А. А. Романов[1], В. М. Крымов[3], С. В. Шапенков[3], и П. Н. Бутенко[1,2,3]

*[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Ленинский пр., д. 4, стр. 1, 119049 г. Москва, Россия, matros.nr@misis.ru**

[2]Институт Иоффе, ул. Политехническая, 26, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия

[3]ООО «Совершенные кристаллы», ул. Политехническая, 28А, 194223, г. Санкт-Петербург, Россия

Оксид галлия бета-полиморфа – это полупроводник с большой шириной запрещённой зоны около 4,8 эВ, который позволяет создавать силовые приборы с характеристиками, превышающими характеристики, приборов на основе карбида кремния, нитрида галлия при том большом преимуществе, что совершенные монокристаллы Ga_2O_3 можно выращивать из расплава, например, методом Чохральского. Недостатком Ga_2O_3 является трудность получения проводимости p-типа, что заставляет рассматривать возможность использования p-n гетеропереходов с другими широкозонными материалами с проводимостью p-типа, важнейшим из которых является NiO. Исследуемые образцы p-NiO/n-Ga_2O_3 были получены на объемном β-Ga_2O_3, с p-NiO, приготовленным ионным распылением и имевшем концентрацию дырок около 10^{19} $см^{-3}$. Разрез структуры представлен на рисунке 1. Для сравнения были также сформированы образцы с диодом Шоттки, и эпитаксиальные аналогичной конструкции.

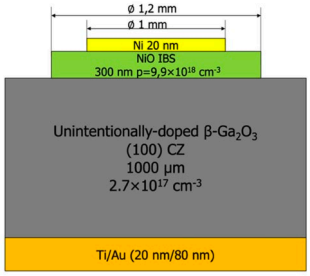


Рисунок 1. Разрез структуры гетероперехода

Образцы характеризовались измерениями вольт-амперных (I-V) и вольт-фарадных характеристик (C-V), а также характеристик емкости от частоты (C-F), спектроскопией адмиттанса и релаксационной спектроскопией глубоких уровней (DLTS).

CF характеристики объемного кристалла схожи с эпитаксиальными структурами, с температурно зависимой ступенькой в емкости, вызванной глубокими центрами, влияющими на емкость и проводимость на низких частотах (для диодов Шоттки частотная зависимость емкости отсутствует). Адмиттанс спектроскопия показала два пика проводимости с активационными энергиями Ea_1 = 0,16 эВ и Ea_2 = 0,12 эВ. CV характеристика показала одинаковую концентрацию доноров в гетеропереходе и диоде Шоттки на объемном β-Ga_2O_3, но высокую концентрацию глубоких центров ($2 \cdot 10^{17}$ $см^{-3}$) в интерфейсной области с уровнями около Ec - 0,16 эВ. DLTS спектры гетеропереходов и диодов Шоттки схожи, но для NiO/β-Ga_2O_3 концентрация ловушек в области вблизи гетероперехода выше. Гетеропереход пробивается при более высоком напряжении из-за слоя NiO, который снижает краевое электрическое поле. Показано, что выращенные кристаллы Ga_2O_3 позволяют приготовить p-n гетеропереходы с повышенными пробивными напряжениями.

Влияние легирующей примеси переходного металла на фотоэлектрические свойства пленок PbS(I)

А. В. Поздин[1]* и Л. Н. Маскаева[1,2]
[1]*Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: andrej.pozdin@yandex.ru*
[2]*Кафедра химии и процессов горения. Уральский институт ГПС МЧС России, ул. Мира, 22, 620022 г. Екатеринбург, Россия*

В современной полупроводниковой технике сульфид свинца (PbS) представляет собой один из наиболее перспективных материалов для применения в оптоэлектронных устройствах, включая фотодетекторы, фотовольтаические элементы и химические сенсоры. Данный материал характеризуется комплексом уникальных физико-химических свойств, определяющих его практическую значимость в вышеуказанных областях. Результаты предыдущих исследований показали, что вводимая легирующая добавка в виде солей переходных металлов кобальта и никеля [1,2], демонстрирует существенное влияние на фотоэлектрические характеристики. В связи с этим настоящее исследование посвящено изучению влияния синергетического эффекта совместного легирования анионом (I^-) и катионом Co^{2+} (Ni^{2+}) в процессе химического осаждения на фотоэлектрические свойства пленок PbS.

Пленки PbS(I) получены химическим осаждением из водных растворов, содержащих $Pb(CH_3COO)_2$, $Na_3C_6H_5O_7$, NH_4OH, NH_4I и $(NH_2)_2CS$. Легирование пленок PbS(I) ионами Co^{2+} или Ni^{2+} осуществляли путем дополнительного введения в реактор от 0,001 до 0,02 моль/л $CoCl_2$ или $NiCl_2$. Все пленки осаждали на обезжиренные подложки из предметного стекла при 353 K в течение 90 минут.

Следует отметить, что полученные пленки обладают выраженной чувствительностью к излучению ближнего ИК-диапазона спектра без проведения дополнительных операций фотосенсибилизации (рисунок 1). В качестве основного параметра, определяющих их практическое использование, является вольтовая чувствительность U_S.

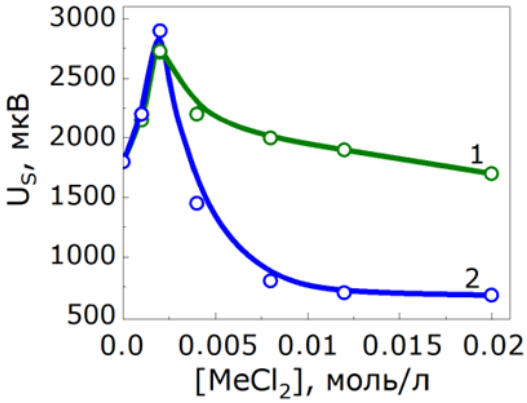


Рисунок 1. Зависимость вольтовой чувствительности *Us* пленок PbS(I, Co) (1), PbS(I, Ni) (2) от концентрации $MeCl_2$ в реакционной ванне

Введение соли переходного металла в пленку PbS(I) до 0,002 моль/л способствует росту вольтовой чувствительности с 1700 до ~2500 (рисунок 1, кривая 1) и ~2700 (рисунок 1, кривая 2) мкВ. Дальнейшее повышение концентрации $CoCl_2$ или $NiCl_2$ в реакционной смеси до 0,02 моль/л сопровождается снижением вольтовой чувствительности до 1700 и 700 мкВ, соответственно.

Список использованных источников

[1] S. Horoz [и др.] J. Ovonic Res. 14 (2018) 201-208.
[2] M.A. Mora-Ramírez [и др.] Optik. 238 (2021) 166629.

Ориентационная и температурная зависимость эластокалорического эффекта в монокристаллах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$

Э. И. Янушоните[1]*, Е. Ю. Панченко[1], Ю. И. Чумляков[1]
[1]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050, e-mail yanushonite98@mail.ru**

На сегодняшний день эластокалорические материалы являются перспективными для создания технологий твердотельного охлаждения [1]. Исходя из этого в данной работе на исходных и состаренных при 773 К, 1 ч монокристаллах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$, испытывающих $L2_1$-10M/14M-$L1_0$ мартенситные првращения (МП), проведено исследование эластокалорического эффекта (ЭКЭ) при сжатии в циклах нагрузка/разгрузка в температурном интервале проявления сверхэластичности (СЭ) в зависимости от ориентации. Для исследования выбраны две ориентации в аустенитном состоянии [001] и [011]. За ЭКЭ принимали величину адиабатического охлаждения ΔT_{ad} при обратном МП, осуществленном при высокой скорости разгрузки 6,7 10^{-1} $с^{-1}$.

Экспериментально показано, что в [011]-кристаллах, характеризующихся низкими прочностными свойствами (400-500 МПа), широким механическим гистерезисом ($\Delta\sigma$ = 80-130 МПа) и процессами раздвойникования $L1_0$-мартенсита под нагрузкой, стабильная величина ΔT_{ad} = 8,2 К наблюдается не во всем интервале СЭ (от 313 К до 423 К), а только в узком интервале температур 20-30 К (от 313 К до 348 К), далее с ростом температуры испытания до Т = 423 К величина ΔT_{ad} убывает в 1,3 раза. Старение при 773 К, 1 ч в [011]-монокристаллах приводит к увеличению температурного интервала СЭ до 125 К (от 298 до 423 К) за счет снижения температуры A_f, широкому механическому гистерезису $\Delta\sigma \geq$ 140 МПа и стабильной величине ЭКЭ ΔT_{ad} = 8,5 К в интервале температур 40-50 К (от 298 до 348 К) по сравнению с исходными [011]-кристаллами.

В высокопочных (800-1500 МПа) [001]-кристаллах, характеризующихся узким механическим гистерезисом $\Delta\sigma$ = 35-50 МПа и отсутствием процессов раздвойникования $L1_0$-мартенсита, ЭКЭ со стабильной величиной ΔT_{ad} = 10,1 К, не зависящей от температуры испытания, наблюдается во всем интервале СЭ от 298 К до 493 К. При старении 773 К, 1 ч в [001]-кристаллах наблюдается более широкий в 1,4 раза температурный интервал СЭ $\Delta T_{СЭ}$ = 270 К (от 278 до 548 К) и ЭКЭ со стабильной величиной $\Delta T_{ad} \approx$ 9,0 К, механический гистерезис равен $\Delta\sigma \approx$ 60–67 МПа.

Полученные экспериментальные значения величины ΔT_{ad} для исходных и состаренных [001]-монокристаллов $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ близки к теоретическим значениям $\Delta T_{ad}^{теор}$ = 10,2 и 10,5 К, рассчитанным с экспериментальным значением коэффициента $\alpha = d\sigma/dT$ (α = 2,5 (для исходных) и 2,7 МПа/К (для состаренных)), который характеризует рост критических напряжений с температурой. Для исходных и состаренных [011]-монокристаллов теоретические значения $\Delta T_{ad}^{теор}$ = 11,6 и 10,6 К (α = 2,7 (для исходных) и 3 МПа/К (для состаренных)) на 41 и 25 % выше полученных экспериментальных значений. Разница экспериментальной величины от теоретической в [011]-кристаллах связана с высокими значениями $\Delta\sigma \geq$ 140 МПа и, соответственно, рассеянной энергии в рабочем цикле, что приводит к температурной необратимости $\Delta Tirr = \frac{1}{\rho C_p}\oint \sigma d\varepsilon$ в цикле нагрузка/разгрузка.

Исследования показали, что исходные и состаренные при 773 К, 1 ч [001]-кристаллы $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ проявляют высокую циклическую стабильность ЭКЭ до 100 000 циклов нагрузка/разгрузка, таким образом их можно рассматривать как эффективные функциональные материалы для устройств твердотельного охлаждения.

[1] H. Mevada [et al..] International Journal of Refrigeration. 162 (2024) 86-98.

Nanomaterials and Nanotechnologies

Наноматериалы и Нанотехнологии

Analysis of barrier inhomogeneities in SWCNT/Si heterojunctions

L.A. Dronina*, N.G. Kovalchuk, A.L. Danilyuk, and S.L. Prischepa[1]
*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6 P. Brovka St., 220013 Minsk, Belarus, *e-mail: lizadronina@yandex.by*

Carbon nanotubes (CNT)-based heterojunctions are the subject of intense research activity because of the wide range of phenomena that they allow for study. Despite the promising multifunctionality of CNT-based heterojunction device architectures, several fundamental issues of the interface between array of carbon nanotubes and metal or semiconductor are still not well understood.

In this work, forward biased *J–V–T* characteristics of a single-walled CNT/Si heterojunction over a wide temperature range (20 – 315 K) were analyzed using several approaches, such as thermionic emission theory modified by a simple correction to the ideality factor and the analytical model adapted to thermionic emission theory over a Gaussian barrier distribution. It has been established that spatial inhomogeneities of the barrier strongly influence the heterojunction parameters evaluated within the framework of the thermionic theory. This is indicated by the nonlinearity in the temperature dependencies of both the SBH and the ideality factor. Anomalously high values of η and anomalously low values of A^*_{eff} were explained both by the morphological features of the CNT films in contact with Si (see Figure 1) and the decrease in the contribution of the thermionic emission at low T. It was obtained that the decrease in the barrier area (S_{eff}), primarily due to the special loose structure of the single-walled CNT film, leads to an increase in the estimates of the value of A^*_{eff} at room temperature and decrease in η at low T.

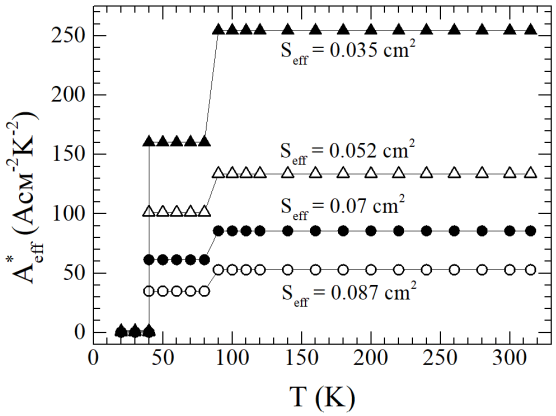


Figure 1. Variations of the effective Richardson constant A^*_{eff} with temperature and effective contact area

Considering the value of the Richardson constant for Si, it can be concluded that the effective contact area is about 70% of the total. At the same time, the contact area does not affect the values of A^*_{eff} at low T. Such behavior of parameters at low temperatures was explained by the decrease in the role of thermionic emission and the increase of contribution of other mechanism of current transport at low T region. The performed qualitative considerations allow us to explain the decrease in the effective Richardson constant of silicon with decreasing temperature by a decrease in the contribution of thermionic emission, an increase in the contribution of such mechanisms as scattering on optical phonons, quantum-mechanical reflection and tunneling.

The obtained results address possible important inaccuracies in the description of a SWCNT/Si heterojunctions in a wide temperature range and point out the importance of considering the actual physical structure of the system when analyzing its properties.

Low-Temperature Transport in Amorphous Re_xSi_{1-x} Thin Films at the Metal-Insulator Transition

A. El Oujdi,[1]* A. El Kaaouachi[2], and R. El Bouayadi[3]

*[1] Laboratory of Energetic Engineering and Materials, Faculty of Sciences Ibn Tofail, Kenitra, Morocco, *e-mail: abdellatif.eloujdi@gmail.com*
[2] MPAC Team, Faculty of Sciences of Agadir, BP 8106, 80000 Agadir, Morocco.
[3] Advanced Systems Engineering Laboratory (ASELab), National School of Applied Sciences, Ibn Tofail University, Kenitra, Morocco.

Abstract

This work analyzes the electrical conductivity of amorphous RexSi1–x thin films at very low temperatures, focusing on both the insulating and metallic sides of the metal-insulator transition (MIT). By re-evaluating experimental data from K.G. Lisunov et al., we find that variable range hopping explains conductivity in the insulating regime. Conversely, on the metallic side, electron-electron interactions and weak localization effects are the primary contributors to electrical conductivity.

Keywords: transport phenomena, electrical conductivity, low temperatures, variable range hopping, metalinsulator transition

References

[1] A. Kawabata. Solid State Commun. 34 (1980) 431.
[2] L. Kleiman. Phys. Rev. 160 (1967) 585.
[3] D. G. Langreth, Phys Rev. 181, (1967) 753.
[4] A. El Kaaouachi [et al.] Journal of American Institute of Physics USA, 1219 (1) (2010) 92-100.
[5] N. F. Mott. J. Non-Cryst. Solids 1 (1968) 1.
[6] B.I. Shklovskii [et al.] Electronic Properties of Doped Semiconductors. Springer (1984).
[7] L. R. Thoutam [et al.] Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 498 (2020) 166107.
[9] T. Mori. Journal of Solid State Chemistry 275 (2019) 70-82.
[10] P. R. Ghediya. Journal of Materals Science: Materials in Electronics 31 (2020) 658–666.
[11] B. L. Altshuler [et al.] JETP Lett. 37 (1983) 410.
[12] B.L. Al'tshuler [et al.]

Electrical conductivity in n-InP at low temperatures under strong magnetic fields

A. El Oujdi[1]*, A. El Kaaouachi [2], and R. El Bouayadi [3],

*[1] Laboratory of Energetic Engineering and Materials, Faculty of Sciences Ibn Tofail, Kenitra, Morocco, *e-mail: abdellatif.eloujdi@gmail.com*
[2] MPAC Team, Faculty of Sciences of Agadir, BP 8106, 80000 Agadir, Morocco.
[3] Advanced Systems Engineering Laboratory (ASELab), National School of Applied Sciences, Ibn Tofail University, Kenitra, Morocco.

Abstract

This study examines the transport properties of metallic n-type InP, revealing a temperature dependence of the electrical conductivity following a law. A key finding is the sign reversal of the thermal variation coefficient *m* as the magnetic field is increased. We discuss several intricate theoretical frameworks – the Zeeman effect, weak localization, and electron-electron interactions – as potential explanations for this observed sign change.

Keywords: Metal-Insulator Transition, low temperatures, strong magnetic fields, low localization effect, electron-electron interaction effects, metallic electrical conductivity, coefficient of thermal variation.

References

[1] I. M. Percher [et al.] Phys. Rev. B 96 (2017) 224511
[2] H. K.Kyung. Scientific Reports 8 (2018).
[3] S. Chaudhuri [et al.] Journal of Physics: Condensed Matter 30 (1) (2018).
[4] M. Pollak [et al.] Journal of Physics C: Solid State Physics 9 (2018) 12.
[5] O. Entin-Wohlman [et al.] Journal of Physics C: Solid State Physics 16 (2017) 7.
[6] J. Wu. Nano Lett. 14 (5) (2014) 2730-2734.
[7] M. Cabán-Acevedo [et al.] ACS Nano 7 (2) (2013)1731–1739.

A nucleation mechanism of IRMOF-10 structure

A. A. Ergasheva[1]*, E. Y. Umarbekov[2], and U. B. Khalilov[1,3]
[1]*Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, 33 Durmon yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan, *e-mail:* azizaabdujabborqizi@gmail.com*
[2]*Namangan State University, 316 Uichi St., 716019 Namangan, Uzbekistan*
[3]*University of Antwerp, 13 Prinsstraat, 2000 Antwerp, Belgium*

Isoreticular Metal-Organic Frameworks (IROFs) are crystalline materials with high porosity and selective adsorption properties for specific chemical substances. They are widely used in gas storage, separation, catalysis, and sensor technologies [1–4]. Despite extensive experimental research on IRMOF synthesis, the fundamental nucleation mechanism remains poorly understood. In this study, we employ reactive molecular dynamics simulations to elucidate the nucleation process of IRMOF-10, providing atomic-scale insights into its formation dynamics and precursor interactions. Preliminary results reveal that the selected ligand, 4,4'-biphenyldicarboxylate, exhibits a strong affinity for the Zn_4O metal node, facilitating the preferential formation of the IRMOF-10 unit cell (Fig. 1).

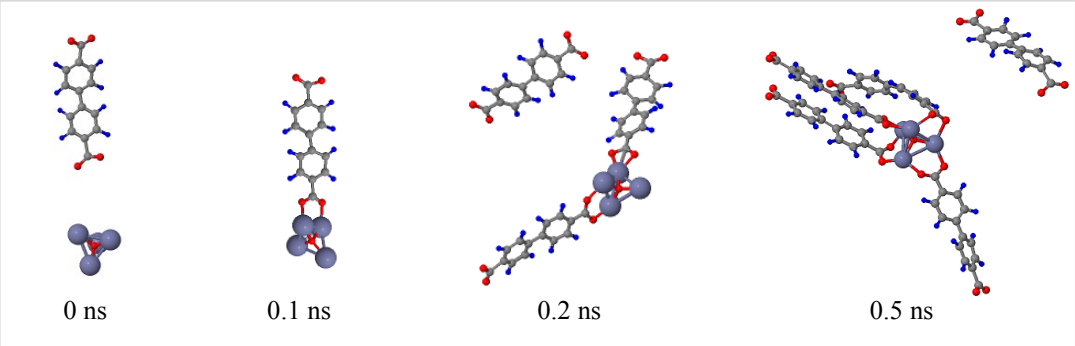


Figure 1. Nucleation of mono IRMOF-10 based on Zn_4O and 4,4'-biphenyldicarboxylate

This study offers novel insights into the initial stages of zinc-based IRMOF formation, enhancing the understanding of its nucleation and subsequent growth picture.

References

[1] S. Yu [et al.] International Journal of Hydrogen Energy 47 (2022) 39586.
[2] X. Zhang [et al.] Separation and Purification Technology 318 (2023) 123908.
[3] A. Nuri [et al.] Catal. Lett. 149 (2019) 1941.
[4] N. La Ngoc Tran [et al.] Sensors and Actuators A: Physical 347 (2022) 113932.

Multiphysics Simulation of Dendrite Growth in Sodium-Metal Batteries Using COMSOL

A. Bakouei [1], S. A.Habibi[2]
[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Iran*
[2] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Iran,*
* e-mail: *arsalan.habibi1368@gmail.com*

Abstract

The uncontrolled growth of dendrites in sodium-metal batteries poses a significant challenge to their commercialization by causing short circuits and capacity fading. This study employs a computational approach using COMSOL Multiphysics to simulate dendritic growth and evaluate various mitigation strategies. The model incorporates electrochemical and mechanical interactions, exploring the effects of electrolyte composition, current density, and temperature. Simulation results indicate that optimized electrolyte additives and controlled current densities can effectively suppress dendrite formation. The findings contribute to the fundamental understanding of dendritic growth mechanisms and offer practical guidelines for enhancing the safety and performance of sodium-metal batteries.

Keywords: sodium-metal batteries, dendrite suppression, COMSOL simulation, electrolyte additives, battery safety.

Evaluation of the thermal stability of ZrC nanoparticles

G. I. Muradova*
Institute of Radiation Problems of Ministry of Science and Education, 9 B.Vahabzade St., AZ 1143 Baku, Azerbaijan,
**e-mail: gulnarmuradova60@gmail.com*

Nanotechnology is an innovative approach to controlling the properties of materials at the nanoscale, enabling the development of unique characteristics in matter composed of molecules of various sizes. Given that ZrC is extensively used as a reactor material, understanding the impact of ionizing radiation on its properties is of considerable importance [1-3].

The sample before irradiation (Fig. 1, green curve) shows stronger endothermic signals at lower temperatures (approximately between 100–300 °C). This can be explained by the release of OH groups chemisorbed on the surface of the nanoparticles and adsorbed water. Such behavior occurs due to the high specific surface area of the nanomaterials and their intense interaction with the atmosphere.

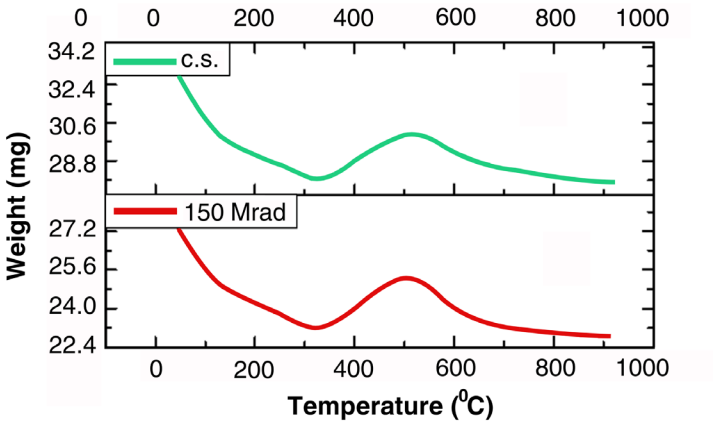


Figure 1. TG curves of Nano ZrC particles before (c.s.) and after (150 Mrad) gamma irradiation

In the thermally irradiated sample (Fig.1, red curve), different dynamics are observed: the intensity of the endothermic signal in the low-temperature region decreases and shifts to a more spread-out form. This indicates that the gamma radiation affects the functional groups and structure on the material's surface, reducing their quantity and altering the separation kinetics. The results derived from the graph show that irradiation has a significant impact on both the surface chemistry and the heat-related physical transformation mechanisms of the nanoparticles. This is important for evaluating the stable or unstable behavior of ZrC nanoparticles for use in high-radiation environments.

[1] H.-Y. Chen [et al.] J. Nucl. Mater. 499 (2018) 248.
[2] R. Wang [et al.] J. Nucl. Mater. 557 (2021) 153243.
[3] E. Huseynov [et al.] Nano Converg. 1 (2014) 21.

High temperature X-ray diffraction study of neutron irradiated nanocrystalline AlN particles

T. G. Naghiyev[1,2]* and A. S. Abiyev[2,3]
[1]*Composite Materials Scientific Research Center of Azerbaijan State University of Economics (UNEC), 194 M.Mukhtarov St., AZ 1143 Baku, Azerbaijan, *e-mail: tural@nagiyev.pro*
[2]*Institute of Radiation Problems of Ministry of Science and Education of Azerbaijan, 9 B.Vahabzade St., AZ 1143 Baku, Azerbaijan*
[3]*Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie St., 141980 Dubna, Russia.*

Structural analyses of 65-75 nm nanocrystalline AlN particles irradiated with a neutron flux were carried out in a wide temperature range (25-1000 ^{o}C) by X-ray diffraction method using Bruker D8 Advance X-ray diffractometer. Experiments were carried out with a comparative analysis of the structural characteristics of AlN nanoparticles before and after irradiation with neutron flux. FullProf suite was used for X-ray spectrum analysis. The "Rietveld refinement" method was used to determine lattice parameters of the crystals [1]. The amount of amorphization was calculated and compared after irradiation. The size distribution statistics of crystallites were revealed by SEM analysis. SEM results were compared by Scherrer equation. The results of the self-treatment properties studied by in-situ and ex-situ analysis were compared with the samples before and after neutron irradiation.

It was determined that the nanocrystals have a hexagonal (P 63/mc) structure [2] and the lattice constants corresponding to the initial state are *V= 41.740 (1) Å^3, a= 3.11133 (3), c= 4.9789* (1).

In-situ experimental analysis, the particles were heated for 100 minutes and intensive diffraction analysis was collected. After the ex-situ study, it was found that the amount of regularity in the crystal arrangement developed as a result of temperature. This is a clear example of the self-treatment property of crystallites.

It was determined from the analyses that, in any case, the crystal lattice expanded when heated, but this expansion disappeared after cooling. When the changes in the lattice parameters after heating and cooling were examined, some of the deviations that occurred after the effect of gamma rays were eliminated by the effect of temperature, and the volume of the lattice took a numerical value close to the lattice values of the initial state after heating. Although reassembly was observed after the temperature treatment performed after neutron irradiation, the dimensions could not completely return to the initial state. A possible reason could be the types of deviations such as defects formed after irradiation, etc.

The reduction in the lattice after irradiation indicates that radiation damage has completely disappeared in the crystal lattice. The sharp increase in the intensity of the peaks is the result of the increase in the order in the crystallites. The resulting more ordered structure shows a reduction in the initial and neutron irradiation volumes of the lattices of ~0.46% and ~0.41%, respectively.

References

[1] H.M. Rietveld. J. Appl. Cryst. 2 (1969) 65.
[2] K. Miwa [et al.] Physical Review B 48(11) (1993) 7897–7902.

Transition metals nanostructures prepared by solid-phase pyrolysis: effect of synthesis conditions and annealing

S. Pashayan[1]*, A. Manukyan[1], H. Gyulasaryan[1], S. Zlotski [2], O. Korolik[2], and V. Anishchik[2]
[1]*Institute for Physical Research of NAS of Armenia, 0204 Ashtarak-2, Armenia,*
**e-mail: stpashayan@gmail.com*
[2]*Belarusian State University, 4 Nezalezhnasti Ave., 220030 Minsk, Belarus*

Nowadays, transition metal nanoparticles have attracted the interest of scientists due of their application in catalysis, spintronics, biomedicine, sensors, supercapacitors, solar cells and other fields. The structure and properties of metal NPs and nanostructures are largely determined by the method of their preparation [1-2]. The single-stage nature and high yield of the final product, together with the possibility of creating a wide range of nanostructures based on NPs of transition metals Co, Ni, Cu, Mg and their alloys, allows pyrolysis to stand out from other methods. The most suitable material for pyrolysis are metal phthalocyanines ($MC_{32}N_8H_{16}$), which during pyrolysis can form various metal-carbon nanocomposite systems with controlled properties [1-3].

In this study transition metals NPs-based Cu/C and Ni/C composite nanostructures were prepared by solid-phase pyrolysis at the temperatures in the range of 600-900°C and time from 30 min up to 100 min . As a precursors for the synthesis of copper and nickel NPs, we used polycrystalline powders of metal phthalocyanines [4-5]. NPs of various sizes dispersed in a carbon matrix and encapsulated in a graphite-like shell were obtained. The NPs on the images look like light spots, and the presence of a graphite shell is observed around them

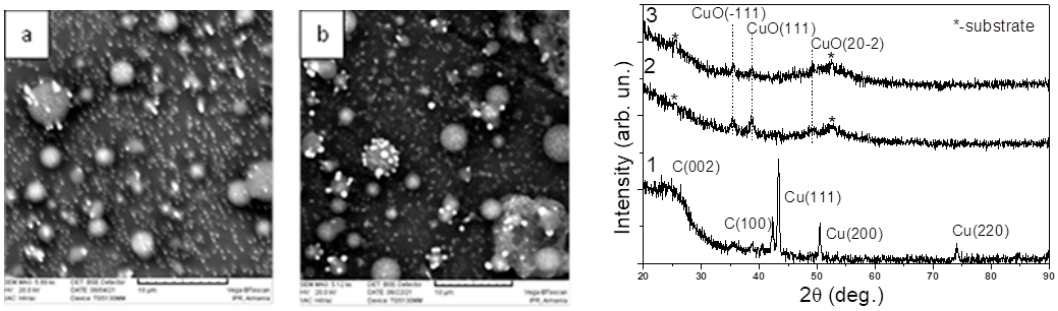


Figure 1. SEM images of obtained on sapphire substrate: a- as-deposited , T_{pyr} = 900°C, t_{pyr} =30 min, b-after annealing (T = 300°C, t = 30 мин); XRD spectra of samples obtained before (1) and after annealing (2,3).

Nanostructured thin-film island-type coatings were prepared by deposition of obtained NPs on sapphire and silicon substrates wich were arranged in a horizontal quartz ampule.After pyrolysis, some of the samples were annealed in a muffle furnace at a temperature of T = 300 °C. An analysis of the dependence of the type, shape and size of obtained nanostructures on the synthesis conditions and the effect of annealing was carried out. To determine the characteristics of the films obtained SEM, EDX, AFM, XRD and Raman spectroscopy used.

The study showed that the metod we used allows to obtain different types of nanostructures and nanocomposites, with different sizes, specified and controlled properties.

Acknowledgement. The authors express a gratitude to Georgi Badalyan for contribution in SEM measurements.

References:
[1] Gubin, S.P. Magnetic nanoparticles. Wiley-VCH (2009) 215.
[2] G.G. Glaessens [et al.] The Chemical Record, 8(2) (2008) 75–97.
[3] A.S. Manukyan [et al.] J. of Nanopart. Res. 14 (2012) 982
[4] E. K. Athanassiou [et al.] Nanotechnology, 17 (2006) 1668.
[5] Proceedings of the “PDP-XV” Sympozium. “Kovcheg” (2024) 63-67.

Study of a bi-layer MoS_2 phototransistor deposited on a flexible substrate

Stepan Petrosyan[1*], Ashot Khachatryan[1], and Petik Petrosyan[2]
[1]*Institute of Radiophysics and Electronics, NAS of Armenia, 0204 Ashtarak, Armenia,*
**e-mail: stepan.petrosyan@rau.am*
[2]*Yerevan State University, 0025 Yerevan, Armenia*

A new photo field-effect transistor (FET), utilizing a bi-layer of MoS_2 deposited on a polyimide (PI) substrate, was successfully fabricated using the pulsed-laser deposition technique. The photocurrent generated by the laser light in the top gate flexible FET was determined for given drain and gate voltages. It has been shown that the photo-responsivity of the device can be adjusted over a wide range by controlling the gate and drain voltages. Under fixed drain and gate voltages, the photocurrent is depended solely on the illumination intensity. The MoS_2 FET electrical transport properties were measured in the dark and under illumination (with a green laser, λ= 532 nm) powers of up to 70 μW at room temperature. In response to pulsed illumination, the structure shows a switching behavior with a characteristic time of approximately tens of *ms*. (Fig.1).

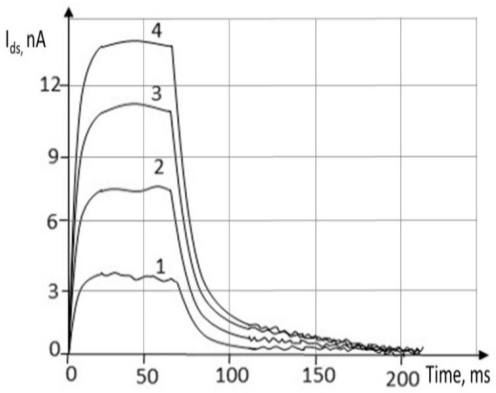


Figure 1. Photo-switching behavior of the photo-transistor at (I_{ds}) V_g = 0 V and V_{ds} = 4V for different illumination power P_{light} (μW): 1-10; 2-20; 3- 30; 4 – 40.

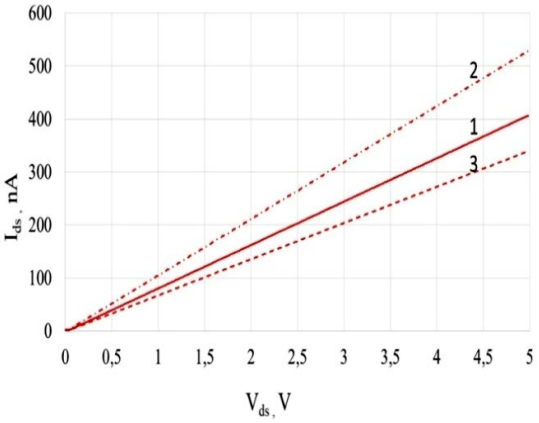


Figure 2. Photocurrent (I_{ds}) as a function of V_{ds} before the substrate bending (1) and after its convexly (2) or concavely (3) curving (ε= ± 0.5%). The gate voltage V_g = 0V and the illumination power is 1μW.

We also observed a pronounced change in the photocurrent owing to the bending-induced strain variation in the band gap (Fig.2). In general, the total stress existing in a MoS_2 thin layer deposited on flexible substrate is composed of the stress induced by bending and thermal stress, originating from a mismatch in the coefficients of thermal expansion between the PI substrate and the thin film of MoS_2. But the estimates show that the value of thermal stress is a negligible comparing to the bending induced stress. This observation confirms the viability of strain engineering as a powerful tool for creating new flexible and tunable photo-detectors based on few-layer MoS_2 deposited on PI substrate. Among the potential applications of such few-layer MoS_2 structure can be also nanoscale flexible photodetectors, stress sensors and displays.

Structural studies of magnetite nanoparticles doped with rare earth ions

A.V. Rutkauskas[1]*, O.N. Lis[1], S.E. Kichanov[1], E.V. Lukin[1], B.A. Abdurakhimov[1], G.S. Rymski[2], and A.L. Zhaludkevich[2]
[1]*Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie St., 141980 Dubna, Russia, *e-mail: ranton@nf.jinr.ru*
[2] *Scientific-Practical Materials Research Centre NAS of Belarus, 19 P.Brovka St., 220072 Minsk, Belarus*

Bulk and nanostructured ferrites with a spinel-type crystal structure (AFe_2O_4) have been actively studied for many decades due to their attractiveness from both fundamental and practical points of view. Such compounds exhibit a wide range of physical phenomena: high electrical resistivity, low electrical losses, high chemical stability, magnetic phase transitions of various types, geometric frustration effects, and much more. This makes possible the wide technological application of ferrites as materials for transformers, solar cells, biomedicine, magnetic sensors, catalysts, drug delivery systems, electronic and magnetic components.

Depending on the chemical composition and size of nanoparticles, ferrites with a spinel structure have different distributions of cations in tetrahedral (A) and octahedral (B) oxygen coordination. In particular, the case can be realized when Fe^{3+} ions are in positions A, and there is also a mixture of Fe^{3+} and Fe^{2+} ions located in positions B. When doping with transition metals or alkali elements in positions A or B or creating vacancies in the cubic spinel structure, magnetic interactions between iron ions change. This leads to significant changes in the physical properties of these ferrites.

Taking into account the practical significance of magnetite nanoparticles, in our work we have studed nanostructured magnetite samples with doping of 2.5% Sm, Dy, La and Lu rare earth ions by means of using transmission electron microscopy, X-ray and neutron diffraction methods, small-angle X-ray scattering, and magnetic measurements. All the doped nanostructured magnetite samples have a cubic phase with spinel crystal structure $Fd\bar{3}m$, a nanoparticle size is ranging from 20 to 32 nm. It is assumed that changes in the structural and magnetic properties of magnetite nanoparticles compared to bulk matter are primarily associated with a defect-rich structure on the surface of the nanoparticles. Doping with rare earth ions improves the disordering of surface defects, leading to an enhancement in the magnetic properties of doped magnetite nanoparticles.

Acknowledgement
This work has been supported by the joint grants of the Russian Science Foundation (RSF) No. 24-42-10003, https://rscf.ru/project/24-42-10003/ and the Belarusian Foundation for Basic Research, BFBR No. T23RNFM-023.

ONSET OF ROUGHNESS FORMATION AT THE c-Ni/*a*-NiO INTERFACE

U. Turaeva[1]*, M.-S. Paizullakhanov[2], and U. Khalilov[1,3]
[1]*Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov, Academy of Sciences of Uzbekistan, 33 Durmon Yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan,*
**e-mail: turaevaulmasoy@gmail.com*
[2]*Institute of Materials Science of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Cangikhisarak, Uzbekistan*
[3] *University of Antwerp, 13 Prinsstraat, 2000 Antwerpen, Belgium*

The efficiency of solar devices is directly related to the "selectivity parameter" of their light-absorbing surfaces [1]. NiO/Ni is recognized as a "high selectivity" material, where the degree of "selectivity" is influenced by the roughness present between these layers [2-4]. However, the specific dependence of the onset of roughness formation on the type of precursor has not yet been thoroughly investigated.

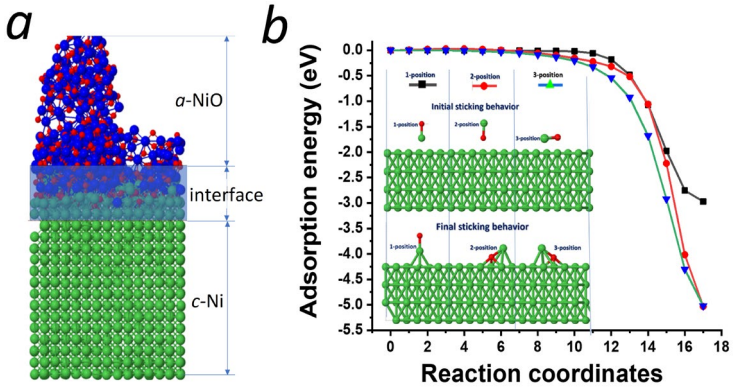


Figure 1. (*a*) A highlighted representation of the interface within the Ni/NiO structure. (*b*) Illustration of the adsorption positions and corresponding energies of NiO precursors on the Ni(111) substrate.

In this study, we employed computer simulations using the LAMMPS simulation package, based on the reactive molecular dynamics (MD) method [4], to investigate the deposition of the NiO precursor onto the Ni(111) substrate at a temperature of 300 K. Our results demonstrate that the deposition of the NiO precursor on the Ni(111) surface leads to the formation of a distinct "boundary" layer, indicative of roughness (Figure 1*a*). This roughness formation is governed by various chemical reactions, including adsorption, desorption, surface and bulk diffusions, occurring between the precursors and the Ni surface. Notably, the initial adsorption phenomena play a significant role in the development of surface roughness. The calculated adsorption energies for positions 1, 2, and 3 are -3.4 eV, -5.51 eV, and -5.53 eV, respectively (Figure 1*b*). Furthermore, our simulations revealed that the adsorption barrier for NiO precursors onto the Ni(111) surface is effectively zero. After adsorption, the formation of Ni-O bonds requires an additional 2.17 eV of energy compared to the formation of Ni-Ni bonds. In summary, these findings provide crucial insights into the chemical nature of precursors that govern the early stages of roughness formation at the *c*-Ni/*a*-NiO interface, potentially informing the design and optimization of high-selectivity solar absorber materials.

1. J. Duffie [et al.] Solar Engineering of Thermal Processes. Wiley (1991).
2. C.E. Kennedy, Review of Mid to High-Temperature Solar Selective Absorber Materials, July 2002 NREL/TP-520-31267
3. U. Khalilov [et al.] J. Phys. Chem. C 115 (2011) 24839−24848.
4. U. Khalilov [et al.] J. Phys. Chem. C 116 (2012) 21856−21863.

Methods of color center formation in hexagonal boron nitride

P.G. Vilyuzhanina[1,2,3]*, E.A.Primak [2,3], V.V. Soshenko[3], S.V. Bolshedvorskii[3], I.S. Cojocaru[2,3], A. M. Kozodaev[1,2,3], S.M. Drofa[3], A.Chernyavskiy[2,3], A.N. Smolyaninov[4], A.V.Akimov[2,3]
[1]*National Research Nuclear University 'MEPhI', 31 Kashirskoe Highway, 115409 Moscow, Russia, *e-mail: vpg583@gmail.com**
[2]*Russian Quantum Center, 30 Bolshoy Blvd., 121125 Skolkovo, Moscow, Russia*
[3]*Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, 53 Leninsky Ave., 119991 Moscow, Russia*
[4]*LLC Sensor Spin Technologies, 7 Nobelya St., 121205 Skolkovo, Moscow, Russia*

Hexagonal boron nitride (h-BN) is a two-dimensional van der Waals material with a wide bandgap (~6 eV) that hosts a variety of optically active defects (color centers). These defects have attracted significant attention due to their remarkable properties, including room-temperature optically detected magnetic resonance (ODMR) and single-photon emission (SPE), making them promising candidates for quantum technologies. Potential applications include random number generation [1], quantum cryptography [2] , and magnetic field sensing [3].

A key challenge is the development of reliable and repeatable methods for controlled creation of color centers with desired properties, such as specific photoluminescence (PL) spectra, SPE efficiency, excited-state lifetime, and ODMR. Various techniques have been explored to create defects in h-BN, including irradiation with ions [4], electrons [5], neutrons [6], femtosecond laser pulses [7], and plasma treatment [8]. Each method has distinct advantages and limitations, leading to the formation of different types of color centers.

In this work, we present the results of our ongoing investigation of h-BN defects generated by different irradiation techniques. Using confocal microscopy, we analyzed the photoluminescence spectra and photoluminescence maps of the irradiated samples. Our ongoing research aims to pave the way for optimized defect engineering in h-BN for quantum applications.

Acknowledgement.
The work of P.G.Vilyuzhanina, E.A.Primak, I.S. Cojocaru, A. M. Kozodaev, A.Chernyavskiy, A.V.Akimov was supported by Rosatom in the framework of the Roadmap for Quantum computing (Contract No. 868-1.3-15/15-2021 dated October 5).

References

[1] S. J. U. White [et al.] Journal of Optics 23 (2020) 01LT01.
[2] A. Al-Juboori [et al.] Adv Quantum Technol 6 (2023) 2300038.
[3] W. Liu [et al.] Nat Commun 13 (2022) 5713.
[4] G. Venturi [et al.] Laser Photon Rev 18 (2024) 2300973.
[5] F. F. Murzakhanov [et al.] Nanomaterials 11 (2021) 1373.
[6] J. Li [et al.] Chemistry of Materials 33 (2021) 9231–9239.
[7] X. Gao [et al.] ACS Photonics 8 (2021) 994-1000.
[8] Z.-Q. Xu [et al.] Nanoscale 10 (2018) 7957-7965.

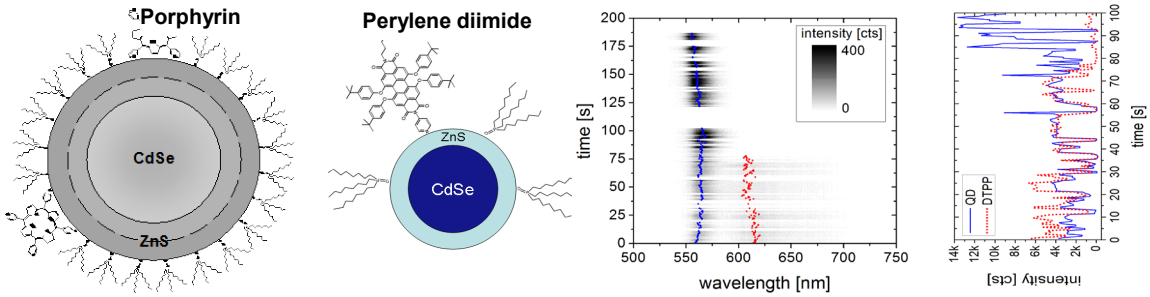
Interface effects and excitation energy relaxation in hybrid nanoassemblies based on semiconductor quantum dots and porphyrin molecules (single objects detection and bulk spectroscopy)

E. Zenkevich[1,2]*, C. von Borczyskowski[2]
[1,2]*Belarusian National Technical University, 65 Nezavisimosti Ave., 220013 Minsk, Belarus, *e-mail: zenkev@tut.by*
[2]*Institute of Physics, Chemnitz University of Technology, 70 Reichenhainer Str., 09107 Chemnitz, Germany*

This talk covers the basics of nanotechnology, focusing on organic and hybrid organic-inorganic nanocomposites based on self-assembly principles. Since the last decade much research has been conducted towards multilevel and multidisciplinary nanotechnologies for providing materials with extraordinary properties for various engineering and science applications. However, many fundamental issues still need to be in-depth investigated in order to have full understanding of mechanisms that drive the properties of nanocomposites.

Here, we discuss the formation principles, interface events as well as mechanisms of excitation energy relaxation obtained for organic/inorganic nanoassemblies based on TOPO capped core/shell CdSe(ZnS) colloidal semiconductor quantum dots (QD) exhibiting size-dependent photophysical properties and pyridyl-substituted porphyrins, H_2P (bulk solutions) or perilene bisimide dyes, PBI (single objects experiments) in various solvents at 295 K (steady-state, picosecond time-resolved luminescence spectroscopy and single molecule spectroscopy).

Upon formation of "QD-Dye" nanoassembies the QD photoluminescence (PL) is quenched as was detected both via single particle detection (on quartz plate) and ensemble experiments (in toluene solutions at 293 K). Quenching has been assigned to Foerster resonance energy transfer QD→Dye (FRET) and NON-FRET processes. Analysis of FRET allows for identification of different geometries of the dye molecules on the QD surface (in the case of PBI dyes). It has been demonstrated that the use of PBI as "ligand-type" molecules allows the studying of ligand dynamics on the basis of the direct detection of a single "ligand", which is not possible for typical ligand molecules.



With respect to NON-FRET process, it was quantitatively shown for the first time that the related PL quenching rate k_q scales inversely with the QD diameter and can be understood in terms of a tunnelling of the electron (of the excited electron-hole pair) followed by a (self-) localization of the electron or formation of trap states. Our findings highlight that single functionalized molecules can be considered as one of the probes for the complex interface physics and dynamics of colloidal semiconductor QD. These observations are in line also with the microscopic understanding of blinking phenomena of single QD.

Acknowledgement. This work was supported by BSPSR program "Photonics and Electronics for Innovations (Belarus, 2021-2025)" (Projects 1.8 and 2.1) and Visiting Scholar Program of TU Chemnitz, Germany (E.Z., 2020-2021).

Changing the magnetic characteristics of spin LEDs with a closely spaced delta-layer of Mn due to delta-doping with an acceptor impurity

M.V. Ved*, M.V. Dorokhin, I.L. Kalentyeva, P.B. Demina, A.V. Zdoroveishchev, E.I. Malysheva
*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, 23 Gagarin Ave., Building 3, 603022 Nizhny Novgorod, Russia, *e-mail: ved@nifti.unn.ru**

Diluted magnetic semiconductors (DMS) A^3B^5, heavily doped with transition element atoms, have long been considered as a promising basis for constructing devices based on spin-dependent effects [1]. Considerable attention has been paid to (Ga,Mn)As, for which the presence of spin-polarized holes has been experimentally demonstrated upon magnetization of the structure. A more complex type of DMS is a hybrid system containing an ultra-thin (Ga,Mn)As layer (Mn delta-layer) and an InGaAs/GaAs quantum well (QW) separated by a thin spacer layer. The potential of such systems, providing spin polarization of charge carriers in a QW, was demonstrated in early studies.

In this paper, an experimental study of the interrelations between the magnetic properties of the Mn delta-layer and the concentration of free carriers localized near it is carried out. The carrier type was set by introducing a carbon delta-layer, which is an acceptor impurity for GaAs. Thus, a layer of free holes was formed, localized in the potential barrier of the carbon delta-layer. All the studied samples were spin light-emitting diodes based on heterostructures with an InGaAs/GaAs QW, a carbon delta-layer and a Mn delta-layer. To assess the influence of carbon delta-layer, its position in the system was varied: three structures were formed in which carbon was introduced before the growth of the QW, directly into the QW, and between the QW and the Mn delta-layer. The dependence of the magnetic properties on the location of the holes was studied. The magnetic properties were estimated by measurements of circularly polarized luminescence. It was previously shown that the magnetic field and temperature dependence of the circular polarization degree of the InGaAs QW radiation allows one to unambiguously judge the magnetization of the Mn delta layer and estimate the Curie temperature [2].

The obtained results indicate that additionally introduced holes affect the properties of Mn, which is quite consistent with earlier works. Therefore, the carbon delta-layer is a tool that allows controlling the magnetic properties of the system and the spin polarization of carriers in the active region of the structure (QW). The mechanism of magnetic interaction is quite complex to describe, and presumably refers to a type of exchange interaction between states associated with the Mn impurity and the states of holes in GaAs or the size quantization region. It is shown that the magnetic characteristics of the system (the shape of the hysteresis loop, the Curie temperature) and the circular polarization degree of electroluminescence depend on the specific location of carbon relative to delta-Mn and the QW, which is due to the formation of a hybrid magnetic system of delta-Mn + holes, the efficiency of the exchange interaction in which depends on its specific configuration. From the point of view of practical applications, localization of the carbon delta-layer in the region of the QW is of interest, since this ensures an increase in the degree of polarization and registration of a closed hysteresis loop on the magnetic characteristics.

Acknowledgement. This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-72-00047).

References:
[1] J.K. Furdyna. J. Appl. Phys. 64 (1988) R29.
[2] M.V. Dorokhin [et al.] Appl. Phys. Lett. 107 (2015) 028531.

Formation of impurity accumulations of Ni and Cu in Si

N.A. Turgunov*, N.B. Khaytimmetov, Sh.A. Sobirova
Research Institute of Physics of Semiconductors and Microelectronics at the National University of Uzbekistan, 20 Yangi Almazar St., 100057 Tashkent, Republic of Uzbekistan,
**e-mail: tna_1975@mail.ru*

This paper presents the results of studies of the structural properties of Si, doped Ni, and Cu obtained using a Malvern Panalytical Empyrean X-ray diffractometer. Initial n–Si samples and n-Si<Ni,Cu> samples were produced for the research. Monocrystalline silicon of the KEF brand, grown using the Chokhralsky method, was used as the initial sample. Simultaneous diffusion of Ni and Cu atoms into Si was carried out in a SUOL-4 furnace at a temperature of T = 1473 K for 5 hours.

Figure 1 shows a snapshot of a separate section of the n-Si<Ni,Cu> sample, which shows that after diffusion, various impurity accumulations are observed in this sample. The sizes of these accumulations reach up to 300 nm and they have different geometric shapes.

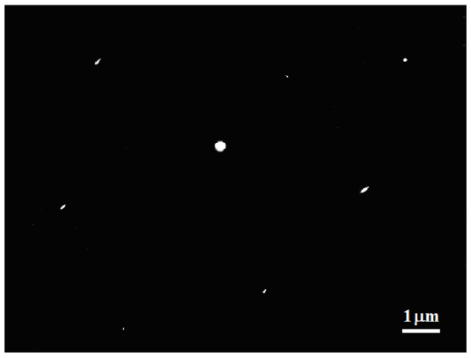


Figure 1. Snapshot of the n-Si<Ni,Cu> sample

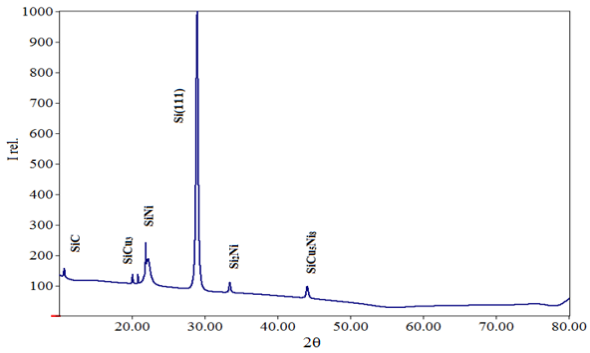


Figure 2. X-ray image of the n-Si<Ni,Cu> sample

Figure 2 shows the result of an X-ray diffraction analysis of an n-Si<Ni,Cu> sample, in which several structural reflexes (peaks) with different intensities are observed. The peak with the highest intensity belongs to monocrystalline silicon with a crystallographic plane (111). It is observed at an angle of 2θ=28.99°, and this reflex has shifted slightly towards higher angle values after diffusion. At the same time, the angle difference was Δθ=0.6°.In this reflex, the d value is 1.84 nm, and the L value is 0.474 nm. The data obtained showed that in this region there is a decrease in the average size of crystallites L by almost 6 times and an increase in the interplane distance d by almost 3 times compared with the original sample. This shows that the silicon crystal lattice is deformed during doping.

The observed reflex at an angle of 10.77° in Fig. 2 corresponds to the SiC compound, while the other peak at an angle of 20.88° corresponds to the CuO copper oxide compound. At an angle of 2θ=22.24°, a peak corresponding to the SiNi junction is observed.At higher values of the angle of 2θ, two more reflexes with low intensity are observed (Figure 2). These reflexes are observed in the range of angles 33-45 degrees and represent compounds of atoms of impurity elements of nickel and copper with silicon.The peak at an angle of 2θ=33.48° in the radiograph corresponds to the Si_2Ni compound.The next peak, observed at an angle of 2θ=44.12°, corresponds to the $SiCu_5Ni_8$ junction.Consequently, it turns out that during high-temperature alloying of Si with Ni and Cu impurities, various two-component or three-component compounds of Si atoms with atoms of basic and technological impurities are formed, in which the parameters of the crystal structure differ significantly from the matrix structure.

Rheological properties of NiO nanoparticles' based aqueous nanofluids

K.B. Egamberdiyev[1,2,3]*, S.Q. Telyaev[1], B.E. Umirzakov[1,2], and S.Z. Mirzaev[1]
[1]*Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov Academy of Sciences of Uzbekistan, 33 Durmon Yuli St. 100125 Tashkent, Uzbekistan, *kegamberdiev@yandex.ru*
[2]*Tashkent State Technical University named after Islam Karimov, 2 University str, 100095 Tashkent, Uzbekistan*
[3]*University of Geological Sciences, 64 Olimlar St., 100064 Tashkent, Uzbekistan*

The process of heat transfer could be found in several areas, including heat exchangers, cooling processes, heating and chemical processes [1]. One of device that often found in various industrial setting is heat exchanger, which is an integral component in cooling systems, refineries, and power plant. One of efforts that could be conducted to enhance it is by improving the thermal properties of energy transmission fluid, it could be carried out by suspending solid materials in nano size to improve the thermal conductivities of fluid. There are many kind of solid material such as metallic, non metallic and polymeric powders that could be added into fluid. The potential of nanofluid could be implemented in all of heat transfer aspects. There are several metal oxides nanofluids that have been utilized in the previous study such as Al_2O_3, TiO_2, and SiO [2], but there have not been many studies that investigating NiO as nanofluid mixture. NiO nanofluid has a good stability as heat transfer fluid.

The preparation of nanofluids involves dispersing nanoparticles into a base fluid to enhance its thermal, electrical, or rheological properties. Ultrasonication is a crucial process in the preparation of nanofluids because it helps achieve a uniform dispersion of nanoparticles in the base fluid and breaks up agglomerates caused by Van der Waals forces. Proper ultrasonication enhances the stability, thermal conductivity, and homogeneity of nanofluids.The heat transfer behavior of nanofluids is highly dependent on viscosity. This study aimed to determine the rheological characteristic of NiO nanofluid as a function of sonication time. Rheostress RS600 technique is used to determine the dynamic viscosity of NiO nanofluids.

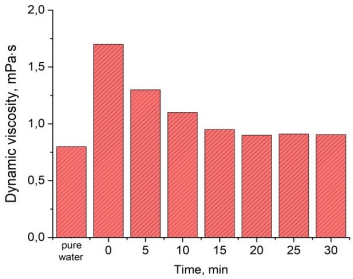


Figure 1. The dynamic viscosity of nanofluids as a function soication time

The results show that the dynamic viscosity decreases with increasing ultrasonication time (Figure 1) and sonication breaks up the clusters, disperses the nanoparticles better, and reduces the fluid's resistance. Further sonication beyond 15 minutes doesn't significantly affect the viscosity anymore, suggesting the system has reached good dispersion and steady state. Viscosity stays higher than pure water but much lower than at the start. A well-dispersed nanofluid naturally has a slightly higher viscosity than the base fluid. Sonication dramatically improves the quality of the nanofluid by breaking agglomerates. Monitoring viscosity during sonication is a smart method to find the best processing time.

References

[1] M.K. Nayak [et al.] Results in Engineering (2025) 104284.
[2] J. Patel [et al.] Applied Thermal Engineering 219 (2023) 119428.

Modern applications of graphene-based nanomaterials

R. G. Abaszade[1,2]* and E.A. Khanmamedova[1]
[1]*Azerbaijan State Oil and Industry University, 16/21 Azadliq Ave., 370010 Baku, Azerbaijan, *e-mail: abaszada@gmail.com*
[2]*Azerbaijan University of Architecture and Construction, 5 Ayna Sultanova St., AZ1073 Baku, Azerbaijan*

The rapid development of modern science is reaching its modern development by synthesizing new materials and analyzing them. Due to the limited size of these materials, their properties have seriously changed. Economic profitability can also increase due to biomass-derived nanomaterials. Thus, 2D systems, which are considered limited size systems, are significantly different from others due to their uniqueness and wide range of application possibilities. Graphene-based materials have serious implications in research conducted in this direction. Thus, they have a wide range of applications in modern electric and hybrid cars, drones, space stations, food industry, drug transportation, as well as other fields. In addition, graphene-based materials doped with various metals have wider application possibilities. The application of graphene-based materials to the transport system can be considered as the beginning of a new era. The transport system is an important part of the society's development dynamics. Due to the enrichment of the mechanical and electrical system of vehicles with graphene-based materials, the foundations for the formation of new opportunities have arisen [1-8].

The main challenges for electric cars are efficiency, limited range, long charging times and high battery costs. Improving energy density, charging infrastructure and mitigation material costs are critical for EV widespread adoption. Recent advances in wireless communication and wireless charging, graphene-based batteries and supercapacitors are expected to increase efficiency and reduce charging time. Plug-in hybrid electric cars (PHEVs) and hybrid electric vehicles offer a practical intermediate solution. Global imperatives on greenhouse gas reduction and climate resilience are required full EV transitions.

References:

[1] R.G.Abaszade [et al.] Journal of Optoelectronic and Biomedical Materials 12(3) (2020) 61–65.
[2] R.G.Abaszade [et al.] Physics and Chemistry of Solid State, 21(3) (2020) 404-408.
[3] S.R.Figarova [et al.] Journal of Nano Research 67 (2021) 25-31.
[4] A.G.Mammadov [et al.] Technical and Physical Problems of Engineering 14(3) (2022) 155-160.
[5] R.G.Abaszade. Journal of Optoelectronic and Biomedical Materials, 14(3) (2022) 107–114.
[6] R.G. Abaszade [et al.] Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures 19(2) (2024) 837-843.
[7] N.Ivanichok [et al.] Materials 17 (2024) 1-21.
[8] R.Moradi [et al.] In: A. Barhoum, K. Deshmukh (eds.) Handbook of Functionalized Carbon Nanostructures. Springer (2024) 2581-2614.

Контролируемый рост и магнитные характеристики наноструктурированных Fe-сеток на анодном оксиде алюминия

Д.И. Тишкевич[1*], А.И. Воробьёва[2], Е.А. Уткина[2], С.М. Завадский[2], А.А. Бондарук[1], А.А. Роткович[1], Т.И. Зубарь[1], и А.В. Труханов[1]

[1]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г.Минск, Беларусь
[2]Кафедра микро- и наноэлектроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 г.Минск, Беларусь

В данной работе представлены результаты исследования нанопористых пленок железа, синтезированных на поверхности пористых анодных оксидных алюминиевых (ПАОА) мембран. Основной целью исследования была разработка эффективного метода получения упорядоченных наноструктур железа с контролируемыми морфологическими и магнитными характеристиками, а также изучение их потенциальных применений в современных технологиях.

Пористые мембраны из ПАОА были изготовлены методом анодирования высокочистой алюминиевой фольги в растворе щавелевой кислоты при различных напряжениях (40, 50 и 60 В). Это позволило получить шаблоны с упорядоченной гексагональной структурой пор, диаметр и межпоровое расстояние которых зависели от приложенного напряжения. Толщина мембран составляла 3,3±0,2 мкм, что обеспечивало необходимую механическую стабильность для последующего нанесения железных пленок.

Нанесение ферромагнитного слоя осуществлялось методом ионно-лучевого испарения в вакуумной установке ВУ2М. Использовались железные мишени высокой чистоты (99,995%), а процесс осаждения проводился при строго контролируемых условиях: давлении $2 \cdot 10^{-2}$ Па, температуре подложки 303 -313 К и скорости осаждения 0,2 нм/с. Были исследованы пленки двух толщин - 30 и 100 нм, что позволило изучить влияние этого параметра на формирование наноструктуры.

Морфологические исследования с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭРС) показали, что железные пленки точно повторяют топографию ПАОА-подложки, формируя регулярную ячеисто-пористую структуру. При толщине 100 нм наблюдалось образование сплошной сетки с Fe-осаждением преимущественно по краям пор, тогда как пленки размером 30 нм имели островковый характер распределения.

Особый интерес представляют результаты магнитных измерений, проведенных при температурах 4,2 К и 300 К. Все образцы продемонстрировали выраженную перпендикулярную магнитную анизотропию. Коэрцитивная сила в перпендикулярном направлении ($Hc\perp$) существенно превышала значения для плоскости пленки: при комнатной температуре это превышение составляло 1,6-2 раза (282-328 Э против 135-182 Э), а при криогенных температурах разница становилась еще более заметной. Отношение остаточной намагниченности к насыщенной (Mr/Ms) для перпендикулярной ориентации находилось в диапазоне 0,14-0,30, что свидетельствует о высокой стабильности магнитных свойств.

Полученные результаты имеют важное практическое значение. Высокие магнитные характеристики в сочетании с возможностью точного контроля морфологии делают такие наноструктуры перспективными для применения в различных областях науки и техники.

Исследование химического строения и оптических свойств пористого анодного оксида алюминия, сформированного в растворах селеновой кислоты

Ю.В. Назаркина[1,2]*, Д.Д. Шитова[1,2], Д.А. Дронова[1,2], А.А. Дронов[1,2], Е. В. Кытина[1], и Е. А. Константинова[1]

[1]*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, д. 1, 124498 г. Зеленоград, Россия, *e-mail: engvel@mail.ru*

[2]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», Физический факультет, Ленинские горы, д.1, 119991 г. Москва, Россия*

Пористый анодный оксид алюминия (ПАОА) привлекает внимание исследователей из-за своих геометрических параметров: упорядоченные открытые цилиндрические размеры которых: диаметр, толщину слоя, расстояние между ними можно легко варьировать с помощью электролита или других технологических параметров окисления и постобработки. Это позволяет использовать ПАОА в качестве матрицы для исследования различных наноструктур, полученных путём осаждения в её поры, наноконтейнера для доставки лекарств или роста клеточных культур, химических и биологических сенсоров с оптическим или электрохимическим принципом действия.

Селеновая кислота является одним из перспективных электролитов для синтеза ПАОА, так как её использование позволяет получать упорядоченные пористые структуры за короткие процессы анодирования и при малой толщине жертвенного слоя. Также было показано, что ПАОА, полученный в селеновой кислоте, является прозрачным, и нефлуоресцирующим, в том числе, при нагреве. Таким образом, он удобен для исследования материалов, осажденных в его поры. Однако имеются противоречивые данные о составе пленок, полученных в растворах селеновой кислоты. Также отсутствует информация о том, какие дефекты, которые в том числе, могут влиять на оптические свойства, характерны для таких оксидов.

Целью данной работы является комплексное исследование морфологии, состава и оптических свойств ПАОА, полученного в H_2SeO_4 в различных технологических режимах. Рассмотрено влияние концентрации электролита, плотности тока и температуры анодирования на геометрические параметры, парамагнитные дефекты, люминесцентные свойства оксида алюминия.

В результате исследования методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и дисперсионной рентгеновской спектроскопии по длине волны было выявлено, что концентрация селена и серы в объеме образцов не превышает 2 ат.%, и с повышением температуры электролита содержание селена в пленках уменьшается. С учетом того, что с повышением температуры анодирования увеличивается скорость травления стенок пористой структуры, можно сделать вывод о том, что селен включен в приповерхностный слой стенок пористой структуры. Также методом электронного парамагнитного резонанса в пленках ПАОА установлено наличие незначительного количества кислородных вакансий, а также кислородных радикалов с аксиальной симметрией, а при некоторых параметрах анодирования выявлены также крупные спиновые центры, содержащие неспаренный электрон на атоме кислорода, по-видимому, связанного с селеном.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00402.

Структурные и электронные свойства комплекса состоящего, из NV и P1 центров в наноалмазе:HF-3C моделирование

В.А.Пушкарчук [1]*, А.П. Низовцев[2,3], А.Л. Пушкарчук[3,4], С.А. Кутень[5], Д. В. Ермак[5], Н.И. Каргин[3], и С.Я. Килин[2,3]
[1]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки,6, 220013 г. Минск, Беларусь, *e-mail:pushkarchuk@bsuir.by*
[2]*Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 г. Минск, Беларусь*
[3]*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Каширское шоссе, 31, 115409 г. Москва, Россия*
[4]*Институт физико-органической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 13, 220072 г. Минск, Беларусь*
[5]*Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская, 11, 220006 г. Минск, Беларусь*

Выполнено моделирование методом HF-3C комплекса, состоящего из NV- и P1-центров, в нанокластере алмаза, перспективного для применений в разрабатываемых квантовых технологиях второго поколения. Методология основана на эффективной параметризации метода Хартри-Фока с учётом дисперсионных взаимодействий. Дан анализ изменений геометрии, электронной структуры и спиновой плотности при формировании комплекса. Расчеты проводились для кластера $C_{144}H_{100}NV^{-}P1$ с зарядом -1 и спиновой мультиплетностью 4. На рисунке 1 представлены результаты расчета распределения спиновой плотнсти для изучаемого дефекта.

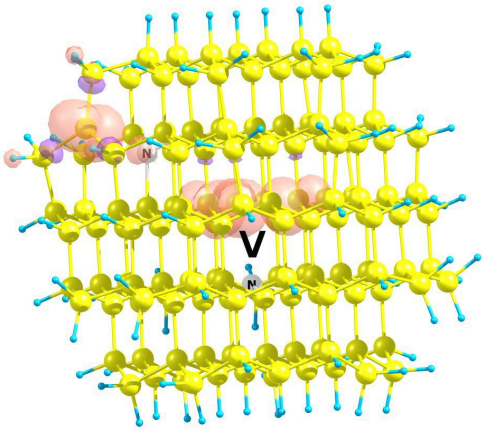


Рисунок 1. Распределение спиновой плотности для кластера $C_{144}H_{100}NV^{-}P1$. V обозначает вакансию

Выполнено сравнение структурных, электронных и спиновых характеристик даной системы с аналогичным кластером, содержашим только NVцентр. Установлено, что в комплексе (NV+P1) спиновая плотность концентрируется не только на ближайших соседях вакансии NV центра, но и на атоме замещающего азота N_{P1}, образующего P1 центр, будучи локализованной на одном из четырех ближайших соседей атома N_{P1}, для которого расстояние N_{P1}-C является наибольшим.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена при частичном финансировании ГПНИ 3025 РБ и гранта Министерства науки и высшего образования РФ № 075-15-2024-556 от «25» апреля 2024 г.).

Влияние переходного слоя на формирование гетероструктур на основе кремния

Ш. Х. Далиев и Ф. А. Сапаров*
*Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана, ул. Янги Алмазар, 20, 100057 г. Ташкент, *e-mail: sfa@inbox.ru*

Рассмотрим кратко основные характеристики переходного слоя полупроводник-диэлектрик. Для наших структур, полученных при минимальной температуре, минимальная плотность N_{ss} для ориентации кремния <111> $N_{ss} \approx 1{,}2 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$ эВ$^{-1}$. Объектом исследования выбрана структура CdO-SiO_2-p-Si, полученная методом магнетронного распыления на кремниевых подложках КДБ-30 (рис. 1).

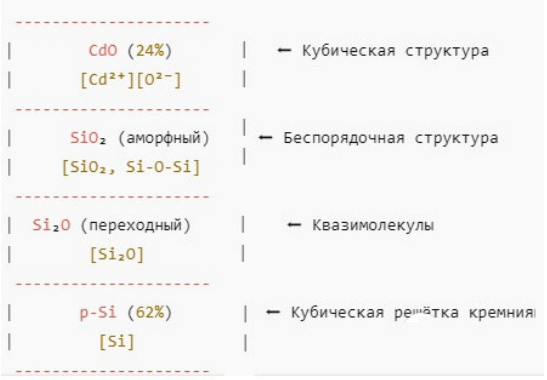


Рисунок 1. Примерная кремниевая структура типа CdO-SiO_2-p-Si

Для исследования структурных и фазовых характеристик оксидного слоя применялся метод Раман-спектроскопии. Результат выявил характерные пики, соответствующие соединениям Si, SiO_2, Si_2O и CdO (рис. 2). Зарегистрированные спектральные линии указывают на формирование однородного и качественного оксидного слоя, без наличия посторонних примесных соединений.

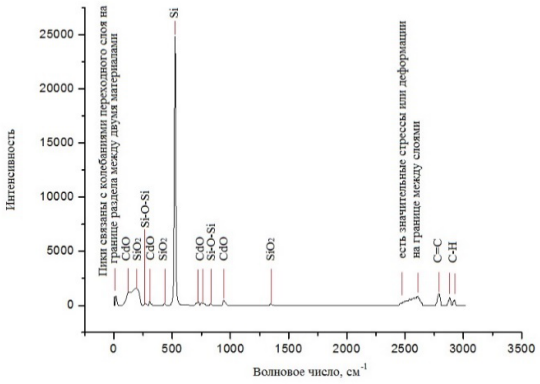


Рисунок 2. Раман-спектр структуры p-Si/SiO_2-CdO. На графике представлены характеристики колебательных мод, соответствующих Si, SiO_2, Si_2O и CdO. Обнаруженные пики, связанные с Si_2O, подтверждают формирование механическое напряжения у переходного слоя.

Список использованных источников

[1] Sh.Kh. Daliev [и др.] East European Journal of Physics 4 (2023) 206-209.
[2] Sh. Kh. Daliev [и др.] Influence of the interface on the electrical characteristics of MIS structures // The European science review, №1-2, 2022, pp. 31-35.

Люминесцентные свойства квантовых точек $Cd_xZn_{1-x}S$, синтезированных в матрице бегеновой кислоты с помощью метода Ленгмюра-Блоджетт

К.А. Свит* и Д. В. Гуляев
*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, , пр. ак. Лаврентьева, 13, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: svit@nanotech.nsk.ru*

Интерес к квантовым точкам (КТ) $Cd_xZn_{1-x}S$ обусловлен возможностью варьирования ширины их запрещенной зоны в широком диапазоне энергий от 2.4 эВ (CdS) до более чем 4 эВ (ZnS), что позволяет перекрывать широкий спектральный диапазон от видимой области спектра до УФ [1,2]. В большинстве своем КТ $Cd_xZn_{1-x}S$ демонстрируют широкую полосу ФЛ, обусловленную дефектами, положение которой в значительной степени зависит от технологии их синтеза. КТ $Cd_xZn_{1-x}S$, синтезированные с помощью метода Ленгмюра-Блоджетт, представляют значительный интерес ввиду отсутствия пассивации поверхности, что позволяет более детально отследить взаимосвязь структуры поверхности и люминесцентных свойств.

В данной работе в диапазоне температура от 80 до 330 К исследованы люминесцентные свойства КТ $Cd_xZn_{1-x}S$ составов x=0.5 и x==0.2, синтезированных с помощью методики Ленгмюра-Блоджетт в матрице бегеновой кислоты. Установлено, что в диапазоне температур от 80 до 290 К, в спектрах ФЛ можно отчетливо выделить лишь одну широкую полосу с энергией максимума около 2.2 эВ (Рис. 1). Повышение температуры приводит к появлению более высокоэнергетичной полосы с энергией максимума около 3 эВ.

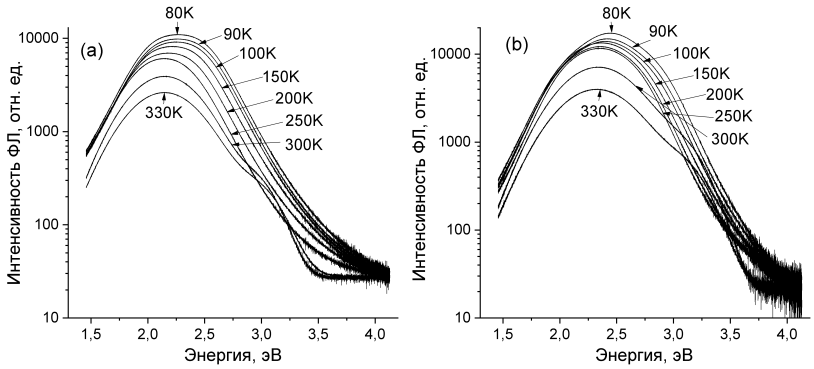


Рис.1.Спектры ФЛ КТ $Cd_{0,5}Zn_{0,5}S$ (a) и $Cd_{0,2}Zn_{0,8}S$ (b), измеренные при различных температурах.

Анализ экспериментальных данных показал, что люминесценция в исследуемых КТ полностью обусловлена рекомбинацией через глубокие уровни. В спектрах ФЛ можно выделить два пика: (i) низкоэнергетичную полосу, которая является доминирующей и значительно сдвигается при изменении состава КТ и температуры; (ii) высокоэнергетичную полосу, положение которой слабо зависит от температуры и состава. Установлено, что низкоэнергетичная полоса ФЛ, связана с рекомбинацией через уровни, образованные оборванными связями атомов S на поверхности КТ. Природа высокоэнергичной полосы остается под вопросом. Возможно, появление данной полосы связано с частичной пассивацией оборванных связей на поверхности КТ молекулами бегеновой кислоты и появлению в запрещенной зоне КТ соответствующих энергетических уровней.

Список использованных источников:
[1] J. Cizeron [и др.] J. Phys. Chem. B, 101 (1997) 8887-8891.
[2] M. A. Cotta. ACS Appl. Nano Mater. 3 (2020) 4920-4924.

Амфотерное молекулярное допирование одностенных углеродных нанотрубок для сенсорных приложений

В. И. Сысоев*, Ю. В. Федосеева, Г.И. Семушкина, С. А. Лаврухина, Л. Г. Булушева, и А. В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, пр-т Ак. Лаврентьева, 3, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: sysoev@niic.nsc.ru*

Мониторинг окружающей среды является одной из ключевых технологий во многих отраслях жизнедеятельности человека, что приводит к увеличению спроса на разработку портативных газовых сенсоров для экспресс-анализа качества воздуха. Уникальные свойства одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) менять электропроводность, отдавать/принимать электроны в сочетании с большой удельной поверхностью делают их прекрасной платформой для создания резистивных газовых сенсоров. Использование пленок ОУНТ низкой плотности и индивидуализация нанотрубок может максимизировать количество доступных мест адсорбции, что увеличивает чувсвительность материала. Например, последние работы, посвященные газовым сенсорам на основе немодифицированных ОУНТ, показывают предел обнаружения (ПО) диоксида азота менее 1 ppb [1]. Несмотря на свои многообещающие свойства, ОУНТ имеют несколько критических ограничений при использовании в качетстве газовых сенсоров, таких как низкая чувствительность и селективность, неполная регенерация и увеличенные времена отклика/регенерации при комнатной температуре.

В настоящей работе мы предлагаем методику создания гибридного материала на основе ОУНТ с органическими допантами для применения в чувствительных элементах газовых сенсоров. Тонкие пленки получены из коммерчески доступных ОУНТ компании OCSiAl. Разработанная методика позволяет получать пленки толщиной до 50 нм, плотностью до 1 нг/мм^2 и сопротивлением до 1 МОм. Полученные образцы обладают высокой чувствительностью по отношению к NO_2 в воздухе с пределом обнаружения около 10 ppb при температуре 150 °C, что ниже пределов допустимых концентраций на рабочем месте [2,3]. Нековалентная модификация ОУНТ органическим донором (тетратиафульваленом (TTF)) или акцептором (тетрацианохинодиметаном (TCNQ)) приводит к n или p-допированию, соответственно, не вызывая существенных структурных изменений. TTF/ОУНТ проявляют увеличенный отклик на аналит-акцептор (диоксид азота) и незначительный отклик на аналита-донор (аммиака), тогда как в случае TCNQ/ОУНТ наблюдается обратный эффект. TTF/ОУНТ способен обнаруживать следы NO_2 в воздухе с чувствительностью 52%×ppm^{-1} и ПО=1,2 ppb, в то время как датчик TCNQ/ОУНТ подходит для определения NH_3 с чувсвительнстью −0,2%×ppm^{-1} и ПО=220 ppb. Чтобы понять влияние нековалентной модификации на сенсорные свойства ОУНТ, проведены квантово-химические расчеты и спектроскопические исследования компонентов гибридного материала. Донорно-акцепторные взаимодействия между органическими молекулами и ОУНТ увеличивают величины переноса заряда в системе аналит-ОУНТ, что позволяет настроить селективность на определенные классы газов и увеличить чувсвительность сенсорного материала.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ №24-73-10039.

Список использованных источников:

[1] S. Kim [et al.] Adv. Mater. 36 (2024) 2313830.
[2] O. V. Sedelnikova [et al.] Carbon 186 (2022) 539–549.
[3] V.I. Sysoev [et al.] Carbon 233 (2025) 119915.

Исследование ГКР-активных тонких сплавных плёнок на основе комбинаций Ag/Mo и Ag/Nb

А.М. Тарасов*, Г.А. Меденков, А.И. Новосельцев, В.Д. Громов, С.В. Дубков и С.А. Гаврилов
*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», пл. Шокина, д. 1, 124498 г. Зеленоград, г.Москва, Россия, *e-mail: Tarasov@4309.ru*

Спектроскопия гигантское комбинационное рассеяние света (ГКР), основанная на усилении комбинационного рассеяния вблизи плазмонных наночастицах металлов, является перспективным методом для проведения ряда аналитических исследований. Благодаря ГКР возможно обнаружение сверхмалых концентраций веществ, вплоть до единичных молекул, поэтому возможно его применение в медицине, фармацевтике, экологическом мониторинге и пищевой промышленности.

Наибольшим коэффициентом усиления рассеяния обладают структуры на основе плазмонных наночастиц серебра. Однако, такие структуры обладают малым временем жизни. В результате взаимодействия серебра с воздушной атмосферой происходит сульфидизация поверхности. Это приводит к уменьшению усиления.

Решением данной проблемы могут выступать взаимно не растворимые многокомпонентные тонкие плёнки. В таких системах плазмонный компонент (Ag) не образует устойчивые химические соединения с металлической основой плёнки. В роли основы может выступать Nb и Mo. Оказание энергетическое воздействия на подложку приводит к выделению плазмонных наночастиц из объёма тонкой плёнки и формированию массива наночастиц на поверхности. В роли энергетического воздействия может выступать термическая обработка положки. Морфология наночастиц зависит от концентрации Ag в плёнке и от режима термической обработки.

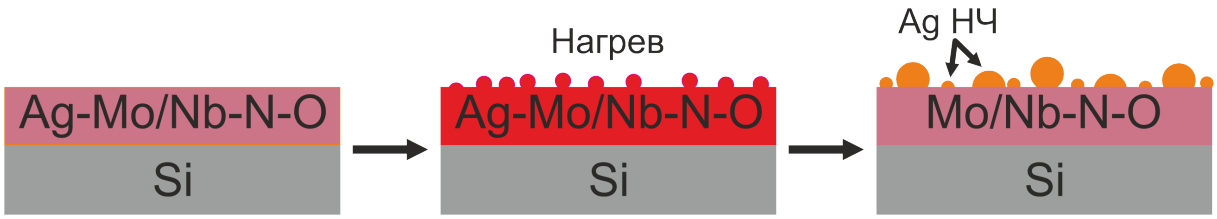


Рисунок 1. Процесс формирования ГКР-активной составляющей из тонкой плёнки Ag-Nb/Mo-N-O

В данной работе представлена методика формирования тонких плёнок системы Ag-Mo-N-O методом ионно-плазменного нанесения и Ag-Nb-N-O методом магнетронного нанесения (рис. 1). Показана зависимость морфологии плазмонных наночастиц Ag в зависимости от толщины, содержания Ag в исходной плёнке. Продемонстрировано влияние термической обработки на формируемый массив наночастиц Ag.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00610, https://rscf.ru/project/24-19-00610/.

Исследование процесса нуклеации частиц Pt на поверхности монокристаллического кремния с различным удельным сопротивлением

О.В. Воловликова*, Е.Н. Лазоркина, и К.Н. Кочетова
Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, д. 1, 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия,
e-mail: 5ilova87@gmail.com

Частицы платины представляют большой интерес в качестве катализатора для биосенсоров, топливных ячеек прямого электроокисления этанола [1-3]. Концентрация и размер платиновых частиц, а также поверхность, на которую они осаждены, играют важную роль в каталитической активности готового электрода [1, 2]. Большое количество работ описывают катализаторы, осажденные на проводящие поверхности, в частности углерод [1, 4], графен [5], углеродные нанотрубки [6]. Но на данный момент нет работ, описывающих процесс нуклеации Pt частиц на поверхности монокристаллического кремния p-типа проводимости с разным удельным сопротивлением. В связи с чем, изучение механизмов нуклеации частиц Pt на p-Si для предсказания распределения частиц на поверхности кремния является важной практической и исследовательской задачей. В работе проводили исследование процесса катодного осаждения Pt из электролита, содержащего H_2PtCl_6 , на поверхность кремния марок КДБ-0,01, КДБ-1 и КДБ-12. Была получена типичная серия потенциостатических транзиентов при приложенном потенциале от -0,25 до -0,4 В. Максимальное значение тока при осаждении прямо пропорционально приложенному потенциалу и принимает значения от 541 до 1380 мкА/см^2 для КДБ-0,01; 328,6 до 397,7 мкА/см^2 для КДБ-1 и от 267,7 до 1738 мкА/см^2 для КДБ-12. Время достижения максимального тока t_{max} имеет обратную зависимость от приложенного потенциала и проводимости Si. Путем интегрирования кривых I(t) получены значения электрического заряда Q, потребляемого в процессе осаждения Pt. Из уравнения Фарадея были рассчитаны значения массы осажденной платины за определенные промежутки времени, равные 50, 500 и 2100 секунд. Установлено, что значения заряда и массы платины на поверхности кремния увеличивается как с ростом длительности осаждения, так и приложенного потенциала. Для описания транзиентов тока использовали модельное описание Шарифкера–Хиллза [7]. Было установлено, что нуклеация Pt на кремнии марок КДБ-0,01 и КДБ-1 при потенциалах от -0,25 до 0,4 В и на КДБ-12 при потенциалах -0,35 и -0,4 В является прогрессирующей, на кремнии КДБ-12 при потенциалах -0,25 и 0,3 В является мгновенной. Рассчитаны значения коэффициента диффузии ионов Pt к поверхности D, скорости нуклеации AN_∞, которые прямо пропорциональны потенциалу осаждения. Полученные результаты исследований могут использоваться для дальнейшего изучения особенностей механизмов нуклеации частиц Pt, что позволит детальнее исследовать влияние различных параметров на их каталитическую активность.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена в рамках государственного задания 2023-2025 гг. соглашение FSMR-2023-0003.

Список использованных источников:

[1] H. A. Huy [и др.] Vietnam. J. Sci. Technol. 54(4) (2016) 472-482.
[2] G. Yang [и др.] Particuology 58 (2021) 169-186.
[3] J. J. Whalen [и др.] J. Electrochem. Soc. 152(11) (2005) C738.
[4] F. Pescher [и др.] RSC Adv. 14(44) (2024) 32358-32369.
[5] R. Siburian [и др.] Sci. Rep. 11(1) (2021) 2532.
[6] S. Takenaka [и др.] Catal. Lett. 141 (2011) 821-825.
[7] G. Gunawardena [и др.] J. Electroanal. Chem. Interf. Electrochem. 138 (1982) 225-239.

Синтез допированных шпинелей феррита никеля редкоземельными металлами иттрия и гадолиния

А. С. Загребова[1,2]*
[1]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, пр. Сатпаева, 2, 010008 г. Астана, Республика Казахстан, *e-mail: azagrebova@gmail.com*
[2]*Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, пр. Абылай хана 2/1, 010008 г. Астана, Республика Казахстан,*

Одним из методов повышения адсорбционной способности ферритов со структурой шпинели является изменения функциональных свойств путем внедрения ионов металлов в кристаллическую решетку в качестве допантов [1]. Анализ литературных данных позволяет сделать вывод, что допирование феррита никеля редкоземельными элементами, привлекло большое внимание, и по настоящий момент методики синтеза допированных ферритных шпинелей активно разрабатываются [2-3].

Среди известных методов синтеза ферритов, безусловно, золь-гель метод получил наиболее широкое распространение [2, 4] поскольку обладает рядом преимуществ, таких как высокая степень однородности получаемых образцов, большая удельная поверхность, низкая температура синтеза ферритов, минимальные потери, использование простого оборудования и недорогостоящих реактивов для синтеза. Меняя способ обработки полученного золя, можно получить не только нанокристаллические порошки, но и керамику, тонкие пленки, неорганические мембраны с микропорами и т.п.

Целью данной работы является синтез допированных шпинелей феррита никеля редкоземельными металлами иттрия и гадолиния.

Для получения шпинелей состава $Ni_{1-x}Gd_xFe_2O_4$ и $Ni_{1-x}Y_xFe_2O_4$ в качестве исходных материалов использовали чистые нитраты солей никеля, железа, иттрия и гадолиния, лимонная кислота, ЭТДА, водный раствор аммиака, дистиллированная и деионизированная вода. Допированные ферриты были получены золь-гель методом согласно методике, описанной в [5] с последующим отжигом в муфельной печи для улучшения фазовой чистоты.

В результате были полученные образцы состава $Ni_{1-x}Gd_xFe_2O_4$ и $Ni_{1-x}Y_xFe_2O_4$ представляющие собой порошки бурого и черного цвета соответственно. Согласно данным ЭДА-анализа, атомное содержание гадолиния в структуре шпинели составило 7 %, а итрия – 1,8 %. Полученные результаты подтверждают успешное внедрение данных элементов в структуру феррита никеля, что может обусловить изменение его физических и химических характеристик. Морфологические и структурные характеристики синтезированных образцов будут исследованы, а их адсорбционные свойства изучены с целью оценки эффективности в процессах очистки водных сред.

Список использованных источников:
[1] S. Debnath [и др.] J. Alloys Compd. 852 (2021) 156884.
[2] М. Бережная [и др.] J. Neorg. Khim. 63 (2018) 706-711.
[3] F. M. A. Alzahrani [и др.] Mater. Sci. Eng. B 297 (2023) 116794.
[4] P. Thakur [и др.] J. Supercond. Nov. Magn. 33 (2020) 1569-1584.
[5] A. Kozlovskiy [и др.] Catalysts 11 (2021) 1393.

Исследование тонких пленок HfO_x, полученных атомно-слоевым осаждением, методом электронной оже-спектроскопии

Н. В. Александров*, А. В. Горячев, Е. П. Кириленко, А. А. Дудин, и Г. А. Рудаков
ИНМЭ РАН, ул. Нагатинская, д. 16а, корп. 1б, 115487 г. Москва, Россия,
**e-mail: adelsandrov@mail.ru*

Оксид гафния (HfO_x) привлекает значительное внимание в качестве high-k диэлектрика благодаря своей высокой диэлектрической проницаемости, термической стабильности и значительной ширине запрещенной зоны. Эти характеристики делают его ключевым компонентом для разработки различных полупроводниковых устройств [1].

В работе проведен анализ распределения элементов по глубине тонких плёнок HfO_x методом электронной оже-спектроскопии (ЭОС). Плёнки HfO_x получены в процессе атомно-слоевого осаждения (АСО), который обеспечивает высокую конформность покрытия и прецизионный контроль толщины слоев [2]. Проведено сравнение плёнок HfO_x, сформированных методами термического и плазма-стимулированного АСО на Si подложке, по элементному составу и по изменениям на границе раздела с подложкой. На рисунках 1 и 2 приведены результаты исследований.

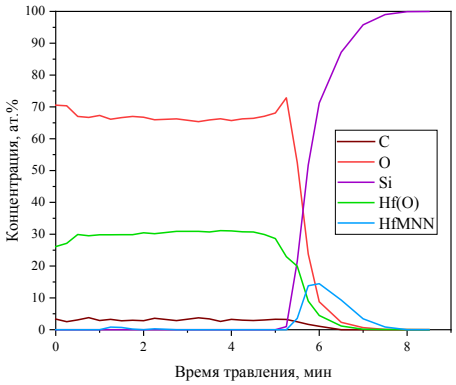


Рисунок 1. Распределение концентраций гафния и кислорода в тонкой плёнке HfO_x, полученной методом термического АСО

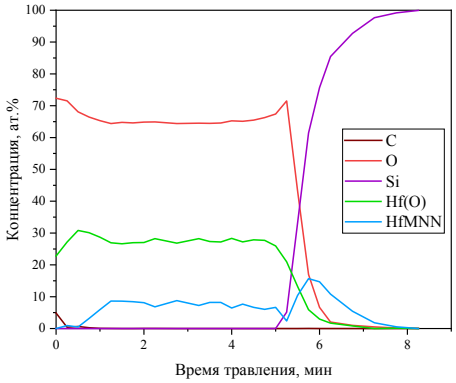


Рисунок 2. Распределение концентраций гафния и кислорода в тонкой плёнке HfO_x, полученной методом плазма-стимулированного АСО

В объёме плёнки HfO_x, сформированной методом термического АСО, детектируется углерод, форма оже-пика которого соответствует углеводородным соединениям – остаткам прекурсора (рисунок 1). В плёнке HfO_x, полученной методом плазма-стимулированного АСО, углеводородная форма оже-пика детектируется только на поверхности (естественные загрязнения), однако в объёме плёнки присутствует гафний, не связанный с кислородом (HfMNN, рисунок 2). В обоих случаях на границе раздела с подложкой выделяется гафний, не связанный с кислородом. Кроме того, хотя в объёме плёнок атомные концентрации гафния и кислорода соответствуют диоксиду HfO_2, на поверхности и на границе раздела наблюдается избыток кислорода, что обусловлено образованием гидроокислов гафния [3].

Список использованных источников:

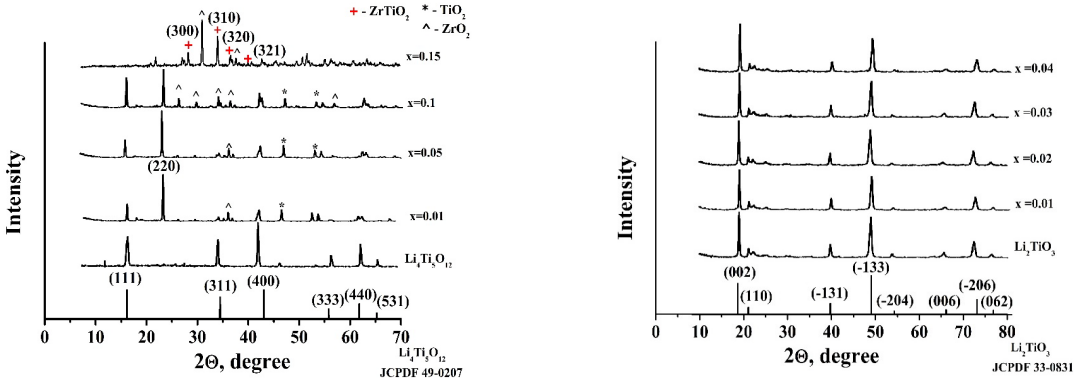
[1] J. T. Gaskins [и др.] ECS Journal of Solid State Science and Technology 6(10) (2017) N189-N208.
[2] R. L. Nigro [и др.] Journal of Crystal Growth 539 (2020) 125624.
[3] А. В. Горячев [и др.] Сборник докладов конференции «ПМТ – 2024» ИПТИП РТУ МИРЭА Том I (2024) 144–150.

Физико-химические и адсорбционные свойства допированных ионами Zr^{4+} оксидов $Li_4Ti_5O_{12}$ и Li_2TiO_3

А. И. Иванец, Е. С. Бичева*, Т.Ф. Кузнецова
*Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси, ул. Сурганова 9/1, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: Andreiivanets@yandex.ru*

На сегодняшний день литий является важнейшим стратегическим сырьем для выпуска электротранспорта и электрических накопителей энергии. Литий в основном сконцентрирован в твердых рудах и соляных озерах. Основными проблемами извлечения лития из руд являются высокое потребление энергии и стоимость. Поскольку около 75% запасов лития содержится в природных рассолах, представляется актуальным разработка адсорбентов для извлечения ионов лития из водных растворов.

В настоящей работе изучен твердофазный синтез Zr^{4+}-допированных оксидов $Li_2Zr_xTi_{1-x}O_3$ (x=0,01; 0,02; 0,03; 0,04) и $Li_{1,33}Zr_xTi_{1,67-x}O_4$ (x=0,01; 0,05; 0,1; 0,15), характеризующихся высокой стабильностью кристаллической структуры в многократных циклах адсорбции-десорбции ионов лития. Установлено, что в результате изовалентного замещения ионов Ti^{4+} на Zr^{4+} образование кубической шпинели $Li_{1,33}Zr_xTi_{1,67-x}O_4$ происходит в диапазоне $0,01 \le x \le 0,05$. При этом параметр *a* находится в диапазоне 8,341-8,341 Å (рис. 1а). Для образцов $Li_2Zr_xTi_{1-x}O_3$ моноклинная структура сохраняется в диапазоне допирования $0,01 \le x \le 0,04$ и параметр *a* варьируется от 9,029 до 9,033 Å (рис. 1б).



а б

Рисунок 1. Рентгенограммы исходных оксидов $Li_{1,33}Zr_xTi_{1,67-x}O_4$ (а) и $Li_2Zr_xTi_{1-x}O_3$ (б)

Изотермы адсорбции-десорбции азота необратимы, относятся к псевдотипу II, обладают петлями капиллярно-конденсационного гистерезиса типа H3. Удельная поверхность и объем мезопор образцов с увеличением вводимых ионов Zr^{4+} незначительно увеличиваются, для $Li_{1,33}Zr_xTi_{1,67-x}O_4$ от 9 до 11 $м^2/г$ (0,02-0,01 $см^3/г$), для $Li_2Zr_xTi_{1-x}O_3$ от 7 до 15 $м^2/г$ (~ 0,01-0,08 $см^3/г$). Согласно данным СЭМ, образцы оксидов с разной степенью замещенности ионами Zr^{4+} имеют высокодисперсную глобулярную структуру, размер агломератов составляет ~ 200-400 нм.

Образцы $Li_{1,33}Zr_{0,1}Ti_{1,57}O_4$ и $Li_2Zr_{0,02}Ti_{0,98}O_3$ имеют высокую сорбционную емкость 64,1 и 50,0 мг/г. Адсорбционная емкость $Li_{1,33}Zr_{0,1}Ti_{1,57}O_4$ и $Li_2Zr_{0,02}Ti_{0,98}O_3$ после 5 циклов кислотной регенерации составляет 47,9 и 38,4 мг/г. Допирование ионами Zr^{4+} оксидов $Li_4Ti_5O_{12}$ и Li_2TiO_3 обусловливает снижение выщелачиваемости титана.

Таким образом, получены эффективные адсорбенты ионов лития на основе Zr^{4+}-допированных оксидов $Li_2Zr_xTi_{1-x}O_3$ и $Li_{1,33}Zr_xTi_{1,67-x}O_4$.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке гранта БРФФИ № Х23УЗБ058.

Исследование структурных свойств и состояния межслойных границ железосодержащих слоистых структур с эффектом однонаправленной анизотропии

И.В.Блинов*, Ю.В. Корх, М.А. Миляев, А.В. Столбовский, Т.В. Кузнецова, И.К. Максимова, А.Ю. Гермов, Б.Ю. Голобородский, Р.М. Фалахутдинов
*[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: blinoviv@mail.ru*

В устройствах хранения информации эффект обменного смещения имеет определяющее значение, поскольку он обеспечивает устойчивое однородное намагниченное состояние. Для успешного практического применения структур с обменным смещением необходимо изучить зависимость структурных и магнитных свойств от характера и эффективности межслойной связи, которая в свою очередь определяется структурно-химическим состоянием слоев и межслойных границ.

В работе представлены результаты исследования структурных и гистерезисных свойств железосодержащих слоистых структур с антиферромагнитными оксидами. Образцы Al_2O_3/Ta(5нм)/$Ni_{80}Fe_{20}$(20нм) и MgO(100)/^{57}Fe(50нм)/Cr(2нм) были приготовлены методом магнетронного напыления на монокристаллические подложки Al_2O_3 и методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложки MgO, соответственно. Исследование структуры проведено при помощи рентгеновской дифракции, рамановской спектроскопии, атомно- и магнитно-силовой микроскопии. В пленках пермаллоя, окисленных на воздухе, установлено, что по мере роста температуры термомагнитной обработки в образцах формируются преимущественно оксиды $NiFe_2O_4$ и аморфные оксигидроксидные группы железа. При дальнейшем повышении температуры отжига формирующиеся оксиды на поверхности пленок $Ni_{80}Fe_{20}$ являются оксидами железа α-Fe_2O_3. Определены закономерности изменения гистерезисных свойств при варьировании температуры отжига. Показана возможность формирования обменного смещения петли гистерезиса в окисленных пленках пермаллоя. Возникновение, которого, по-видимому, обусловлено ростом энергии антиферромагнитных (АФ) зерен вследствие увеличения их размера.

Проведенные мессбауэровские исследования пленок MgO(100)/^{57}Fe(50нм)/Cr(2нм) на ядрах ^{57}Fe в геометрии обратного рассеяния с регистрацией электронов конверсии (CEMS) до и после отжига позволили определить динамику формирования АФ оксидного слоя α-Fe_2O_3 и получить данные о состоянии межслойных границ (рис. 1). Таким образом, удалось определить влияние состояния межслойных границ на изменения гистерезисных свойств пленок при отжиге.

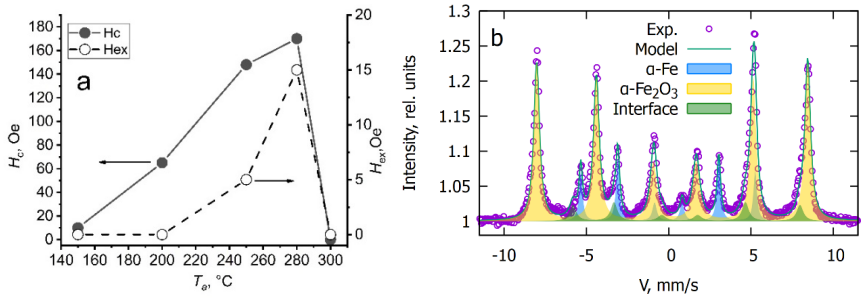


Рисунок 1. Зависимости H_c и H_{ex} образца Al_2O_3/Ta(5нм)/$Ni_{80}Fe_{20}$(20нм) от температуры отжига, Ta (a) Мессбауэровский спектр MgO(100)/^{57}Fe(50нм)/Cr(2нм) после отжига 250 °C – 3 ч. (b)

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке РНФ и Правительства Свердловской области (проект № 24-22-20083, соглашение 3-24-МГ)

Влияние условий синтеза и модификации поверхности нанопористого оксида алюминия на краевой угол смачивания

А.А. Бондарук*, А.А. Роткович, С.А. Герман, Д.И. Тишкевич, А.В. Труханов

*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: bondaruk625@gmail.com*

Пленки пористого оксида алюминия обладают рядом уникальных свойств: наноразмерная упорядоченная пористая структура, малый разброс диаметра пор, высокая механическая прочность и т. д. Наличие нанопор является одной из основных причин возможности изменения свойств смачиваемости на поверхности пористого оксида алюминия (ПАОА). Смачиваемость пленок ПАОА имеет значение для использования в получении функциональных композитов, коррозионной стойкости и для биологического транспорта [1]. Экспериментальные образцы были сформированы из фольги Al (99,994%) толщиной 100 мкм. После предварительной обработки образцы ПА были двухэтапно анодированы в 4% $H_2C_2O_4$ при 40, 50, 60 В. Угол смачивания измерялся с помощью метода лежащей капли. Для исследования поверхности ПАОА использовался сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) Carl Zeiss EVO10. Модификация поверхности пленок ПАОА проводилась путем травления в 10% растворе NaOH при температуре 35-40 °C с продолжительностью 15-60 сек.

Обнаружено, что с увеличением диаметра пор в диапазоне 50-85 нм смачиваемость поверхности ПАОА увеличивается за счет капиллярного эффекта. Однако модификация поверхности путем химического травления в 10% растворе NaOH приводит к более интенсивному процессу разрушения пористой структуры из-за неконтролируемого травления стенок упорядоченных пор. При этом данный процесс влияет на угол смачивания, который изменяется от 48 до 31° для образцов, полученных при 50 В. Таким образом, установлено, что варьированием как условий синтеза, так и поверхностной модификации пленок ПА можно получить микроструктуру с контролируемой смачиваемостью, что перспективно для электроники, оптоэлектроники, изучения магнетизма, использования биоматериалов и т. д.

Список использованных источников

[1] A. Vorobjova [и др.] RSC Advances 11 (2021) 3952.

Неохлаждаемые фотодиоды для коротковолнового ИК диапазона 2.0-2.6 мкм на основе метаморфных гетероструктур InAlAs/InGaAs/InP

Е. И. Василькова[1]*, О. В. Баранцев[1], Е. В. Пирогов[1], К. О. Воропаев[2], А. А. Васильев[2], И. И. Новиков[1], Л. Я. Карачинский,[1] и М. С. Соболев[1]
*[1]СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, , ул. Хлопина, д. 8 к 3, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: elenvasilkov@gmail.com*
[2] АО «ОКБ-Планета», ул. Большая Московская, д.13а, пом.1н, 173004 г. Великий Новгород, Россия,

Высокочувствительные фотодетекторы коротковолнового инфракрасного (КВИК) диапазона находят применение в приборах ночного видения, газовой спектроскопии и дистанционном зондировании. Повышенный интерес в этой сфере вызывают фотодетекторы на основе полупроводниковых A3B5 гетероструктур InAlAs/InGaAs на подложках InP, способные перекрывать КВИК область спектра от 1.0 до 2.6 мкм в зависимости от выбранного состава фотоактивного слоя [1]. Высокий уровень эпитаксиальной и пост-ростовой технологии позволяет InGa(Al)As/InP фотодетекторам конкурировать с другими КВИК материальными базами HgCdTe и InSb, особенно в целях создания компактных портативных устройств, не требующих охлаждения.

В настоящей работе представлены pin-фотодиоды, созданные на основе метаморфных гетероструктур InAlAs/InGaAs/InP(100), выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на установке Riber MBE49. Особенностью конструкции гетероструктуры фотодиода является использование метаморфного буферного слоя n^+-$In_xAl\square\square_xAs$ толщиной 2 мкм с плавным линейным увеличением концентрации InAs (x) от 0.52 до 0.86. На сформированной таким образом "виртуальной подложке" была выращена активная область p^+-$In_{0.83}Al_{0.17}As$/n-$In_{0.83}Ga_{0.17}As$, плотность прорастающих дислокаций в которой составила $5\cdot10^8$ см$^{-2}$ по данным просвечивающей электронной микроскопии Кристаллы pin-фотодиодов с фоточувствительной областью 140 мкм в диаметре изготавливались методом взрывной фотолитографии.

Измерения вольт-амперных характеристик разработанных pin-фотодиодов показали, что при комнатной температуре (300 К) и обратном смещении -0.5 В величина темнового тока образцов составляет около 4 мкА (25 мА/см²), при этом основной вклад в темновой ток вносит генерационно-рекомбинационный механизм в области пространственного заряда [2]. Шунтирующее сопротивление при этом составило 36 кОм, а барьерная емкость перехода изменялась от 14 пФ при нулевом смещении до 8 пФ при обратном смещении -0.5 В. Максимальный фотоотклик фотодиодов в условиях 300 К наблюдался при длине волны падающего излучения 2,3 мкм, где токовая чувствительность составила 0.7 А/Вт, а удельная обнаружительная способность достигла $3.3\cdot10^{11}$ см·Гц$^{1/2}$/Вт.

Таким образом, результаты проведенных исследований вольт-амперных и спектральных характеристик метаморфных InAlAs/InGaAs/InP pin-фотодиодов в КВИК-диапазоне 2.0-2.6 мкм подтверждают возможность их практического применения в портативных приборах тепловидения и газового анализа. Дальнейшим шагом в развитии данной темы будет являться оптимизация конструкции буферных слоев и ростового процесса, направленная на снижение плотности дислокаций в активной области фотодиода и дальнейшее снижение плотности темнового тока.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации в рамках Государственного задания № FSRM-2023-0006.

Список использованных источников

[1] И. Д. Бурлаков [и др.] УПФ 2(2) (2014) 131-162.
[2] Е. И. Василькова [и др.] ФТП 58(7) (2024) 358-364.

Исследование динамики экранирования заряда при локальном переключении на неполярной поверхности монокристаллов ниобата лития

В. А. Васипуллин*, А. П. Турыгин, М. С. Кособоков, С. А. Мельников, В. Я. Шур, и Д.О. Аликин

*Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620000 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: vova90vasipullin@mail.ru*

Создание доменных структур с контролируемыми параметрами позволяет изменять проводимость сегнетоэлектрических кристаллов за счёт накопления свободных носителей заряда на доменных стенках [1]. Стабилизация доменных структур в сегнетоэлектриках является принципиальной для создания микроэлектронных устройств, таких, как транзисторы и мемристоры [2]. Важным аспектом для понимания динамики роста и стабилизации доменной структуры является экранирование деполяризующего поля, влияющего на форму создаваемых доменов [3].

В данной работе при помощи методов локального переключения поляризации зондом сканирующего зондового микроскопа была исследована динамика экранирования отдельных доменов на неполярных поверхностях монокристаллов ниобата лития.

Одним из ключевых механизмов экранирования доменных структур при локальном переключении является инжекция заряда с зонда сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) [4]. Нами было показано, что время релаксации заряда инжектированного с зонда СЗМ слабо зависит от длительности и амплитуды приложенного напряжения при приложенном поле ниже порогового поля для формирования стабильного сегнетоэлектрического домена. При формировании домена время релаксации существенно увеличивалось, что указывает на вклад инжектированного заряда в стабилизацию доменов. Также наблюдалась анизотропия распределения поверхностного потенциала относительно полярной оси, что может быть связано с анизотропией поверхностной проводимости [5]. С ростом влажности время релаксации поверхностного заряда уменьшалось, а анизотропия при растекании заряда увеличивалась. При этом повышение влажности приводило к стабилизации доменной структуры за счет повышения поверхностной проводимости и уменьшения влияния деполяризующего поля.

Благодарность (финансирование). Использовано оборудование Уральского центра коллективного пользования «Современные нанотехнологии» УрФУ (рег. № 2968). Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 23-72-01074.

Список использованных источников:

[1] C.S. Werner [и др.] Sci. Rep 7(1) (2017) 9862.
[2] A.Q. Jiang [и др.] Nature Materials 19(11), (2020), 1188–1194.
[3] S.V. Kalinin [и др.] Reports on Progr. in Physics 81(3) (2018) 036502.
[4] S.V. Kalinin [и др.] Nano Letters 4(4) (2004) 555–560.
[5] A. A. Esin, [и др.] Ferroelectrics, 496(1) (2016) 102–109.

Тонкие пленки сплава Si_xGe_{1-x}, полученные электрохимическим осаждением германия в пористые кремниевые матрицы с последующим термическим отжигом

И. М. Гаврилин[1]*, Н. Л. Гревцов[2], Д.Л. Горошко[3], Е.Б. Чубенко[2], В.П. Бондаренко[2], А. А. Дронов[1]

[1]*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», пл. Шокина, 1, 124498, г. Зеленоград, г. Москва, Россия, *e-mail: gavrilin.ilya@gmail.com*

[2]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 г. Минск, Беларусь*

[3]*Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, ул. Радио, 5, 690041 г. Владивосток, Россия*

Благодаря своим электрофизическим и оптическим свойствам пленочные структуры на основе $Si_{1-x}Ge_x$ ($0<x<1$) имеют большой потенциал применения в устройствах оптоэлектроники и фотовольтаики [1, 2]. Высокая стабильность и термоэлектрическая эффективность обеспечивает их применение в термоэлектрических преобразователях [3]. В отличие от традиционных «объемных» методов, технологии получения пленок $Si_{1-x}Ge_x$ менее развиты и представлены преимущественно жидкофазной и молекулярно-лучевой эпитаксией, а также химическим осаждением из газовой фазы. Кроме того, ввиду высокой стоимости кристаллического Ge и его газообразных предшественников для получения сплавов $Si_{1-x}Ge_x$ обычно используют соединения с низкой концентрацией Ge, не обладающие оптимальным для термоэлектрического преобразования сочетанием электрофизических и физико-химических параметров.

Настоящая работа развивает исследования принципиально нового подхода к формированию пленок $Si_{1-x}Ge_x$, подразумевающего электрохимическое осаждение германия из водных растворов в матрицы анодного пористого кремния (ПК) с последующей термической обработкой [4]. В частности, демонстрируется возможность формирования пленок сплава различного типа проводимости, а также модификации получаемых структур силицидами хрома и кобальта, что важно для создания планарных термоэлектрических преобразователей энергии. Кроме того, обсуждается влияние остаточного пористого подслоя на электрофизические и термоэлектрические свойства получаемых структур.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-19-00720, https://rscf.ru/project/20-19-00720/

Список использованных источников:
[1] R. Basu/ Materials Advances 3 (2022) 4489–4513.
[2] J. Yang [и др.] MRS Bulletin 31 (2006) 224–229.
[3] I. Gavrilin [и др.] Materials Letters 313 (2022) 131802.

Наноструктурированный цирконат бария: синтез в один этап

С.Х. Гаджимагомедов*, М.Х. Рабаданов, Л.Р. Хибиева, Ш.П. Фараджев,
П.М. Сайпулаев, А.Э. Рабаданова, Д.К. Палчаев, Ж.Х. Мурлиева, Р.М. Эмиров,
Н.М.-Р. Алиханов
Дагестанский государственный университет, ул. М.Гаджиева, 43-а,
*367000 Махачкала, Республика Дагестан, Россия, *e-mail: darkusch@mail.ru*

Поиск материалов, пригодных для создания твердых электролитов с протонной проводимостью, продолжается уже несколько десятилетий. Это обусловлено высокой практической значимостью для применения данных материалов. Их широко применяют в электронике, медицине, катализе, накоплении энергии и др. Особый интерес представляет в этом плане соединения на основе црконатов [1,2], в частности цирконат бария ($BaZrO_3$), особенно в наноструктурированном виде, обладающий привлекательными свойствами. Цирконат бария со структурой перовскита (ABO_3), известен своей высокой химической стабильностью и отличной протонной проводимостью.

В настоящей работе показана возможность получения нанопорошков $BaZrO_3$ в один этап и керамик на основе, исследованы их структура и проводимость. Нанопорошки на основе $BaZrO_3$ получены методом нитрат - органических прекурсоров [3]. В результате горения формировался нанопорошок с насыпной плотностью примерно 0.03г/см^3. Термическую обработку одного и того же порошка осуществляли поэтапно в четыре режима при 600˚С, 700˚С, 800˚С и 900˚С с выдержкой при этих температурах в течение 30 мин соответственно.

Исследована структура нанопорошка после каждого этапа и проведен фазовый анализ. Проявившиеся рефлексы на рентгенограмме соответствуют, в основном, кристаллической фазе перовскита $BaZrO_3$ (пространственная группой *Pm-3m*) и побочной фазе карбида бария (BaC_2).

Проведены исследования спектров комбинационного рассеивания для порошка $BaZrO_3$ в диапазоне от ~10 до ~1600 см$^{-1}$. На спектрах обнаружены пики со сдвигами: при ~475 см$^{-1}$ и ~685 см$^{-1}$, относящиеся к модам TO4 и LO1; около ~277 см$^{-1}$ и ~299 см$^{-1}$, характерные активной моде $BaZrO_3$ второго порядка.

Исследована проводимость керамики $BaZrO_3$, спеченного при 950ºС в течение 10 часов, в зависимости от температуры и среды обработки в интервале температур 25 – 600°С и частот 1 кГц – 10 МГц. Обнаружено снижение проводимости при повышении температуры от ~25 ºС до ~187ºС. Выше ~460ºС наблюдался существенный рост проводимости от температуры при различных частотах.

Благодарность (финансирование):
Исследования выполнены при финансовой поддержке Гос. задания FZNZ-2025-0003.

Список использованных источников:
[1] D. S. Tsvetkov [и др.] Chimica Techno Acta 7 (2) (2020) 42-50.
[2] F. M. Draber [и др.] Nature Materials 19(3) (2020) 338-346.
[3] С.Х.Гаджимагомедов [и др.] Патент № 2808853 С1. – 2023. от 05.12.2023г.

Наноструктурированные керамики феррита висмута: структурные трансформации и диэлектрические свойства

С.Х. Гаджимагомедов*, М.Х. Рабаданов, Д.К. Палчаев, А.Э. Рабаданова, Ш.П. Фараджев, Ж.Х. Мурлиева, Р.М. Эмиров, и Н.М.-Р. Алиханов
*Дагестанский государственный университет, ул. М.Гаджиева, 43-а, 367000 Махачкала, Республика Дагестан, Россия, *e-mail: darkusch@mail.ru*

В данной работе изучено влияние замещения La на структуру и диэлектрические свойства нанокристаллической керамики $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ (BLFO) при x = 0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.2 (BLFO - 0, BLFO - 5, BLFO - 10, BLFO - 15, BLFO - 20) в широком диапазоне температур и частот. Интерес к материалам на основе $BiFeO_3$ (BFO), имеющим ромбоэдрически искаженную структуру перовскита типа ABO_3 с пространственной группой *R3c* [1], обусловлен за проявляемые при комнатной температуре свойства: сегнетоэлектричество и антиферромагнетизм.

Наноструктурированные керамики состава BLFO были изготовлены из нанопорошков методом искрового плазменного спекания [2]. Нанопорошки состава BLFO синтезированы золь-гель методом. Предварительная термообработка порошков проведена при температуре ~450°C в течение 30 мин. Синтез керамик осуществлялся при температуре ~600°C в течение 3 мин. Для керамик состава BLFO исследованы структура и диэлектрические свойства в диапазоне частот 1 kHz−10 MHz и температур 25−500◦C. Фазовый анализ показал, что образец BLFO - 0 содержит менее 5% примесных фаз, количество которых уже при 5% легирования La уменьшается до нуля.

На температурных зависимостях диэлектрической проницаемости ε'(T) обнаружены ряд аномалий (рис. 1), приходящие на температурные интервалы: ~ 100°C < T_1 < ~ 200°C, ~ 260°C < T_2 < ~ 320°C и ~ 330°C < T_3 < ~ 350°C. Показано, что с увеличением концентрации La величина ε' возрастает, а tgδ уменьшается.

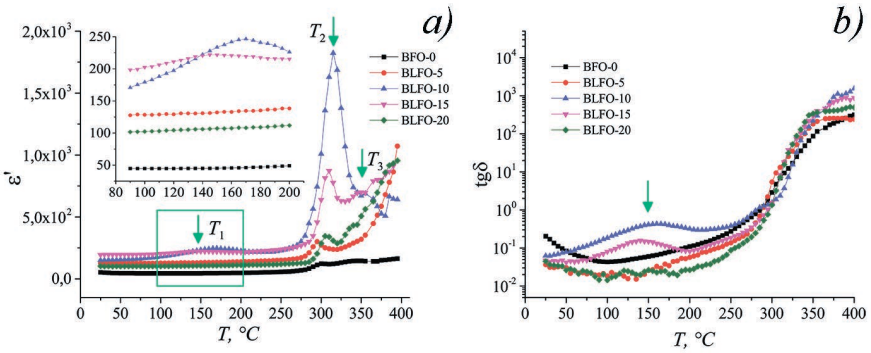


Рисунок 1. Температурная зависимость ε′ и tg δ образцов состава BLFO при частоте 10 кГц.

Аномалии, обнаруженные вблизи значений T_3 на зависимостях $\varepsilon'(T)$ и tg$\delta(T)$, в окрестности температуры Нееля (T_N), указывают на существование магнитоэлектрической эффекта [3] в керамиках составов BLFO. О наличии небольшого пика в области значений T_1 сообщалась в работе [4].

Благодарность (финансирование):
Исследования выполнены при финансовой поддержке Гос. задания FZNZ-2025-0003.

Список использованных источников:
[1] G. Catalan [и др.] Adv. Mater. 21(24) (2009) 2463.
[2] A. E. Rabadanova [и др.] Ferroelectrics 576(1) (2021) 1-7.
[3] Q. Zhang [и др.] Journal of Alloys and Compounds 546 (2013) 57-62.
[4] Zh. Jian [и др.] Journal of Magnetism and Magnetic Materials 386 (2015) 92-97.

Фаза прецессии положительно заряженного мюона в феррожидкости с 3% концентрацией наночастиц $CoFe_2O_4$ в ZFC-эксперименте

А.Л. Геталов*, С.И. Воробьев, Е.В. Виноградов, В.С. Лобин, Е.Н. Комаров, и С.А. Котов
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Орлова роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия,
** e-mail: getalov_al@pnpi.rncki.ru*

В нашей работе [1] на μSR-установке [2] были исследованы различные магнитные свойства феррожидкости с 3% наночастиц $CoFe_2O_4$, охлаждённых в магнитном поле (FC) и в нулевом магнитном поле (ZFC). Наночастицы со средним размером 8,5 нм стабилизировались в воде двойным ПАВом (додецилсульфат натрия $CH_3(CH_2)_{11}SO_4NA$ с плотностью $\rho = 1{,}01$г/см^3 и лауриновой кислоты $C_{11}H_{23}COOH$ с плотностью $\rho = 0{,}88$ г/см^3).

Наблюдаемые две частоты прецессии поляризации положительно заряженных мюонов (μ^+) соответствовали приложенному магнитному полю с поправкой плюс/минус $\sim h \leq 20$ Гс. Фазы прецессии в случае FC-измерений в пределах ошибок были равны нулю, как и для ZFC-измерений при комнатной температуре (290 К) и ниже 150 К. Однако, в диапазоне температур 150-250 К появляется отличная от нуля фаза, отрицательная для высокой частоты и положительная для низкой (см. рисунок). Надо отметить, что при обработке экспериментальных данных с фиксированной нулевой фазой величина остальных получаемых параметров не менялась (асимметрия, скорость деполяризации, частота).

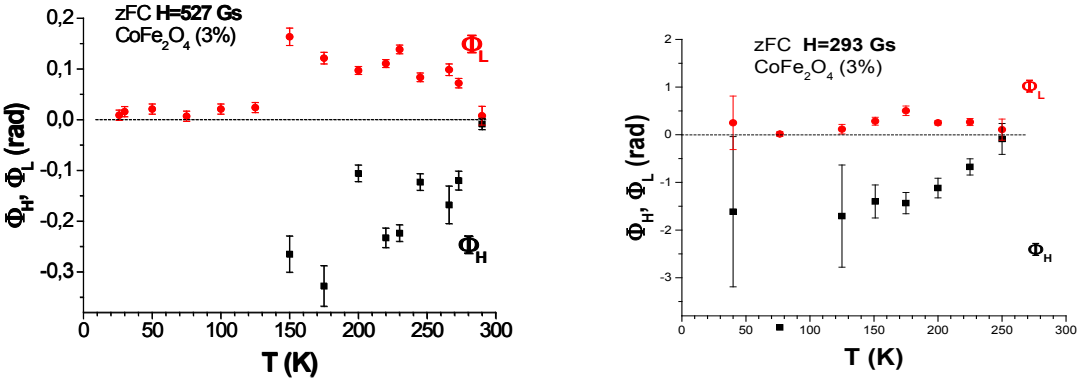


Рисунок 1. Температурная зависимость начальных фаз прецессии спина ансамбля мюонов в образце $CoFe_2O_4$ (3%) ZFC-измерение во внешнем магнитном поле H=527 Гс (левый) и H=293 Гс (правый); Φ_H – красные точки фаза низкой частоты, Φ_L-тёмные квадраты фаза высокой частоты

В ZFC-эксперименте замораживаются изотропно направленные наночастицы. При температуре $T_b > 150$ К происходит разблокировка вращательных степеней свободы. Вслед за медленно вращающимися в двойном ПАВе наночастицами локальное поле на мюоне тоже вращается $H(t) = H + h(t)$.

За один полный оборот вектора магнитного поля спиновая функция приобретает фазу, пропорциональную телесному углу, который охватывает вектор (фаза Берри).

Эффекты геометрической фазы (фаза Берри) в нейтронной оптике подробно изложены в статье [3].

Список использованных источников

[1] S.I. Vorob'ev [и др.] Magnetochemistry, 7 (2021) 104.
[2] С.Г. Барсов [и др.] ПТЭ, 50(6) (2007) 36-42.
[3] В.И. Боднарчук [и др.] УФН 166(2) (1996) 185-194.

Сравнительный анализ элементного состава и структуры пленок TiN, полученных магнетронным напылением и атомно-слоевым осаждением

А. В. Горячев*, Н. В. Александров, Е. П. Кириленко, А.А. Дудин, и Г.А. Рудаков
ИНМЭ РАН, ул. Нагатинская, д. 16а, корп. 11, 115487 г. Москва, Россия,
**e-mail: goryachev.a@inme-ras.ru*

Плёнки нитрида титана широко используются в различных сферах производства, от защитных покрытий режущих инструментов до аэрокосмической и медицинской отраслей. В микроэлектронике их используют в качестве защитных, антиотражающих и антистатических покрытий, барьеров Шоттки и омических контактов к эпитаксиальным слоям p-GaN и контактных слоёв для солнечных элементов, а также в качестве диффузионных барьеров**,** препятствующих диффузии металла в кремний. Диффузионные свойства пленок TiN сильно зависят от их структуры и фазового состава, которые в свою очередь зависят от параметров нанесения пленки и структуры подложки, на которую происходит осаждение. В данной работе для количественного анализа методом электронной оже спектроскопии (ЭОС) использовались данные, полученные на эталонных образцах Ti, TiO_2, TiN, TiSi [1]. Это позволило определить состав границы раздела и диффузионные процессы в пленке TiN, полученной разными методами (рис. 1, 2, 3). Пленки TiN, полученные методом атомно-слоевого осаждения, аморфные**,** и диффузия кислорода с поверхности в таких пленках не наблюдается (рис. 4). Разница в структуре пленок подтверждена исследованиями на ПЭМ.

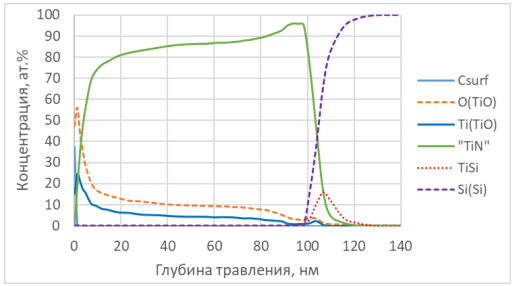


Рисунок 1. Распределение химических элементов по толщине пленки TiN на кремниевой подложке.

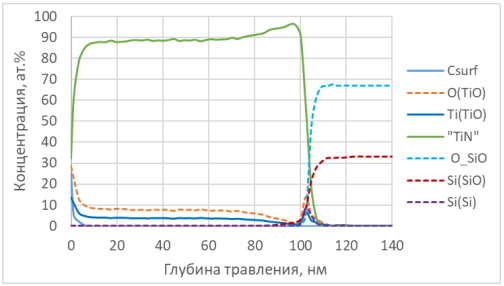


Рисунок 2. Распределение химических элементов по толщине пленки TiN на кремниевой подложке с подслоем SiO_2.

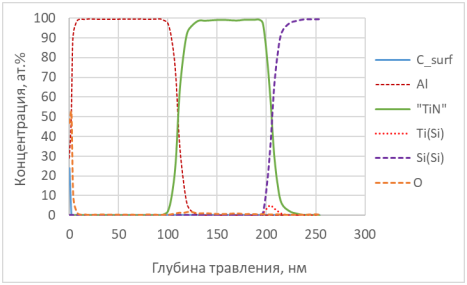


Рисунок 3. Распределение химических элементов по толщине пленки TiN,покрытой сверху слоем Al в едином процессе.

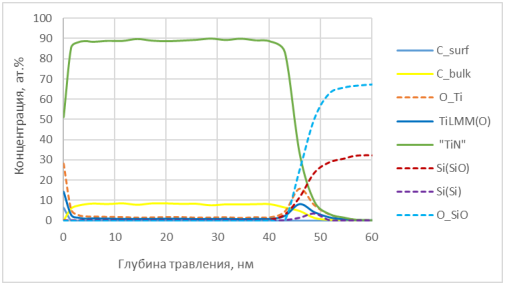


Рисунок 4. Распределение химических элементов по толщине пленки TiN, полученной методом АСО на кремниевой подложке с подслоем SiO_2.

Список цитируемой литературы:

[1] А.В. Горячев [и др.] Сб. тез. докл. XV конференции по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе «Кремний-2024». Иркутск, 15-20 июля 2024 г., с. 81.

Влияние режимов отжига на структуру и свойства индий-галлий-цинковых оксидов, допированных оловом

Г. М. Зирник[1], С. А. Гудкова[1]*, Е. А. Шрамков[1,2], Е.С. Ананников[1], Т.А. Маркин[1], и Д.А. Винник[1,3,4]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер. 9, 141701 г.Долгопрудный, Россия,
**e-mail: svetlanagudkova@yandex.ru*
[2]НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, 1, 123182 г. Москва, Россия
[3]Южно-уральский государственный университет (Научно-исследовательский университет), пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия
[4]Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Университетский пр. 2, 198504 г. Петергоф, Россия

Оксид индий-галий-цинка (IGZO) – перспективный материал для альтернативной электроники. Предполагается, что на основе данного материала возможно создавать полупроводниковые чернила для печати транзисторов на гибких подложках [1-3]. Однако, IGZO уступает кремнию по ряду характеристик, в том числе по числу собственных носителей заряда [4]. В данной работе проводилось замещение оловом IGZO с целью изучения процесса формирования сложного оксида и получения монофазы.

Методом золь-гель из нитратов индий, галлия, цинка и оксида олова были получены образцы порошков $In_{0.9}GaZn_{1.05}Sn_{0.05}O_4$. Далее последовательно проводился отжиг при температуре 500 °C, 700 °C, 900 °C, 1000 °C с изучением структуры методом рентгеновской дифракции на каждом этапе. Также изучалось валентное состояние ионов в системе IGZO методом рентгновской фотоэлектронной спектроскопии.

В результате исследования установлено, что до 500 °C включительно образцы аморфны, при температуре 700 °C образуется двухфазная система, где допированный IGZO составляет 92% и в качестве примесной фазы (8%) выступает ZnO. При температуре 900 °C образуется монофаза $In_{0.9}GaZn_{1.05}Sn_{0.05}O_4$. Последующее нагревание до 1000 °C приводит к образованию дополнительной фазы In_2O_3. Данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показывают, что валентное состояние олова в системе сохраняется и соответсвует положению линий Sn^{2+}. Следует также отметить, что ионы олова встраиваются в кристаллическую решетку IGZO и не образуют при нагревании дополнительных фаз.

Благодарность (финансирование)

Исследование выполнено при поддержке Российского фонда научных исследований (проект 24-19-00468).

Список использованных источников

[1] G.M. Zirnik [и др.] Rus. Met. 4 (2024) 1022–1027.
[2] Y. Xie [и др.] J. of El. Dev. Soc. 11 (2023) 717–725.
[3] Z.A. Luzanilla Meléndrez [и др.] Adv. Pow. and Cer. Mat.Sci. 24 (2023) 3–10.
[4] S.-J. Park [и др.] J. El. Dev. Lett. 44 (4) (2023) 642–645.

Светоизлучающие гетероструктуры с InAs квантовыми точками на кремнии

И. В. Илькив[1*], В. В. Лендяшова[2], и Г. Э. Цырлин[1-3]
*[1]Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб. д. 7/9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: fiskerr@gmail.com*
[2]Санкт-Петербургский Академический университет им. Ж.И. Алферова, ул. Хлопина, д. 8 к3, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия
[3]Институт аналитического приборостроения РАН, ул. Ивана Черных, д. 31-33, 198095 г. Санкт-Петербург, Россия

Создание интегральных схем на основе кремния и A3B5 материалов представляет значительный интерес поскольку может значительно снизить энергопотребление и повысить скорость вычислительных систем. Несмотря на достигнутые результаты, связанные с развитием технологии склеивания полупроводниковых пластин, монолитная интеграция путем прямого синтеза A3B5 гетероструктур на кремниевых подложках по-прежнему представляет высокий научный интерес. Следует отметить, что технология роста буферных слоев с достаточно низкой плотностью дислокаций и отсутствием антифазных доменов до сих пор представляет высокую технологическую сложность. В связи с этим является актуальным поиск новых подходов к синтезу гетероструктур, в том числе использование в активной области массивов самоорганизующихся квантовых точек (КТ). Кроме того, уникальные свойства КТ, связанные с релаксацией упругих напряжений, могут быть использованы и для создания принципиально нового типа полупроводниковых гетероструктур – монолитно внедренных в кремниевые матрицы КТ.

Настоящая работа посвящена исследованию подходов для синтеза методом молекулярно-пучковой эпитаксии светоизлучающих гетероструктур на основе InAs КТ и кремния. В первую очередь будут представлены результаты формированию наноостровков непосредственно на поверхности кремния, а затем с помощью двухстадийного заращивания кремнием продемонстрирована возможность создания гетероструктур с внедренными в кремний InAs КТ, демонстрирующих фотолюминесценцию в области 1,6 мкм. В другой части работы представлена возможность формирования субмикронных буфферных слоев GaAs на кремнии специальной конструкции для предотвращения возникновения пронизывающих дислокаций и антифазовых доменов, связанных с различными постоянными кристаллических решеток и коэффициентами термического расширения. На основе полученных слоев GaAs представлены p-i-n гетероструктуры с InAs КТ, демонстрирующие фотолюминесценцию в области 1,3 мкм вплоть до комнатной температуры.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке СПбГУ, шифр проекта 122040800254-4.

Наносекундное лазерное осаждение сверхтонких пленок золота

Д. А. Колосовский[1]*, Т. М. Залялов[2,3], С. А. Пономарев[2,3], Ю. Г. Шухов[1], А. А. Морозов[1], и С. В. Старинский[1,2]
[1]*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, д. 1, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: danil-ak@yandex.ru*
[2]*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, д.1, 630090 г. Новосибирск, Россия*
[3]*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, ул. Пирогова, д. 30, 630090 г. Новосибирск, Россия*

Сверхтонкие пленки золота толщиной менее 10 нм обладают высокой прозрачностью, электропроводностью и механической прочностью, что делает их перспективными для применения в качестве гибких прозрачных электродов в оптоэлектронных приборах. Однако их сплошное осаждение на различные подложки, такие как кварц, оксид и нитрид кремния, затруднено из-за слабого смачивания золота, что приводит к образованию островковой структуры на начальных этапах роста.

Процесс формирования металлической пленки проходит через несколько стадий: зарождение отдельных островков, их рост, последующее слияние, образование перколяционной сети и, наконец, формирование сплошной тонкой пленки. Для снижения порога перколяции традиционно используют смачивающие слои [1] или охлаждение подложки до криогенных температур [2]. Однако у этих подходов есть ограничения: смачивающие слои увеличивают оптические потери, а криогенное охлаждение может вызывать механические напряжения, что приводит к отслаиванию слоев и растрескиванию гетероструктур.

В данной работе показано, что метод наносекундного лазерного осаждения (PLD) позволяет получать сверхтонкие проводящие пленки золота при комнатной температуре без необходимости использования смачивающих слоев. Напыление проводилось в вакуумной камере при давлении 10 Па в атмосфере кислорода с использованием импульсного твердотельного Nd:YAG лазера (532 нм). Исследование морфологии пленок выполнялось методами атомно-силовой микроскопии и сканирующей электронной микроскопии. Электрические свойства оценивались путем измерения поверхностного сопротивления методом Ван дер Пау, а коэффициент пропускания определялся с помощью спектрофотометрии.

Полученные пленки имеют толщину 5 нм, средний коэффициент пропускания в видимом диапазоне составляет 72 %, а поверхностное сопротивление — 30 Ом/кв. Эти параметры сопоставимы с характеристиками пленок, осажденных с использованием смачивающих слоев или при криогенных температурах, а в ряде случаев даже превосходят их [3]. Сравнение показателя добротности между пленками, осажденными методом PLD, и аналогами из литературы подтверждает, что данный метод обеспечивает конкурентоспособные характеристики.

Таким образом, продемонстрирована перспективность метода PLD для получения сверхтонких пленок золота, что может значительно расширить возможности их применения в современных оптоэлектронных устройствах.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда , грант № 24-79-10070 (https://rscf.ru/project /24-79-10070 /).

Список использованных источников:

[1] D.I. Yakubovsky [и др.] Advanced Materials Interfaces 6 (2019) 1900196.
[2] R. Lemasters [и др.] ACS Photonics 6 (2019) 2600.
[3] D.A. Kolosovsky [и др.] Applied Surface Science 698 (2025) 163077.

Фотолюминесцентные свойства анодного оксида алюминия, синтезированного в органических и неорганических кислотах

Е. А. Константинова[1]*, Е. В. Кытина[1], и Ю.В. Назаркина[1,2]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, 119991 г. Москва, Россия,*
**e-mail: liza35@mail.ru*
[2]*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, д.1, 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия*

Пористый анодный оксид алюминия (ПАОА) представляет собор наноструктурированный материал с удельной поверхностью от единиц до десятков нанометров на грамм. Область его применения весьма широка, начиная с фотонных кристаллов, сенсоров на летучие соединения, нанокомпозитов на его основе, и заканчивая биосенсорами на биомаркеры [1, 2]. В настоящее время наибольший интерес представляют оптические биосенсоры, характеризующиеся высокой чувствительностью и быстродействием [2]. Поэтому целью данной работы было получение, исследование фотолюминесцентных свойств ПАОА и сравнительный анализ образцов, сформированных в различных органических и неорганических кислотах.

Для измерения спектров фотолюминесценции (ФЛ) использовалась микрорамановская установка Horiba Jobin Yvon HR800, настроенная на режим регистрации ФЛ. Источником возбуждения служил аргоновый лазер с длиной волны 488 нм. Пленки ПАОА получены путем анодирования алюминиевой фольги в электролитах на основе щавелевой, ОЭДФ, серной, селеновой кислот. Подробно условия синтеза изложены в [3].

ПАОА, полученный в неорганических кислотах, характеризовался крайне низкой интенсивностью ФЛ (на уровне фоновой линии). Краситель (родамин Б), нанесенный на эти образцы, люминесцирует в диапазоне 530-630 нм с максимумом ФЛ на 573 нм. Образцы характеризуются высокой чувствительностью к красителю: при уменьшении концентрации родамина до 10^{-7} Моль регистрируется достаточно интенсивная полоса ФЛ. ПАОА, синтезированный в органических кислотах характеризуется интенсивной ФЛ в диапазоне 400-800 нм. Максимум ФЛ ПАОА на основе щавелевой кислоты расположен на 460 нм, для образцов на основе ОЭДФ регистрируются две полосы ФЛ с максимумами при 460 нм и 610 нм. Интенсивность полосы ФЛ на 460 нм коррелирует с концентрацией кислородных вакансий, полученной с помощью метода электронного парамагнитного резонанса. Полоса ФЛ на 610 нм, вероятно, обусловлена излучательной рекомбинацией фотовозбужденных носителей заряда на непарамагнитных дефектах. Данные образцы также характеризуются высокой чувствительностью к красителю родамину Б.

Полученные данные могут быть использованы для создания оптических биосенсоров на основе ПАОА.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00402, https://rscf.ru/project/24-19-00402/.

Список использованных источников:
[1] C.-A. Ku [и др.] Nanomaterials. 13 (2023) 2853.
[2] A.K. Eessaa [и др.] Microelectron. Eng. 279 (2023) 112061.
[3] Y. Nazarkina [и др.] Electrochim. Acta. 231 (2017) 327.

Влияние температурных условий синтеза на свойства магнетронных пленок оксида галлия

Д. С. Королев*, Д. А. Сорокин, К. С. Матюнина, А. А. Никольская, Ю. А. Дудин, В. Н. Трушин, и Д. И. Тетельбаум
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, 23, 603022 г. Нижний Новгород, Россия, *email: dmkorolev@phys.unn.ru*

Оксид галлия на настоящий момент привлекает все больше внимания исследователей по причине наличия у него уникальных физических свойств, благодаря которым Ga_2O_3 рассматривается в качестве базового материала электроники нового поколения. Благодаря большой ширине запрещенной зоны (от 4.2 до 5.5 эВ в зависимости от полиморфной модификации) Ga_2O_3 имеет перспективы применения в устройствах силовой электроники и УФ-фотоники. Другим возможным применением данного материала может быть создание газовых сенсоров. Однако, оксид галлия пока не нашел широкого коммерческого применения в силу того, что монокристаллические подложки сложны и дороги в производстве, а тонкопленочные технологии находятся еще на начальной стадии и имеют множество нерешенных проблем. Перпективной технологией для создания оксида галлия может служить осаждение тонких пленок магнетронным методом на подложки сапфира. Однако, осаждение при низких температурах приводит к образованию аморфных пленок, применение которых в условиях необходимости контролируемого изменения свойств, например, путем легирования, существенно ограничено. В данной работе приводятся результаты исследования свойств магнетронных пленок Ga_2O_3, осажденных на подложки сапфира при повышенных температурах, а также для пленок, подвергнутых дополнительному отжигу.

Магнетронное напыление пленок Ga_2O_3 производилось на модернизированной вакуумной установке УВМ – 2М. Использовались подложки сапфира *c*-среза, предварительно отожжённые при 1100 °С, мишень – спеченный порошок Ga_2O_3 (99.999 %). Толщина пленок по данным эллипсометрии составила ~120 нм.

Исследование методом рентгеновской дифракции структуры пленок, осажденных при комнатной температуре, выявило их аморфное состояние. Последующий отжиг пленок при температуре 900 °С приводит к частичной кристаллизации, тогда как после отжига при 1000 и 1100 °С пленки по своей структуре оказываются близки к монокристаллическим. Однако, такой отжиг приводит к увеличению ширины запрещенной зоны, определяемой по краю оптического поглощения, что может быть связано с диффузией алюминия из подложки и образованию соединения $Al_xGa_{2-x}O_3$, для которого характерен рост значения ширины запрещенной зоны с увеличением содержания алюминия. Исследование структуры пленок Ga_2O_3, осажденных при повышенных температурах, показало, что при температуре подложки 600 °С пленки аморфные, при 700 °С содержат как аморфную, так и кристаллическую фазу, а при 800 °С их структура близка к монокристаллической, причем более совершенной по сравнению с отожженной при 1100 °С пленкой, нанесенной при комнатной температуре. Изучение спектров оптического поглощения выявило, что в случае напыления при повышенных температурах значение ширины запрещенной зоны практически не изменяется относительно пленок, нанесенных при комнатной температуре. Это косвенно свидетельствует о том, что диффузия алюминия в пленки в данном режиме не происходит.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-00052, https://rscf.ru/project/23-79-00052/.

Исследование свойств углеродных слоев, полученных методом импульсного лазерного нанесения

А. С. Кравченко[1]*, О. В. Вихрова[2], Ю. А. Данилов[1,2], Р. Н. Крюков[1,2], В. П. Лесников[2], и А. В. Нежданов[1]
*[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, 23, 603022 г. Нижний Новгород, Россия,*e-mail: alina272002@mail.ru*
[2]Научно-исследовательский физико-технический институт ННГУ им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, 23, корп.3, 603950 г. Нижний Новгород, Россия

Углеродные материалы, особенно графеновые слои, перспективны для современной электроники благодаря своим уникальным физическим и химическим характеристикам. В данной работе для получения углеродных слоев используется метод импульсного лазерного нанесения (ИЛН) в вакууме. Излучение АИГ:Nd лазера (марки LQ 529A, производство ЗАО СолярЛС, Минск, Респ. Беларусь) с длиной волны 532 нм, длительностью импульса 10 нс, энергией импульса 250 мДж и частотой повторения 10 Гц вводится в вакуумную камеру и фокусируется на пластине пирографита. Давление в камере составляло ~ 10^{-6} Торр. Распыленный поток атомов углерода направляется на подложку, расположенную от мишени на расстоянии 5–7 см. Температура подложки варьировалась от 200 до 550°C. Углеродные слои наносились на монокристаллические подложки Si, Ge или GaAs, а также на структуры SiO_2/Si. Для анализа свойств углеродных слоев использованы методы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и комбинационного рассеяния света (КРС).

Спектры КРС углеродных слоев, нанесенных при низких температурах (200–300°C), соответствуют аморфному углероду. Оптимальной с технологической точки зрения является температура нанесения 500 °C. Для углеродных слоев, нанесенных при этой температуре, помимо ярко выраженных фононных линий, связанных с полупроводниковой подложкой, наблюдается ряд пиков, соответствующих многослойному графену. При ~1600 $см^{-1}$ фиксируется пик G, характерный для графитоподобных материалов с sp^2 связями между атомами углерода, а также пик D, который указывает на наличие дефектов в графеновой структуре. Также присутствуют линии 2D, представляющие обертон D, и D+D', типичные для графеновых слоев. Оценка параметров выращенных графеноподобных С-слоев по методике [1] дает число слоев графена ~5, а размер зерна графена - приблизительно 7 нм. Результаты РФЭС подтверждают значительное (до 10 раз) преобладание sp^2-связей над sp^3 в углеродном слое; других элементов, кроме углерода и незначительных количеств кислорода, не обнаруживается в пределах чувствительности данного метода.

Возможность нанесения графеноподобных С-слоев непосредственно на поверхность полупроводниковых структур (включая материалы с невысокой термической стойкостью типа A^3B^5) является значительным преимуществом метода импульсного лазерного нанесения по сравнению, например, с методами типа CVD или с предварительным нанесением С-слоев на металлические каталитические подложки типа Cu или Ni. Также нами продемонстрирована возможность легирования С-слоев разнообразными примесями (в частности, Fe, Co) в процессе нанесения и создания слоистых металл/углеродных структур.

Благодарность (финансирование). Работа была выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования РФ (госзадание FSWR-2023-0052).

Список использованных источников:

[1] A.C. Ferrari. Solid State Communications. 143 (2007) 47

Исследование влияния параметров гидротермального синтеза на морфологию нанонитей меди

М. Д. Кружалина[1]*, А. М. Тарасов[1], К. И. Пак[1], Р. М. Рязанов[1,2], С. В. Дубков[1], и Д. Г. Громов[1]
[1]*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия, *e-mail: kruzalina43@gmail.com*
[2]*НПК «Технологический центр», 124498 г.Зеленоград, г. Москва, Россия*

Наноразмерные материалы, благодаря размерным и поверхностным эффектам, представляют большой интерес для науки и техники. В частности, наночастицы меди демонстрируют плазмонные свойства, делая ее привлекательной альтернативой более дорогим золоту и серебру [1], что позволит создавать эффективные, но более дешевые ГКР-структуры для обнаружения веществ в сверхмалых концентрациях. Важным фактором является влияние размера нанообъектов на их свойства, особенно на удельную поверхность, проводимость и электрические характеристики. Особое внимание уделяется одномерным (1d-) структурам, сочетающим достоинства 0d- и 2d-объектов. В сравнении с наночастицами, нанонити обладают высоким соотношением сторон, что способствует эффективному поглощению излучения, снижению рекомбинации носителей заряда и их бездиффузионному переносу вдоль оси монокристалла. Широко распространенным методом для получения одномерных наноструктур является гидротермальный синтез, позволяющий контролировать морфологию и состав формируемых нанообъектов, но отличающийся при этом простотой, низкими энергозатратами и себестоимостью.

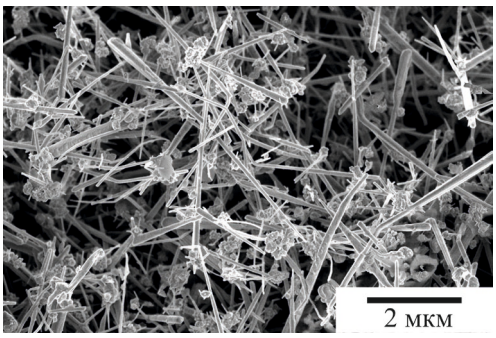


Рисунок 1. РЭМ-изображение нанопроволок меди

В данной работе предложен гидротермальный метод синтеза нанонитей Cu с использованием декстрозы и этилендиамина (ЭДА). Исследовано влияние концентраций декстрозы (3,7–14,8 г) и ЭДА (0,6–2,4 мл) на морфологию получаемых структур, а также зависимость морфологии от времени синтеза. Диаметр полученных нанонитей колеблется в диапазоне 150–700 нм, а длина составляет 3,5–5 мкм (рис. 1). Рентгенофазовый анализ демонстрирует наличие характерных пиков для Cu и отсутствие пиков, соответствующих фазе оксида меди. Повторное исследование спустя две недели не выявило каких-либо изменений в фазовом составе нанонитей, что показывает стабильность полученных структур.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена в рамках государственного задания 2024-2026 FSMR-2024-0012

Список использованных источников:
[1] B. Pramanick [и др.] Applied Surface Science 682 (2025) 161640

Сравнительный анализ спиновых центров в пористом оксиде алюминия, сформированном в органических и неорганических кислотах

Е. В. Кытина*
*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д. 1, 119991 г.Москва, Россия, *e-mail: kata13012002@mail.ru*

Интерес к наноструктрированным объектам растет с каждым годом благодаря их уникальным физико-химическим свойствам, среди которых можно выделить большую удельную поверхность, варьирующуюся от единиц до сотен квадратных метров на грамм вещества в зависимости от типа материала и условий синтеза. Одним из перспективных представителей данного класса веществ является пористый анодный оксид алюминия (ПАОА), представляющий собой массив упорядоченных пор с диаметром в диапазоне от единиц до нескольких десятков нанометров. Его можно использовать, например, в качестве фотонных кристаллов, датчиков влажности, катодов для органических светодиодов, а также для создания нанокомпозитов, контейнеров и шаблонов для различных материалов, биосенсоров на онкомаркеры или другие биологические вещества [1]. В настоящее время особенно актуально создание на его основе биосенсоров на биомаркеры в связи с постоянным ростом заболеваний различного характера во всем мире. Спиновые центры (дефекты) играют важную в фотоэлектронных процессах в ПАОА. Важно знать их природу и концентрацию. Поэтому целью данной работы была диагностика дефектов в ПАОА, определение их основных характеристик и сравнительный анализ образцов, сформированных в органических и неорганических кислотах.

Исследования спиновых центров методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) выполнены в лаборатории ЭПР-спектроскопии ЦКП Физического факультета МГУ на уникальном оборудовании ELEXSYS-E500-10/12. Концентрацию парамагнитных центров оценивали, используя в качестве эталона монокристалл $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ с известным числом спинов. Пленки ПАОА получены путем анодирования алюминиевой фольги в электролитах на основе щавелевой, ОЭДФ и серной, селеновой кислот. Подробно условия синтеза изложены в [2]. Отметим только, что все образцы получены при 5 ^{0}C и плотности тока 15 мА/см^2.

Основным типом спиновых центров в ПАОА, вне зависимости от типа электролита, являются F^+ центры (кислородные вакансии). Их концентрация составляла порядка 10^{15} г$^{-1}$ в образцах, полученных в селеновой и серной кислотах, и увеличивалась до порядка 10^{16} г$^{-1}$ и 10^{17} г$^{-1}$ в ПАОА, сформированном в электролитах на основе ОЭДФ и щавелевой кислот, соответственно. Кроме того, в ПАОА, полученном в селеновой кислоте, наблюдается дефекты с неспаренным электроном, локализованном на кислородном атоме. Их концентрация была $5 \cdot 10^{16}$ г$^{-1}$. Установлено путем частичного стравливания поверхностного слоя образцов, что данные спиновые центры находятся преимущественно на поверхности. Существенное увеличение значения концентрации в ПАОА, сформированном в органических кислотах, может быть обусловлено ростом разупорядоченности приповерхностного слоя образцов. Результаты исследования могут быть полезны при разработке оптических сенсорных платформ на основе ПАОА.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00402, https://rscf.ru/project/24-19-00402/.

Список использованных источников:
[1] G. Rajeev [и др.] Adv. Health Mater. 7(5) (2018) 1700904.
[2] Y. Nazarkina [и др.] Electrochim. Acta 231 (2017) 327.

Интеркаляция фуллеренов в слоистые структуры сульфированного оксида графена

В.Т. Лебедев[1]*, А.В.Швидченко[2], Б.Б.Тудупова[2], В.И.Куулдар[2]
[1]*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, НИЦ КИ «Курчатовский институт», Орлова роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия, *e-mail: lebedev_vt@pnpi.nrcki.ru*
[2]*Иоффе институт, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д.26, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия*

Синтезированы и изучены методами ИК, рамановской и оптической спектроскопии поглощения гетероструктры фуллеренов С60 и оксида графена (GO) - новые мембранные материалы для первапорации смесей жидкостей, работы водородных топливных ячеек, выделения тяжелых металлов (нуклидов) из отходов ядерной энергетики. Наноматериалы в виде скрепленных гидрофобными фуллеренами (размер ~ 1 нм) листов GO способны в водных средах селективно фильтровать молекулы и ионы при регулировке зазоров между листами выбором пропорций компонент сборок и задании химических свойств GO привитыми функциональными группами (OH, COOH, SO3H и др.). Основной компонентой композитов служит оксид графена с привитыми SO3H группами посредством использования сульфониловой кислотой [1]. Данный материал совместим с мембранными полимерами типа Nafion и Aquivion, у которых протонная проводимость повышается на десятки процентов при легировании наноалмазами (≤ 1 % масс.) [2]. Не меньший эффект ожидаем для композитов SGO+C60, но при концентрациях на два порядка ниже, когда тонкие сборки микронных размеров перекрываются в полимерной матрице, создавая каналы миграции протонов. Композиты готовили, разбавляя водные SGO дисперсии изопропиловым спиртом и смешивая с раствором С60 в ксилоле в поле ультразвука до связывания компонент (образования хлопьев) в пропорциях, контролируемых по оптической плотности систем, затем дисперсию высушивали, остаток растворяли в деионизованной воде, получая коллоид с массовой пропорций C_{SGO}:C60 = 4.3:1. С помощью диметилсульфоксида в качестве межфазного катализатора, авторы формировали композиты SGO+C60 с предельной долей фуллеренов, C_{SGO}:C60 = 1:1.6, заполнивших ~50 % объема зазоров между листами. Для сравнения получен композит SGO и водорастворимого фуллеренола C60(OH)x (x ~ 30) с пропорцией SGO:C60(OH)x = (1:2.6) и спектром оптического поглощения с пиком (~340 нм), характерным для С60, т.е. при образовании композита молекулы C60(OH)x восстановились до фуллеренов, что наблюдалось впервые. Результаты и развитая методология получения гетероструктур фуллеренов с оксидом графена позволят конструировать новые эффективные ионообменные мембраны в комбинации с иономерами для химических источников энергии и других приложений.

Благодарность (финансирование)

Работа поддержана РНФ (грант № 25-73-20031).

Список использованных источников:

[1] F.Fang [и др.] International Journal of Hydrogen Energy 46 (34) (2021) 17784–17792.
[2] V.T. Lebedev [и др.] Journal of Membrane Science Letters. 4 (1) (2024) 100070.

Nanostructured PMMA/Fe3O4 composite fibers obtained by electrospinning

A. Lesbayev*, D. Akalim, D. Yerezhep
*Institute of Energy and Mechanical Engineering, Satbayev University, 050040 Almaty, Kazakhstan, *e-mail: darhan_13@physics.kz*

Materials science research groups are actively exploring nanomaterials with improved properties compared to their individual components. In both basic and applied research, shielding materials incorporating nanostructures are particularly popular, leading to their widespread popularity in various sectors such as medicine, pharmaceuticals, electronics and beyond. This research uses electrospinning to incorporate magnetic nanoparticles with superparamagnetic properties into polymer fiber structures, thereby opening the way to new opportunities in the development of materials that protect against electromagnetic radiation. A solution containing 7% (by weight) polymethyl methacrylate (PMMA) in dichloroethane will serve as the fiber forming material. Superparamagnetic Fe3O4 magnetite nanoparticles were synthesized by chemical condensation with an optimal ratio of two aqueous solutions of iron salts. Iron sulfate FeSO4·7H2O, iron trichloride FeCl3·6H2O and a 25% aqueous solution of ammonia NH4OH·H2O were used as initial reagents. Research will focus on studying ultrathin PMMA/Fe3O4 composite fibers obtained from synthesized magnetite nanoparticles. This research will entail studying the crystal structure, phase composition and physicochemical properties of magnetic fillers. The analysis will be carried out using SEM, TEM, XRD and EDAX imaging techniques and screening factors will be determined. It is assumed that the electrospinning method will make it possible to obtain composite fibers with a diameter of 5-10 μm. Fibers with magnetite nanoparticles added will make it possible to produce a flexible shielding material.

Acknowledgement

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No AP19679690).

Разработка и развитие методик рентген-флуоресцентного анализа с использованием радиоизотопного источника для исследования элементного состава наноструктурных образцов

Лю Дэжуй[1,2]*, Д.А. Румянцева[1]
[1]*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, НИЦ «Курчатовский институт», мкр. Орлова роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия, *e-mail: 1034056141@qq.com*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб., д. 7–9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*

Основное направление исследования было связано с повышением разрешающей способности методики РФА и снижением порога обнаружения элементов при сохранении точности определения элементного состава сложных образцов. Спектрометр РФА с радиоизотопным источником на базе ^{109}Cd обладает рядом преимуществ по сравнению со спектрометрами, использующими рентгеновские трубки. Источник, отличаясь своей стабильностью, надежностью и портативностью, обеспечивает выход излучения порядка 10^7 - 10^8 квант/с и выше, достаточный для решения широкого круга аналитических задач. Для регистрации вторичного излучения используется HPGe детектор с рабочей площадью 30 мм^2, его энергетическое разрешение – 200 эВ по Kα излучению Fe с энергией 6,4 кэВ.

При определении содержания элементов использовался прямой способ внешнего стандарта, связывающий концентрацию с интенсивностью характеристического рентгеновского излучения. Повышение чувствительности этого метода связано с учетом поправок на поглощение [1].

Экспериментальное определение содержания 3d-металлов и лантаноидов в эндофуллеренах, наноалмазах, наноструктурных образцах на основе оксида меди используется для контроля технологии их синтеза. Применение РФА для элементного анализа техногенных и геологических образцов имеет традиционный характер, но остается актуальным из-за большого разнообразия образцов [2].

Так, например, при анализе примесных элементов в образцах наноалмазов обнаружено содержание Ni с концентрацией от 0.08 до 0.51 %масс, Cu – от 0.03 до 0.15 %масс, Zr – 0.0014 %масс, Eu – от 0.004 до 0.008 %масс с относительными погрешностями, не превышающими 10 %.

В растворе метеоритного вещества обнаружено 33.2±0.04 %масс железа, кобальта – 0.50±0.02 %масс, никеля – 0.29±0.01 %масс и хрома 0.010±0.003 %масс, что позволяет его отнести к типу «железных» метеоритов.

Анализ содержания железа в различных биологических образцах изменяется от 0.042 до 0.165 %масс с относительной погрешностью не хуже 3 %, что отражает различную поглощающую способность микроорганизмов и позволяет выделить наиболее эффективную в данном направлении биологическую культуру.

В результате работы показана успешная применимость метода РФА с радиоизотопным источником для определения элементного состава разнообразных образцов. Главными факторами, влияющими на результат, являлись изготовление образцов сравнения и обработка спектров вторичного излучения.

Список использованных источников:

[1] Н.Г.Черноруков [и др.] Теория и практика рентгенофлуоресцентного анализа. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (2012) 57.
[2] V.T. Lebedev [и др.] Structuring of Endofullerenols with Lanthanides in Aqueous Solutions. In: Emerging Sustainable Nanomaterials for Biomedical Applications. Springer (2024) 89.

Электрохимическое формирование наноструктур германия для планарного литий-ионного аккумулятора

И. С. Маринкин[1] и И. М. Гаврилин[1].
[1]*Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, д. 1, 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия,*
**e-mail: mr.vanya678@mail.ru*

В современном мире носимая электроника и микросистемная техника становятся все более распространенными, и их эффективная работа напрямую зависит от энергоснабжения. В этом контексте миниатюрные источники питания играют решающую роль, предоставляя портативным устройствам необходимую энергию. Одной из актуальных задач является разработка процесса формирования планарного аккумулятора. На данный момент наиболее распространенным методом изготовления таких аккумуляторов является метод печати. Несмотря на множество положительных аспектов, он имеет значительные ограничения, например, небольшое количество сопел и необходимость смены чернил при смене функциональных слоев. Эти факторы создают технические и экономические проблемы при производстве. Решением данной проблемы является применение электрохимического осаждения рабочего материала электрода аккумулятора.

В данной работе предлагается метод формирования наноструктур германия в качестве отрицательного электрода планарного литий-ионного аккумулятора электрохимическим осаждением. Такой метод обеспечивает простоту реализации, воспроизводимость, контроль морфологии получаемой структуры и возможность далнейшего масштабирования производства.

Для формирования нанонитей германия использовали метод электрохимического осаждения в терхэлектродной ячейке. Осаждение проводилось на пластины ситалла марки СТ-50 с нанесенным методом магнетронного распыления хромом в качестве проводящего слоя. Далее лазерной гравировкой формировали встречно-штырьевую топологию будущего аккумулятора.

Электрохимическое осаждение проводилось только на одной половине положки. Для начала на поверхность подложки были нанаесены массивы наночастиц индия, служащие катализатором роста нанонитей германия. Электрохимическое осаждение германия и индия проводили в трехэлектродной ячейке. Осаждение германия проводилось в растворе электролита, содержащего диоксид германия (IV) GeO_2. Процесс осаждения проводили при различных температурах, плотностях тока и топологии подложки.

По результатам экспериментов установлены зависимости параметров осаждения от полученной морфологии структур, что дает возможность определить оптимальные параметры электрохимического осаждения нанонитей германия на ситалловую подложку со встречно-штырьевой конфигурацией.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена в НИУ МИЭТ в рамках государственного задания 2023-2025 гг. соглашение FSMR-2023-0003.

Исследование наночастиц Pd и Ag/Pd полученных путем восстановления из солей металлов

В. А. Матвеев[1]* и Н. Н. Губанова[1,2]
[1] *Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Орлова Роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия,*
**e-mail: matveev_va@pnpi.nrcki.ru*
[2] *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН), ул. Тифлисская ул., 3/6, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия*

Металлические наночастицы находят широкое применение в технологиях сенсоров, устройств энергонезависимой памяти, биологических технологиях, электрокатализе и топливных ячейках [1-3]. Свойства таких наночастиц могут заметно отличаться от свойств объемных материалов, что обусловлено, по крайней мере частично, большей площадью удельной поверхности. Атомы и группы атомов, находящиеся на поверхности наночастиц, зачастую выступают как активные центры, на которые хорошо адсорбируются молекулы или ионы, и играют определяющую роль в катализе химических реакций [4]. Получение металлических частиц возможно различными методами, но метод химического восстановления из солей металлов наиболее интересен с технологической точки зрения благодаря своей простоте и малым требуемым затратам.

В данной работе представлены результаты исследования наночастиц Pd и Ag/Pd полученнных путем восстановления из солей металлов различными типами восстановителей. Исследование получаемых наночастиц проводилось с помощью методов рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии и спектроскопии динамического рассеяния света, а также методом сканирующей электронной микроскопии.

Результаты рентгеновской дифракции показали, что получаемые наночастицы Pd и Ag/Pd состоят из кристаллитов металлов характеризующихся ГЦК структурой. Размеры кристаллитов Pd составляют 7-30 нм, а размер кристаллитов Ag зависит от типа восстановителя, и варьируется в диапазоне от 15 до 100 нм. На дифрактограммах некоторых образцов наночастиц Pd наблюдалось возникновение дополнительных брэгговских максимумов соответствующих фазе PdH. Мы предполагаем, что образующиеся при определенных условиях в растворе наночастицы Pd катализируют разложение избытка восстановителя с образованием молекул водорода и азота, и часть образующегося водорода включается в структуру решетки палладия. Результаты ИК-спектроскопии свидетельствуют о наличии в частицах Ag/Pd оксидных и/или гидроксильных фаз групп.

В качестве дополнения в работе была получена оценка электрохимически активной площади поверхности материалов созданных на основе наночастиц Pd и Ag/Pd. Величины площади электрохимической активной поверхности полученных материалов лежат в широком диапазоне значений от 1 до 37 м^2/г.

Список использованных источников

[1] П. А. Николайчук. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 14 (2022) 688–698.
[2] J. Cookson. Platin. Met. Rev. 56 (2021) 83–89
[3] В. В. Волков [и др.] Успехи химии. 82 (2013) 465-482
[4] A. Z. Moshfegh. Journal of Physics D: App. Phys. 42 (2009) 233001
[5] N. Firdous [и др.] J. Hydrogen Energy 45 (2020) 21573–21587

Определение влияния температуры роста на концентрации дефектов в слоях GaN методами фотолюминесцентной спектроскопии

И. В. Осинных[1, 2*], Т. В. Малин[1], Д. С. Милахин[1,3], Д. Ю. Протасов[1], К. С. Журавлёв[1]
[1]*Институт физики полупроводников имени Ржанова СО РАН, пр. Лаврентьева, 13, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: igor-osinnykh@isp.nsc.ru*
[2]*Новосибирский государственный университет, ул Пирогова 1, 630090 г. Новосибирск, Россия*
[3]*Новосибирский государственный технический университет, пр. Карла Маркса, 20, 630073 г. Новосибирск, Россия*

На рынке сверхвысокочастотной (СВЧ) электроники растёт доля транзисторов с высокой подвижностью электронов (HEMT), созданных на основе III-нитридных (AlGaN/GaN) гетероструктур с двумерным электронным газом (2DEG). По сравнению с такими традиционными материалами как Si и GaAs III-нитриды характеризуются большой шириной запрещённой зоны E_g, что позволяет достигать высоких значений рабочих и пробивных напряжений в устройствах, а также спонтанной и пьезоэлектрической поляризациями, которые в свою очередь обеспечивают высокую концентрацию 2DEG возле гетерограницы n_e>10^{13} см$^{-2}$. Однако эпитаксиальный рост III-нитридных структур сопряжен с образованием точечных дефектов, включая примеси, деформационный потенциал которых приводит к нарушению периодичности пьезоэлектрического заряда в гетероструктурах и к рассеянию 2DEG. Управление содержанием фоновых примесей путем изменения ростовых условий, в частности температуры роста, является одним из способов снижения дефектности слоёв GaN и улучшения электрофизических параметров 2DEG. Фотолюминесцентная (ФЛ) спектроскопия - бесконтактный быстрый неразрушающий метод снятия характеристик таких гетероструктур. В данной работе исследовано влияние температуры роста на ФЛ слоев GaN, выращенных методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложках Al_2O_3, Si(111) и SiC в диапазоне температур 775–825°C.

Для возбуждения ФЛ использовались 4 гармоника Nd:YAG лазера (λ_{las}=266 нм, максимальная выходная мощность P_{out}~50 мВт) при измерении стационарной ФЛ и азотный лазер при измерении нестационарной ФЛ (λ_{las}=337 нм, длина импульсов t=7 нс, частота повторений f=1 кГц) при комнатной температуре. В спектрах ФЛ слоев GaN доминируют две полосы: УФ полоса краевой ФЛ и желтая полоса, обусловленная донорно-акцепторной рекомбинацией, с энергетическим положением около 3.4 эВ и 2.2 эВ, соответственно. По зависимостям интенсивности УФ и желтой полосы ФЛ от плотности мощности возбуждения оценена концентрация акцепторов в слоях GaN. На основе решения системы кинетических уравнений построены расчетные зависимости интенсивности полос ФЛ от плотности мощности возбуждения. Оценена концентрация нейтральных доноров в слоях GaN из кинетики затухания желтой полосы ФЛ. Из уравнения электронейтральности оценена концентрация центров безызлучательной рекомбинации. Слои GaN, выращенные при температуре роста 775 °C на всех типах подложек, характеризуются самой высокой концентрацией акцепторов, нейтральных доноров, центров безызлучательной рекомбинации. Повышение температуры роста приводит к снижению концентрации дефектов. Наименьшая концентрация нейтральных доноров и акцепторов получена для слоев GaN, выращенных при температуре около 825 °C, однако наименьшие значения концентрации центров безызлучательной рекомбинации получены при температуре роста около 800 °C.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия GaN гетероструктур на подложках кремния для силовых и СВЧ транзисторов» (код FWGW-2025-0025).

III-V полупроводниковые наноструктуры переменной размерности на поверхности кремния

Р. Р. Резник[1-3]*, К. П. Котляр[1-3], А. И. Хребтов[1,2], И. В. Илькив[1-3], В.О. Гридчин[1-3], Н. В. Крыжановская[4], D. Barretin[5], и Г. Э. Цырлин[1-3]

*[1] Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб, д. 7-9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: r.reznik@spbu.ru*

[2] СПбАУ им. Ж.И. Алфёрова, ул. Хлопина, д. 8/3, 194021 г. Санкт-Петербург, Россия

[3]ИАП РАН, ул. Ивана Черных, д. 31-33, 198095 г. Санкт-Петербург, Россия

[4]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», ул. Союза Печатников, д. 16, 190121 г. Санкт-Петербург, Россия

[5]Department of Electronic Engineering, Università degli Studi Niccolò Cusano - Telematica, 3 Via Don Carlo Gnocci, 00166 Rome, Italy

Прямозонные наноструктуры на основе соединений III-V являются одинм из наиболее перспектективных материалов для создания полупроводниковых приложений благодаря своим уникальным оптоэлектронным, транспортным, электрофизическим и другим свойствам [1]. В настоящее время особое внимание исследователей привлекают полупроводниковые наноструктуры переменной размерности, такие как квантовые точки (КТ) в теле нитевидных нанокриталлов (ННК) [2]. Благодаря эффективной релаксации механических напряжений на боковых гранях ННК такие гибридные наноструктуры могут быть синтезированы непосредственно на поверхности кремния. Более того, ННК с КТ может быть отделён от поверхнсоти подложки и перенесён на другую поверхность, например, твердотельный оптический волновод для создания фотонных интегральных схем.

В данной работе представлены результаты экспериментльаных исследований по синтезу методом молекулярно-пучковой эпитаксии и исследованию физических свойств КТ в теле ННК на основе III-V соединений в широком диапазоне составов и исследований их физических свойств для приложений нового поколения. Типичное ПЭМ изрбражение ННК с КТ в системе материалов GaAs/AlGaAs приведено на рисунке 1. Было проказано, что синтезированные наноструктуры являются источниками одиночных фотонов в широком диапазоне длин волн. Полученные результаты открывают новые перспективы для развития полупроводниковй элементной базы нового поколения.

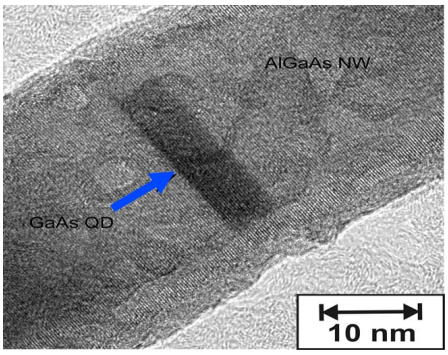


Рисунок 1. Типичное ПЭМ изображение GaAs КТ в одиночном AlGaAs ННК

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке СПбГУ, шифр проекта 122040800254-4.

Список использованных источников:

[1] В. Г. Дубровский [и др.] ФТП 12 (2009) 1585-1629.

[2] L. Leandro [и др.] Nano Letters 18 (2018) 7217–7221.

Магнитооптические исследования тонких оксидных пленок: новые перспективы

Ю. Э. Самошкина*
*Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Академгородок, 50, стр. 38, 660036 г. Красноярск, Россия, *e-mail: uliag@iph.krasn.ru*

Полупроводниковые материалы на основе оксидов $Ln^{3+}MnO_3$, а также ZnO, TiO_2 и т.д., считаются потенциальными кандидатами для спинтроники. Ключевой задачей является изучение магнитных и электронных подсистем в этих материалах для лучшего понимания механизмов их формирования. В этом отношении ценным источником информации является спектроскопия магнитного кругового дихроизма (МКД) в видимом диапазоне. Сам эффект наблюдается в проходящем свете, а его сигнал *прямо пропорционален действительной части недиагональной компоненты тензора диэлектрической проницаемости* ($\theta_{MCD} \sim \varepsilon'_{xy}$) *[1]*.

Результаты исследования МКД пленок манганита $Ln_{1-x}R^{1+}_xMnO_3$ и $Ln_{1-x}R^{2+}_xMnO_3$ показали, что спектральная форма сигнала не зависит от толщины, состава или морфологии материалов, что указывает на общий характер их электронной структуры [2]. Была выявлена единая картина основных и возбужденных электронных состояний, наблюдаемых в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне. Более того, впервые для пленок манганита было установлено, что поведение МКД отражает не только электронные и магнитные состояния материала, но также и зарядовые. Характерный магнитооптический отклик был обнаружен при переходе материала в проводящее состояние. Примечательно, что даже формы высокочувствительных спектров XANES (X-ray absorbtion near-edge structure) не имеют существенной разницы между металлическим и диэлектрическим состоянием манганита [3]. Специфическое МКД поведение было прослежено для моновалетно- и двухвалентно-легированных пленок различного состава, морфологии и толщины. Это говорит о том, что изменения в зонной структуре материала могут быть изучены с помощью МКД спектроскопии. Сходство низкотемпературного поведения оптических и магнитооптических спектров составов $Ln_{1-x}(R^{1+}/R^{2+})_xMnO_3$ и $La_{1-x}MnO_{3-\delta}$ указывает на универсальность механизмов, управляющих физическими свойствами данных оксидов. Полученные данные расширяют понимание зонной структуры манганитов в целом, обеспечивая прочную основу для ее теоретического описания.

Установлено, что спектроскопия МКД также отражает изменение в зонной структуре разбавленных оксидов на основе ZnO и TiO_2. Была выявлена связь между формой МКД спектра и различными состояниями поляризации носителей заряда в образцах. Экситонная поляризация характеризуется отрицательным сигналом МКД вблизи края запрещенной зоны оксида, в то время как положительный сигнал МКД вблизи края запрещенной зоны отражает низкоспиновую электронную поляризацию. Высокоспиновое состояние электронов характеризуется положительным сигналом МКД в видимой области спектра. Более того, только в этом состоянии образцы проявляют ферромагнитное поведение. На основе проведенных исследований, также было показано, что спектроскопия МКД может служить инструментом для обнаружения наночастиц металлов в матрицах твердых растворов на основе ZnO и TiO_2. Такой подход является качественной альтернативой рентгеновской абсорбционной спектроскопии с использованием синхротронного излучения.

Список использованных источников:
[1] G.B. Scott [и др.] Phys. Rev. B 12 (1975) 2562.
[2] Yu. Samoshkina [и др.] J. Phys.: Condens. Matter 36 (2024) 475701.
[3] G. Subías [и др.] Phys. Rev. B 58 (1998) 9287.

Особенности воздействия пучка низкоэнергетических ионов кислорода на тонкие пленки металлов

Серокурова А.И.[1]*, Новицкий Н.Н.[1], Шарко С.А.[1], Кецко В.А.[2]
[1]*Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, ул. П. Бровки, 19, 220072, Минск, Беларусь,*
[2]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, Ленинский просп., 31, Москва, 119991 Россия*
**e-mail: serokurova@physics.by*

Интерес к магнонным структурам и наличие новых возможностей, позволяющих создавать более сложные – трёхмерные структуры, обеспечивает приоритетный характер полученных результатов исследований, проведённых в работе.

Метод ионно-лучевого распыления металлических мишеней ионами кислорода широко используется для получения изотропных и анизотропных структур магноники на основе пленок железоиттриевого граната (ЖИГ) [1–5]. Особенностью ионно-лучевого метода является получение высокооднородных металлических пленок с плоскопараллельными интерфейсными границами независимо от химической природы интерфейсной границы. Практическая значимость этой работы состоит в применении экранирующих свойств различных металлов для создания многослойных магнонных схем.

В работе исследованы сравнительные процессы распыления пленок металлов толщиной от 4 нм пучками ионов кислорода, энергия которых варьировалось от 200 до 1600 эВ, а плотность тока от 0,1 до 0,4 мА/см^2. Предложена феноменологическая модель, объясняющая полученные результаты исходя из разности масс и химической активности металлов. Обнаружена селективность процессов распыления пленок тяжелых металлов по отношению к пленкам легких металлов медленными ионами кислорода, что позволило разработать маски для глубокого анизотропного травления таких химически инертных материалов, как пленки феррит-гранатов. Данные структуры составляют основу магнонных кристаллов для формирования дискретных элементов средств современной микроэлетроники СВЧ диапазона частот.

Исследование выполнено за счет гранта БРФФИ № Т23РНФ-010 и Российского научного фонда №23-43-10004.

Список использованных источников

[1] L.V. Lutsev, V.A. Dubovoy, A.I. Stognij et al J. Appl. Phys. – 2020. – vol. 127. – pp. 183903.
[2]. С.Л. Высоцкий, Ю.В. Никулин, А.В. Кожевников et al// ЖТФ. – 2020. – т. 90. – Вып. 7. С. 1221–1226.
[3]. С.Л. Высоцкий, Ю.В. Хивинцев, В.К. Сахаров et al // ФТТ. – 2020. – Т. 62. – Вып. 9. – С. 1494–1498.
[4]. V. K. Sakharov, E. N. Beginin, Y. V. Khivintsev et al Appl. Phys. Lett. 117, 022403 (2020)
[5]. S.L. Vysotskii, A.V. Sadovnikov, G.M. Dudko *et al.* Appl. Phys. Lett. 117, 102403 (2020)

Нелинейная инерционная динамика намагниченности антиферромагнетиков

А. С. Титов[1]*, Н. В. Чукашев[1] и С. В. Титов[1,2]
[1]*Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, 141701 г. Долгопрудный, Российская Федерация, *e-mail: titov.as@phystech.edu*
[2] *Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Фрязинский филиал, пл. Введенского, 1, 141190 г. Фрязино, Российская Федерация*

Исследование свойств антиферромагнетиков (АФМ) имеет важное значение для развития современных направлений спинтроники [1]. Разработка сверхвысокочастотных магнитных устройств требует учета инерционности намагниченности [2], которая приводит к возникновению нутаций, накладывающихся на прецессию вектора намагниченности [2]. Как следствие, в ТГц области спектра наблюдается нутационный резонанс (НР). Экспериментально НР исследовался, например, в пленках NiFe, CoFeB [3]. В сильных переменных полях в области НР могут появиться дополнительные гармоники, наблюдаться эффект удвоения частоты и другие нелинейные эффекты [4]. Изучение сверхбыстрой нелинейной динамики намагниченности АФМ открывает новые перспективы для создания сверхвысокочастотных устройств, использующих магнитные материалы.

Структуру идеального АФМ можно представить в виде двух взаимопроникающих подрешеток ферромагнитного типа с противоположно направленными магнитными моментами [2]. Инерционная динамика намагниченностей подрешеток АФМ описывается системой связанных обменным взаимодействием инерционных уравнений Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ).

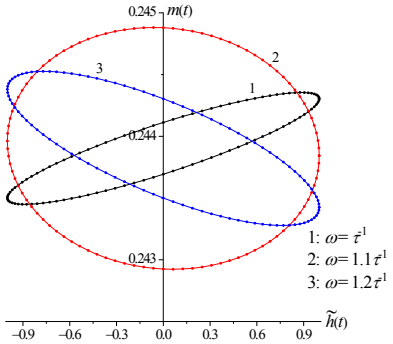


Рисунок 1. Динамический магнитный гистерезис для различных частот поля ω соответствующих области нутационного резонанса АФМ.

Решение инерционных уравнений ЛЛГ методом возмущений в приближении тождественности подрешеток позволило вывести аналитические выражения для поправок второго и третьего порядка к компонентам тензора линейной восприимчивости и рассчитать динамический магнитный гистерезис (рис. 1). Показано, что нелинейная восприимчивость и форма гистерезиса существенно зависят от величин постоянного и переменного полей. Ряд нелинейных эффектов, наблюдающихся в частотной области АФМ резонанса, воспроизводятся в области НР. Результаты могут быть использованы для практических приложений. Например, через оценку площади гистерезиса можно судить о степени разогрева магнитных наночастиц в сверхвысокочастотных полях.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00119, https://rscf.ru/project/25-22-00119/.

Список использованных источников:

[1] V. Baltz [и др.] Rev. Mod. Phys. 90 (2018) 015005.
[2] S.V. Titov [и др.] J. Appl. Phys. 135 (2024) 093903.
[3] K. Neeraj [и др.] Nat. Phys. 17 (2021) 245-250.
[4] S.V. Titov [и др.] AIP Advances 14 (2004) P.035216.

Влияние давления на морфологические параметры примесных скоплений Co в Si

Н.А. Тургунов[1]*, С.З. Зайнабидинов[2], Ш.К. Акбаров[2], и Ш.А. Собирова[1]
*[1]Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при НУУз, ул. Янги Алмазар, 20, г. Ташкент, Узбекистан, *e-mail: tna_1975@mail.ru*
[2]Андижанский государственный университет, ул. Университетская, 129, г. Андижан, Узбекистан

При высокотемпературном диффузионном легировании кремния элементами 3d-переходных металлов, в его объеме наблюдается формирование примесных скоплений с различными морфологическими параметрами. В данной работе приведены результаты изучения морфологии примесных наноскоплений атомов Co в Si и процесс их распада под влиянием всестороннего гидростатического давления (ВГД). Образцы n-Si<Co> были получены путем диффузионного легирования Co в Si при температуре 1523 К, в течение 2 часов, после чего образцы охлаждались со скоростью $\upsilon_{охл}$=200 К/с. Полученные образцы подвергались к всестороннему гидростатическому давлению (ВГД) в интервале P=0,1÷1,2 ГПа при комнатной температуре.

Результаты структурных исследований образцов n-Si<Co>, полученные с помощью электронно-зондового анализа показали, что в их объеме образуются примесные наноскопления с размерами до ~400 нм, и имеют однослойную структуру с различной геометрической формой. Анализы химического состава этих наноскоплений показали, что по их объему процентная доля атомов Co составляет ~30%.

На рис. 1 представлены зависимости ρ_p/ρ_0 от ВГД для исходных образцов n-Si (кривая 1), а также легированных образцов n-Si<Co> (кривая 2) подвергнутых ВГД в интервале P=0,1÷1,2 ГПа. Измерения ρ образцов были проведены до и после воздействия ВГД. Как видно, в зависимости ρ_p/ρ_0 от ВГД для исходных образцов в данном диапазоне давлений существенных изменений не наблюдается (кривая 1). В образцах n-Si<Co> данная зависимость состоит из двух стадий (кривая 2). Первый из них наблюдается при значении давления P<0,3 ГПа, а второй – при P≥0,3 ГПа. На первом этапе значение ρ образцов снижается на ~15%. При дальнейшем увеличении значения ВГД наблюдается вторая стадия, которая приводит к резкому увеличению значения ρ_p/ρ_0 и при P=0,4 ГПа оно увеличивается почти в 8 раз. При дальнейшем увеличении значения внешнего давления до P=1,2 ГПа существенные изменения не наблюдаются.

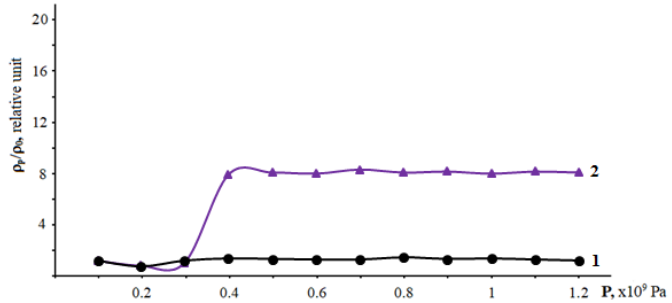


Рисунок 1. Зависимость ρ_p/ρ_0 от ВГД в образцах: 1 – n-$Si_{исх}$; 2– n-Si<Co>

Такой характер изменения величины удельного сопротивления для образцов n-Si<Co> объясняется тем, что под воздействием давления при P<0,3 ГПа концентрация свободных носителей заряда в объеме образцов увеличивается за счет смещения энергетических уровней из-за деформации кристаллической структуры кремния, что приводит к уменьшению значения ρ_p/ρ_0 образцов. Дальнейшее увеличение давления до P=0,4 ГПа приводит к резкому увеличению значения ρ_p/ρ_0 образцов, которая связано с увеличением значения концентрации электроактивных атомов примеси никеля.

Синтез и структура волокнистых алюмоиттриевых гранатов

Т.М. Ульянова[1]*, П.А. Витязь[2], Л.В. Овсеенко[1], и Н.П. Крутько[1]
[1]*ИОНХ НАН Беларуси, ул. Сурганова, 9/1, 220072 г. Минск, Беларусь,*
**e-mail:ulya@igic.bas-net.by*
[2] *Президиум НАН Беларуси, пр. Независимости, 66, 220072 г. Минск, Беларусь*

Получение функциональной технической керамики из оксидов редкоземельных металлов с оксидом алюминия представляет интерес в связи с использованием их в радиоэлектронной, лазерной технике, оптоэлектронике, а также в композиционных термостойких материалах. Монокристаллы гранатов с добавками РЗЭ получают различными методами: твердофазным синтезом из исходных оксидов, самораспространяющимся высокотемературным синтезом, из расплавов, золь-гель методом из азотнокислых растворов, химическим осаждением, вымораживанием и другими приемами. В настоящее время для получения мелко- и нанокристаллических порошков используют не только исходные неорганические реагенты, но и полимерные прекурсоры.

В процессе термохимических реакций в системе Al_2O_3 – Y_2O_3 образуются как химические соединения, так и твердые растворы. В зависимости от условий синтеза формируются химические соединения дисперсностью от нанодисперсных до макрокристаллических частиц и монокристаллов.

Целью настоящего исследования было изучить особенности образования химических соединений в системе Al_2O_3 – Y_2O_3 с использованием исходного прекурсора - волокнистой гидратцеллюлозной матрицы.

Прекурсорами служили гидратированные целлюлозные нити и нетиканые материалы типа фетра, состоящие из множества моноволокон, способные поглощать растворы солей и сохранять их равномерное локальное распределение с заданным соотношением компонентов. Растворы готовили из высокочистой воды и хлористых солей алюминия и иттрия в различном соотношении компонентов (в пересчете на оксиды металлов Y_2O_3 : Al_2O_3) 3:5, 3:2 и 5:3.

Отмытые и обезжиренные волокна насыщали растворами солей, сушили и термообрабатывали на воздухе в изотермическом режиме в интервале температур 400 – 1600 ^{0}C с интервалом 100 ^{0}C. Твердофазные процессы исследовали с помощью ДТГА, рентгенофазового, рентгеноструктурного анализа, оптической и электронной микроскопии. Физико-химические свойства волокнистых порошков изучали стандартными методами, а удельную поверхность определяли по адсорбции азота методом БЭТ.

В результате проведенных исследований были синтезированы наноструктурные волокнистые материалы с химическим составом, соответствующим алюминатам иттрия $Y_3Al_5O_{12}$ кубической структуры и $Y_4A_{12}O_9$ моноклинной структуры. Установлено, что благодаря высокодисперсному состоянию вещества в волокнах химические соединения образуются в процессе термолиза введенных в полимерную матрицу солей с образованием нанокристаллических реакционно-активных алюминатов иттрия. Показано, что при температурах 1000−1200 °C происходит частичное диспропорционирование соединения $Y_4A_{12}O_9$ с образованием граната и оксида иттрия, который с повышением температуры термообработки образует с основной фазой твердый раствор. Изменения физико-химических свойств синтезированных бикомпонентных волокон коррелируют с их структурными превращениями. Разработан метод получения волокнистых наноструктурных материалов Y_2O_3−Al_2O_3 с заданным химическим составом и свойствами.

Технология и особенности изготовления монокристаллических тонких пленок спинового бесщелевого полупроводника CoFeMnSi

Ф.А. Усков*
Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», пл. Шокина, 1, 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия,
**e-mail: phil1997@inbox.ru*

Спиновые бесщелевые полупроводники на сегодняшний день являются перспективными материалами для использования в спинтронных устройствах. Экспериментально доказано, что сплав Гейслера CoFeMnSi, например, обладает 100% спиновой поляризацией, низким уровнем основных носителей заряда, а так же имеет особенности зонной структуры, которые позволяют делать на его основе такие устройства спинтроники, как спиновые вентили, энергоэффективные элементы памяти с магнитными туннельными переходами на его основе и тд.

Проявление магнитных и транспортных свойств тонких пленок CoFeMnSi во многом зависит от качества его кристаллической структуры. Наличие дефектов, границ раздела между зернами, а также дислокаций несоответствия на поверхности тонких пленок CoFeMnSi приводит к ухудшению спиновой поляризации и к увеличению коэрцетивной силы. Поэтому необходимо иметь технологию производства тонких пленок CoFeMnSi, кристаллическая структура которых имеет высокую упорядоченность атомов.

В данной работе исследована и усовершенствована технология осаждения тонких пленок CoFeMnSi методом импульсного лазерного осаждения. Подобраны технологические параметры, при которых на подложке MgO (100) формируется монокристаллическая тонкая пленка CoFeMnSi толщиной 10-20 нм. Изучено влияние таких факторов, как температура подложки, энергия и частота импульсного лазерного излучения на режимы роста тонких пленок CoFeMnSi.

Изменение структуры пековых коксов в процессе высокотемпературной обработки

А.Г. Фазлитдинова[1]*, В. А. Тюменцев[1], И.П. Карих[1], и Л.Ф. Шакирова[1]
[1]*Челябинский государственный университет, 454001, Россия, Челябинск, ул. Братьев Кашириных 12, fazlitdinovaag@mail.ru**

Искусственные графитированные материалы обладают уникальными эксплуатационными свойствами, которые обуславливают применение их в передовых областях промышленности. Структура таких материалов формируются в процессе высокотемпературной термической или термомеханической обработки. В данной работе методами рентгеноструктурного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния изучены закономерности изменения тонкой структуры углеродных материалов на основе пековых коксов, прошедших термообработку при 1100-2200°С. Показано, что профили дифракционных максимумов (002) образцов углеродного материала не симметричные [1, 2]. Это может быть обусловлено одновременным присутствием метастабильных углеродных фаз, отличающихся значением межплоскостного расстояния [2].

Показано, что в углеродном материале могут наблюдаться одновременно до двух метастабильных состояний. Значения межплоскостных расстояний (d_{002}) таких фаз и размеры областей когерентного рассеяния (L_{002}) определяются режимами термомеханической обработки, рис.1. По мере повышения температуры обработки от 1100 до 1800°С наблюдается увеличение размеров ОКР метастабильных состояний. После термообработки при 1900°С появляется фаза со значением d_{002} = 3,425 Å. Структурная неоднородность углеродных материалов также фиксируется спектроскопией комбинационного рассеяния.

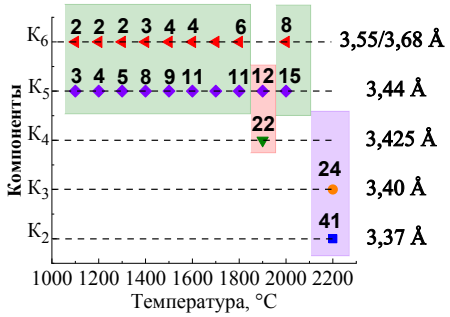


Рис. 1. Последовательность изменения компонентного состава углеродного материала в процессе термообработки, цифрами указаны размеры областей когерентного рассеяния L_{002} (нм)

Таким образом, анализ профилей дифракционных максимумов углеродного материала позволяет получить данные о его тонкой структуре. В процессе высокотемпературной термомеханической обработки развивается рекристаллизация углеродного материала, сопровождающаяся формированием метастабильных состояний, структурные параметры которых зависят от режимов обработки.

Работа выполнена при поддержке Фонда перспективных научных исследований ФПНИ-2025/16 Челябинского государственного университета.

Список использованных источников

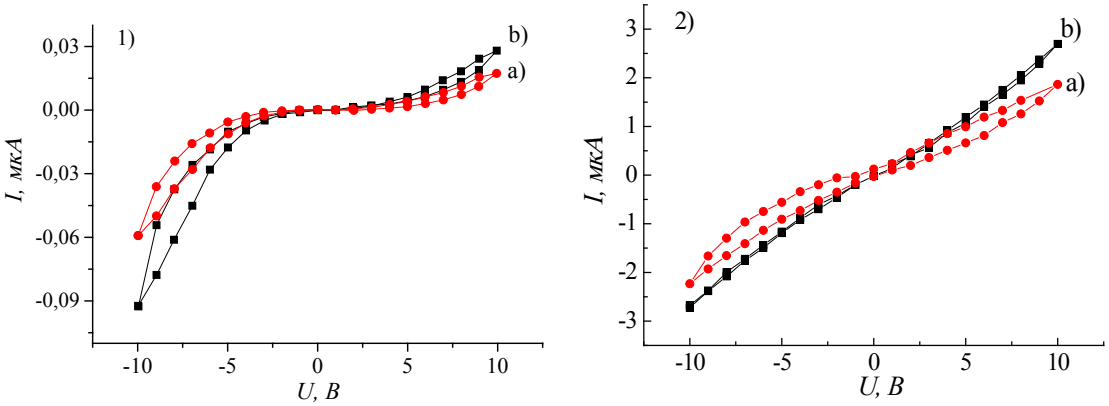
[1] В.А.Тюменцев [и др.] ЖТФ 83(3) (2006) 62-69.
[2] В.А. Тюменцев [и др.] Изв.вузов. Серия «Хим. и хим.технологии» 62(3) (2022) 6-13.

Слоистые структуры на основе $BiFeO_3$, проявляющие мемристивные свойства

Ш. П. Фараджев*, С. Х. Гаджимагомедов, М. Х. Рабаданов, и А. Э. Рабаданова
*Дагестанский государственный университет, ул. М. Гаджиева, 43-а, 367000 г. Махачкала, Россия, *e-mail:faradzhev22@mail.ru*

В последнее время широкий интерес представляют слоистые структуры, сочетающие слои «мультиферроик/полупроводник» и «мультиферроик/сверхпроводник», например, $BiFeO_3/TiO_2$ [1] и $BiFeO_3/YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ($BiFeO_3$/YBCO) [2], которые рассматриваются как основа для изготовления резистивной памяти, оптоэлектронных устройств, устройств солнечной энергии и т.д. В работе изготовлены пленки составов $BiFeO_3/TiO_2$ и $BiFeO_3/YBa_2Cu_3O_{6+x}$ методом атомно-слоевого осаждения слоев феррита висмута на поверхности нанотрубок диоксида титана (TiO_2) и слоев недодопированного $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. Нанотрубки TiO_2 изготавливали стандартным методом анодного окисления титановых пленок. Слои $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ получали, распыляя наноструктурированные высокоплотные мишени $YBa_2Cu_3O_{6.9}$ на подложки из кремния с аморфным слоем из оксида кремния (SiO_2/Si) методом магнетронного распыления. Для нанесения слоев $BiFeO_3$ использовались прекурсоры: $Bi(mmp)_3$ и $Fe(C_5H_5)_2$, а в качестве промежуточного окислителя – озон. Процесс нанесения проводился при температуре подложки ~ 250°C и вакууме не менее 10^{-3} Па. Полученные пленки термообрабатывались в печи при температуре 450°C.

Проведены исследования вольт-амперных характеристик (ВАХ) для пленок составов $BiFeO_3$/Nt-TiO_2/Ti и $BiFeO_3$/YBCO/SiO_2/Si без и в присутствии постоянного поперечного магнитного поля при циклическом изменении напряжения и планарном размещении зондов. На зависимостях ВАХ наблюдается характерный для мемристивных структур гистерезисный вид (см. рис.). Наибольший эффект переключения для пленки $BiFeO_3$/Nt-TiO_2/Ti наблюдается при напряжении 7В, а для структуры $BiFeO_3$/YBCO/SiO_2/Si – при 5В. Как видно, полученные образцы проявляют чувствительность зависимости ВАХ к постоянному магнитному полю.



Зависимости ВАХ для $BiFeO_3$/TiO_2 – 1) и $BiFeO_3/YBa_2Cu_3O_{6+x}$ –2): без поля – a) и в постоянном магнитном поле 11,5 кОе – b) (размещение зондов планарное).

Такое поведение дает возможность изготовления на основе таких слоистых структур многофункциональных мемристивных устройств, управляемых, как электрическим, так и магнитным полем.

Благодарность (финансирование). Исследования выполнены при финансовой поддержке Гос. задания FZNZ-2025-0003.

Список использованных источников

[1] Y. Zhang [и др.] Acta materialia 60 (2012) 6486-6493.
[2] J. X. Zhu [et al.] Scientific Reports 4 (2014) 5368.

Изучение влияния допирования оксидом магния на свойства метацирконата лития

А. А. Хаметова[1,2]*, А. Л. Козловский[1,2], и А.В. Труханов[3]
*[1]Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, пр. Сатпаева 2, 010008 г. Астана, Республика Казахстан, *e-mail: khametovaaa@gmail.com*
[2]Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, пр. Абылай хана 2/1, 010008 г. Астана, Республика Казахстан
[3]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П.Бровки, 19, 220072 г. Минск, Республика Беларусь

В связи с большим спросом на более чистые и устойчивые источники энергии, термоядерная энергетика становится востребованным направлением в современном мире. В качестве перспективных материалов для воспроизводства трития в бланкетах термоядерных реакторов рассматриваются литийсодержащие керамики Li_2TiO_3, Li_4SiO_4, Li_2O, Li_2ZrO_3 и Li_2AlO_2. При выборе конструкционных материалов существенную роль играет способность выдерживать экстремальные условия, такие как высокие температуры, радиационное облучение, механические воздействия. В процессе воспроизводства трития в термоядерном реакторе происходит накопление большого количества гелия в структуре материалов бридера. Вместе с тем, на радиационную и термическую стойкость материалов оказывает существенное влияние наличие и концентрация примесей и легирующих добавок. Для решения проблемы разработки высокоэффективных и долгосрочных конструкционных материалов в работе рассматривается синтез метацирконата лития с добавлением в состав керамики стабилизирующей добавки в виде оксида магния. При введении MgO в структуру Li_2ZrO_3 возникает повышенная концентрация кислородных вакансий, что дает возможность улучшить подвижность лития.

Цель данной работы заключается в изучении влияния изменения концентрации MgO в литий-содержащую керамику Li_2ZrO_3 на устойчивость к механическим и радиационным воздействиям.

По полученным результатам установлено, что при концентрации MgO 0.2 – 0.25M повышается устойчивость к деструкции поврежденного слоя и происходит сдерживание механизмов накопления структурных повреждений.

Исследование особенностей формирования электрическим током ГКР-активной подложки на основе тонкой плёнки Ag-Nb-N-O

Ю.В. Чумаченко[1]*, Д.В. Новиков[1], С.В. Дубков[1], Д.Г. Громов[1], Л.С. Волкова[1,2], и С.А. Гаврилов[1]
*[1]Национальный исследовательский университет «МИЭТ», пл. Шокина, д.1, 124498 г. Зеленоград, г. Москва, Россия, *e-mail: julia.chumachenko@mail.ru*
[2]Институт нанотехнологий микроэлектроники Российской академии наук, ул. Нагатинская, д. 16а, стр. 1, 115487 г. Москва, Россия

Современные исследования активно направлены на изучение подложек, основанных на эффекте гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) света. Такие подложки представляют собой многообещающий инструмент для высокочувствительного и быстрого анализа в различных областях: в медицине, биологии, химии и экологии. Ключевым элементом ГКР-подложек является массив наночастиц на поверхности, однако контакт поверхности таких подложек с атмосферой приводит к окислению и адсорбции примесей, что снижает чувствительность. Одним из перспективных способов решения этой проблемы является использование тонких многокомпонентных плёнок, способных под энергетическим воздействием формировать (активировать) на поверхности наночастицы, усиливающие сигнал комбинационного рассеяния (КР) света. Такие подложки сохраняют стабильность характеристик в течение длительного времени, поскольку плазмонный материал остается защищённым внутри плёнки до момента проведения непосредственных измерений.

Для активации ГКР подложек могут применяться различные виды энергетического воздействия, такие как термический или резистивный нагрев, лазерный или СВЧ-излучение. В данной работе изучалось влияние электрического тока в гальваностатическом и потенциостатическом режимах на тонкую плёнку Ag-Nb-N-O. Исследовались зависимости температуры активации, морфологии поверхности и интенсивности ГКР-спектров структуры от режимов электрического тока. В качестве анализируемого вещества использовали растворы родамина 6G различной концентрации. Был установлен предел детектирования 10 нМ и коэффициент усиления структуры 2×10^6 для гальваностатического режима.

Благодарность (финансирование)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00610, https://rscf.ru/project/24-19-00610/.

Theory and Modeling in Materials Science

Теория и Моделирование в Материаловедении

The Adsorption Properties of Gallium Atoms on Phenanthrene by Density Functional Theory Calculations

Andreea Neacsu[1], Viorel Chihaia[1]*
[1]*Institute of Physical Chemistry Ilie Murgulescu of Romanian Academy, 202 Spaiul Independentei, 060021, Bucharest, Romania, *e-mail: vchihaia@gmail.com*

Engineered metamaterials are artificial materials designed to exhibit properties not found in nature. These properties are achieved through the careful design of their structure and composition at the nanoscale [1,2]. The composition of metamaterials can include a variety of elements, from different blocks of the periodic table, to achieve desired electromagnetic, optical, or mechanical properties. The inclusion of p-block metals and metalloids in metamaterials is feasible and can be used to tailor the material properties for specific applications. The current research focuses on developing novel chiral nanostructures based on Gallium (Ga), created through Ga focused ion beam induced deposition with Phenanthrene (Phe) as the host material [3]. We performed a systematic density functional theory investigation on the adsorption of Ga atoms on Phe using the GGA exchange-correlation functional PW91 [4], and considering the van der Waals interactions by Tkatchenko-Scheffler scheme [5]. In particular, we identify the preferred adsorption sites together with the corresponding distortion of the Phe sheet and identify the transition paths of diffusion of Ga atoms on Phe. In Figure 1 are presented the results for the most stable structures obtained for the adsorption of one Ga atom on one Phe molecule surface. The calculations show that the Ga atoms up to n=4 do bind to the Phe sheet and that in some cases the buckling of the Phe sheet can be significant. This finding suggests that the Gallium atoms tend to clusterize in areas where electrons are delocalized on the Phe molecule. This arrangement of Ga clusters on Phe's rings creates a balance in energy between two competing factors as the deformation of the Phe molecule and the quantity and distribution of Ga atoms on the Phe surface. This understanding is important for developing and optimizing Ga-Phe based nanostructures, and also extending the research to other metal and metalloids which could have potential applications in fields such as sensor technology, plasmonics, and catalysis.

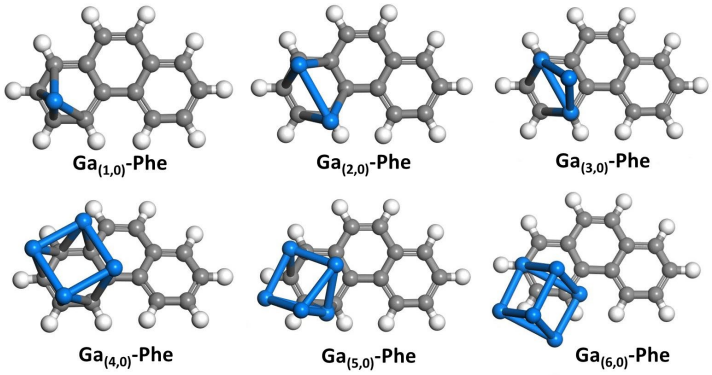


Figure 1. The most stable structures of the adsorption of Ga atoms on Phe molecule surface (blue - gallium atom, grey - carbon atom, white - hydrogen atom). In formula $Ga_{(n,0)}$ - Phe the first index represents the number of Ga atom on one face of Phe and the second index is the number of atoms on the second face.

References

[1] M. Kadic [et al.] Nat Rev Phys 1 (2019) 198.
[2] M.S. Likhanov [et al.] Russ Chem Bull 69 (2020) 223.
[3] M. Cuscuna [et al.] Mater Horiz 8 (2021) 187.
[4] J. P. Perdew [et al.] Phys Rev B 46 (1992) 6671.
[5] A. Tkatchenko [et al.] Phys Rev Lett, 102 (2009) 073005.

Mechanism of ethylene formation from CH_3 via plasma-catalytic method

F.A. Khaydarov[1]*, X.Sh. Begmurodova[1], Z.I. Iskandarova[2], U.B. Khalilov[1,3]
[1]*Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, 33 Durmon yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan, e-mail: feruzkhaydarov27@gmail.com*
[2]*Denov Institute of Entrepreneurship and Pedagogy, 360 S.Rashdov St., 190507 Denov, Uzbekistan*
[3]*University of Antwerp, 13 Prinsstraat, 2000 Antwerp, Belgium*

The plasma-catalytic method is considered an efficient approach for ethylene (C_2H_4) production, as it facilitates the generation of highly active radicals under low-temperature and low-energy consumption conditions. This method accelerates reaction kinetics, enhances product yield, and is environmentally favorable [1]. However, the interaction mechanisms between radicals formed in the plasma and the catalyst, as well as the stages of product formation, remain insufficiently studied, necessitating further research in this area [2]. In this study, the mechanism of C_2H_4 formation from the methane plasma radical – methyl (CH_3) – on Ni(111) and Ni(100) surfaces was investigated using the molecular dynamics method through the LAMMPS simulation package (Figure 1).

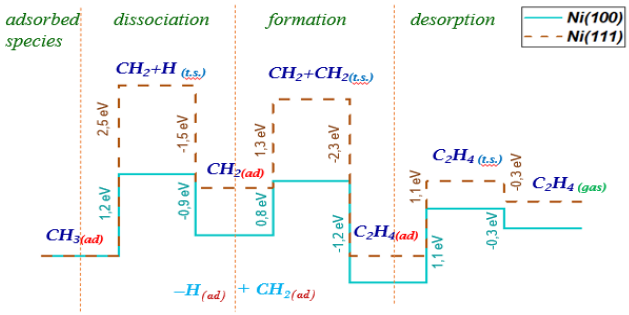


Figure 1. Reaction pathways and energy barriers for ethylene formation from the methyl radical in methane plasma on Ni(100) and Ni(111) surfaces.

The dissociation of the adsorbed CH_3 radical to CH_2 on Ni(100) and Ni(111) surfaces exhibits energy barriers of 1.2 eV and 2.5 eV, respectively. The subsequent formation of ethylene from CH_2 requires 0.7 eV on Ni(100) and 1.3 eV on Ni(111), while desorption of the resulting ethylene from the surface shows nearly identical energy barriers of approximately 1.1 eV on both surfaces.

The lower energy barriers observed on the Ni(100) surface are attributed to the greater number of vacant bonding sites on surface metal atoms (4 versus 3, respectively) and the higher surface energy (1.35 J/m² versus 1.17 J/m²).

These findings suggest that the rate of ethylene formation from CH_3 radicals in methane plasma is higher on the Ni(100) surface compared to Ni(111). This result is a critical factor in catalyst selection and highlights the need for further research to identify optimal process conditions and improve efficiency.

Acknowledgment
The research was carried out within the framework of the fundamental project F-FA-2021-512, funded by the Ministry of Innovative Development of the Republic of Uzbekistan. Simulations were conducted using the FISTUz supercomputer cluster of the NanoSimGroup at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of the AS RUz.

References

[1] Gao Y. et al., //ACS Catalysis (2019) **9**, 8592-8621
[2] Erik C. Neyts et al., //Chemical reviews (2015) **24**, 13408-13446

Adsorption of germanium in ordered graphene with a vacancy

M. M. Asadov[1,3*], S. N.Mustafaeva[2] and S. S.Guseinova[2]
[1]*Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, G.Javid Ave. 113, Baku, AZ 1143 Azerbaijan*
[2]*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, G. Javid Ave., 131, Baku, AZ 1143 Azerbaijan*
[3]*Research Institute of Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Azadlig Ave., 20, Baku, AZ 1010 Azerbaijan*

In the DFT, the obtained equilibrium atomic and electronic structures of the graphene + monovacancy/Ge(GPSV) → graphene + divacancy/Ge (GPDV) supercell interface are different from each other. This is manifested in the distribution of the DOS' spectra of the supercells of the defective graphene/Ge interface. This change occurs due to the physical adsorption of germanium on the graphene surface, where weak hybridization takes place between the carbon and the germanium adatom: C2p–Ge3d hybridization. The DOS of the possible variants of the positions of vacancies and adatoms of germanium in a graphene monolayer indicates the need to choose a suitable exchange correlational functional among the known ones. The location of the adatom in which the carbon atoms in the GPV are located directly near the adsorbed germanium is energetically favorable. The partial DOS of carbon atoms and the germanium adatom contribute to the complete DOS of the GPSV supercell and determine the electronic properties. The quantum-chemical modeling of GPV–Ge shows that changes in the length of bonds (d) C–C (dC–C = 1.42 Å) and C–Ge (dC–Ge = 1.97 Å), as well as the adsorption energy (= –0.9 eV/atom) of the germanium adatom, are characterized by a weak interaction between the adatom and sp2 -hybridized graphene surface due to the van der Waals forces. In other words, in the chosen model of the GPV–Ge system, when an adatom interacts on the graphene surface, the interaction occurs by the mechanism of physical adsorption. In this process, the binding energy in the interface is not more than –1 eV/C atom at the equilibrium distance between the germanium surface and carbon atoms of dC–Ge = 1.97 Å. In GPV–Ge, the equilibrium distance of atoms in the immediate environment of germanium decreases from 1.46 to 1.41 Å for dC–C and from 1.97 to 1.86 Å for dC–Ge. As the bond length decreases, the adsorption energy of the adatom also decreases. Comparison with the known data on the C–C and C–Ge bond length and the adsorption energy of a germanium adatom at the monovacancy position in the GPV–Ge supercell indicates satisfactory agreement of the results mainly with respect to the bond length. The stability of the germanium adatom on monovacancy graphene increases at the initial stage of adsorption at values N = 1–2 atoms (the number of adatoms). At values N ≥ 2 atoms, the value of reaches a plateau. On divacancy GPDV–Ge graphene, the value on the surface increases at the initial stages of adsorption near the center of two vacancies. The value of the C–Ge bond with the participation of the divacancy DV is less than that with the participation of the monovacancy . The value on the GPV– Ge surface near the vacancy decreases with decreasing distance between the adatom and the middle of the vacancy. Such a decrease near a vacancy is apparently related to the effect of the increase in the strain near the vacancy and the stress of bonds between atoms.

Charge-sensitive methods for studying the distribution of surface electrostatic potential

K. Pantsialeyeu*, R. Vorobey, A. Svistun, U. Mikitsevich, and A. Zharin
Belarusian National Technical University, 65 Independence Ave., 220013 Minsk, Republic of Belarus, e-mail: nil_pt@bntu.by

Development and application of charge-sensitive methods for analyzing the distribution of surface electrostatic potential are highly relevant in modern science and technology, as they play a key role in materials science, nanotechnology, semiconductor physics, biophysics, and other fields. These methods enable precise characterization of surface charge distribution, which directly affects interfacial phenomena, electronic properties, and device performance.

For many years, the Belarusian National Technical University has been conducting research on the development of charge-sensitive methods and instruments [1, 2]. These methods are used to:

– Monitor the distribution of electron work function on the surface of metals and alloys, including its changes under external influences (deformation, friction and wear, corrosion, etc.) [3, 4];

– Study inhomogeneities in the key properties of semiconductor wafers, such as diffusion length, surface resistivity, and other parameters [5, 6];

– Analyze polymer composites and solid dielectrics, particularly the distribution of intrinsic and/or acquired surface potential (charge) and its changes due to external factors (optical, mechanical, etc.) [7, 8].

Fig. 1 shows the measuring device and a representative surface electrostatic potential distribution map.

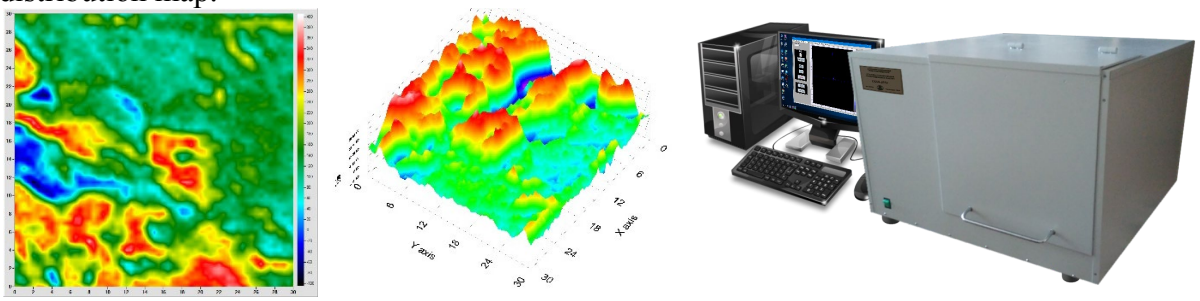


Figure 1. Instrument appearance and 2D/3D mapping of surface electrostatic potential on mechanically processed silicon wafer

Given the growing demand for miniaturization and high-performance materials, the improvement of charge-sensitive methods remains an important scientific challenge. Their ability to provide quantitative and localized data on electrostatic properties makes them indispensable for both fundamental research and industrial applications.

References

[1] U. Mikitsevich [et al.] Devices and Methods of Measurements 14 (1) (2023) 18-26.
[2] A.L. Zharin [et al.] Devices and Methods of Measurements 14 (3) (2023) 161-172.
[3] K. Pantsialeyeu [et al.] Przeglad Elektrotechniczny 92 (8) (2016) 190-193.
[4] K. Pantsialeyeu [et al.] Przeglad Elektrotechniczny 92 (11) (2016) 239-243.
[5] V. Pilipenko [et al.] High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes 23 (3) (2019) 283-290.
[6] V. Pilipenko. Devices and Methods of Measurements 8 (4) (2017) 344-356.
[7] K. Pantsialeyeu. Informatics, Control, Measurement in Economy and Environmental Protection 10 (4) (2020) 57–60.
[8] K. Pantsialeyeu [et al.] Devices and Methods of Measurements 13 (4) (2022) 291-301.

Modern problems of quantum theory of electronic structure of materials containing transition metals, lanthanides, and actinides

Yu. Lomachuk[1], D. Maltsev[1], N. Mosyagin[1], V. Shakhova[1], and A. Titov[1,2]*,
[1] *NRC "Kurchatov Institute" - PNPI, 1 Orlova roscha, 188300 Gatchina, Russia,*
**e-mail: titov_av@pnpi.nrcki.ru*
[2] *St.Petersburg State University, 7/9 University Embankment, 199034 St. Petersburg, Russia*

The creation of new materials based on heavy transition metals (d-elements), lanthanides and actinides (f-elements) is one of the key tasks of the rapid development of the scientific and technical base of in the world in the coming decades. Digital materials science, including computer modeling of such materials, is one of the most important components of such development. Theoretical study of materials containing d- and f-elements with high accuracy is necessary for a correct understanding of the processes occurring in them at the atomic level, predicting the properties of materials and developing new technologies. Computer modeling can play an important role in the creation of new magnetic, optical, radiopharmaceutical, diagnostic, and other materials with unique properties. Theoretical simulation of such materials together with the methods for non-destructive control of chemical (electronic) state of d- and f-elements together with their experimental studies are the most efficient tools for a reliable long-term forecast of the properties of materials and processes occurring in innovative matrices for the long-term disposal of high-level waste including minor actinides. Theoretical methods can also play an important role in the development of technologies to use radioactive nuclides in nuclear energy sources.

The problems of modeling such materials are discussed in the report, as well as ways to overcome these problems using the generalized (Gatchina) relativistic pseudopotential (GRPP) method [1]. It is shown in the report that the principles of constructing the GRPPs [2] can be applied in constructing embedding potentials for further studying the crystal fragments [3-7]. They can be used for precise studies of various properties of materials (both periodic structures with d- and f-elements, and structures with the impurity centers containing them) in the framework of cluster modeling of materials. First of all, this concerns calculations of the properties of “atoms in a compound” [8], such as chemical shifts of the X-ray emission (fluorescent) spectra of heavy atoms in a crystalline environment [9-10], fine and hyperfine splitting, and other properties, which are, in particular, required to search for a “new physics" [11-12] and solve other actual problems [13]. It is shown for ionic-covalent crystals that the embedding potential can be represented as a linear combination of semilocal “compound-tunable” PPs and a set of Coulomb partial charges on the environmental atoms without explicit including electrons of the environmental atoms in the calculation (http://qchem.pnpi.spb.ru).

References

[1] A. Oleynichenko [et al.] Symmetry 15 (2023) 197/1-29.
[2] A. Titov [et al.] Int. J.Quantum Chem. 71 (1999) 359-401.
[3] Y. Lomachuk [et al.] Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 17922-17931.
[4] D. Maltsev [et al.] Phys. Rev. B 103 (2021) 205105/1-13.
[5] V. Shakhova [et al.] Phys. Chem. Chem. Phys. 104 (2022) 19333-19345.
[6] A. Oleynichenko [et al.] Phys. Rev. B 109 (2024) 125106/1-15.
[7] D. Maltsev [et al.] Sci.Rep. 15 (2025) 10645/1-18.
[8] A. Titov [et al.] Phys. Rev. A 90 (2014) 052522/1-9.
[9] Y. Lomachuk [et al.] Phys. Rev. A 88 (2013) 062511/1-13.
[10] P.Khadeeva [et al.] Mol. Phys., special issue (2025) e2483881/1-15.
[11] A. Petrov [et al.] Phys. Rev. A 107 (2023) 062814/1-6.
[12] L. Skripnikov [et al.] Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 18374-18380.
[13] M. Kozlov [et al.] Phys. Rev. A 109 (2024) 042806/1-6.

Mapping the chemistry of boron-nitride molecules

M. Fedyaeva[1,2]*, S. Lepeshkin[1,2], and A.R. Oganov[1]
[1]*Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry, Russian Academy of Sciences, Kosygina St. 19, 119991 Moscow, Russia ,*
** e-mail: Maria.Fedyaeva@skoltech.ru**
[2]*Skolkovo Institute of Science and Technology, Bolshoy Boulevard 30, bld. 1, 121205 Moscow, Russia*

Boron-nitrogen nano-sized objects (nanomolecules, nanowires, nanotubes; thin films, etc.) have been actively studied in recent years due to their unique physical and chemical properties. They may be used in different applications such as electronic devices, hydrogen storage materials, nanodots, high strength fibres, biomedical applications, etc. This work presents a comprehensive theoretical investigation of nano-sized boron-nitrogen B_nN_m molecules in a wide area of compositions ($0 \le n, m \le 10$) using the evolutionary algorithm USPEX[1-4] and DFT calculations. We have found a diverse range of structural patterns based on molecule size and B/N ratio. By several criteria (second-order energy differences, fragmentation energy and HOMO-LUMO gaps), we found the most stable ("magic") molecules, which can serve as potential building blocks and intermediates in synthesis and growth processes of B-N nanoformations. Additionally, our analysis highlighted certain nitrogen-rich compounds (BN_3, BN_9, B_3N_5, B_4N_6 and B_6N_9), which are both "magic" and release a high amount of energy during their decomposition, which indicates their possible application as high-energy-density materials (HEDMs).

Acknowledgement
Global structure optimization was supported by the Russian Science Foundation (grant 19-72-30043). The calculations were performed on Oleg and Arkuda supercomputers at Skoltech and at the Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences. The stability analysis was performed within the Project of the State Assignment (Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia).

References
[1] S. V. Lepeshkin [et al.] J. Phys. Chem. Lett. 10 (2019) 102–106.
[2] A. O. Lyakhov [et al.] Comput. Phys. Commun. 184 (2013) 1172–1182.
[3] A. R. Oganov [et al.] Acc. Chem. Res. 44 (2011) 227–237.
[4] A. R. Oganov [et al.] J. Chem. Phys. 124 (2006) 244704.

Atomic Displacemant Vectors of Ni and NiO Nanoparticles in Aggregation Process

K. B. Egamberdiev[1,2]*, S. Z. Mirzaev[1], and U. B. Khalilov[1,3]
[1]*Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov Academy of Sciences of Uzbekistan, 33 Durmon Yuli St. 100125 Tashkent, Uzbekistan, *kegamberdiev@yandex.ru*
[2]*University of Geological Sciences, 64 Olimlar St., 100064 Tashkent, Uzbekistan*
[3]*University of Antwerp, 13 Prinsstraat, 2000 Antwerpen, Belgium*

Currently, amorphous nanoparticles (ANPs) have irresistible appealed significant interest with a porous structure, randomly oriented bonds and higher structural flexibility [3]. Furthermore, ANPs can enhance superior catalytic properties as compared with crystalline catalysts [4]. In particular, according to the study [5], Fe_2O_3 ANPs are more active in catalysis than nanocrystalline polymorphs at the same size. Experimental investigations show that ANPs' shapes suggest that they result from a coalescence of the subnanometer clusters and they have formed through the aggregation [6]. Understanding of this fundamental process is crucial for explaining key phenomena in the nanoscale, i.e. growth mechanisms of nanomaterials. Nevertheless, experimentally grown nanoparticles often do not reach thermodynamically stable states because of quenching during the deposition. Ni and NiO ANPs have attracted more interest owing to their size-dependent structures, vibration modes and magnetic properties. There have been several synthetic approaches developed to create Ni and NiO nanoparticles. Hence, we present here results homo- and hetero nanoaggregation processes of Ni and NiO nanoclusters, 0.94 nm and 1.15 nm in diameter accordingly, obtained by MD method at room temperature.

We studied the displacement vector (DV) by dividing into A-D stages (Figure 1). At the initial state (A), the DV of atoms became at the fixed position because of the motionless of the atoms, substantially. It proceeded from 2 ps to 150 ps depending. After some time, NPs started to move towards each other and as a result, a neck is formed at the point of contact of the two interacting NPs, considering stage B. Simultaneously, we choose the same number for both the constant reference configuration and relative to current frame by OVITO to define rapid drop of the distance at the final slow state. Interestingly, we are faced that the DV indicates change the position of some atoms by breaking bonds in order to maximize their contact area for Ni-Ni and Ni-NiO NPs at stage C. As a result, the distance between NPs decreases by the reorientation of different parts of the system and the formation of new bonds. Indeed, the NPs rotate slightly to find an optimized surface for better contact like a crystal structure, consistent to promote further motion consistent and tend toward a more stable structure by displacing of atoms. Despite the DVs are the similar for NiO-NiO NP with comparison with Ni-Ni-Ni and Ni-NiO NPs until stage B, they rotate around their own axis and around each other at the stage D. The atoms with valence or bonding orbital (half-filled) should approach sufficiently close to one another with the axis of their orbitals in proper alignment.

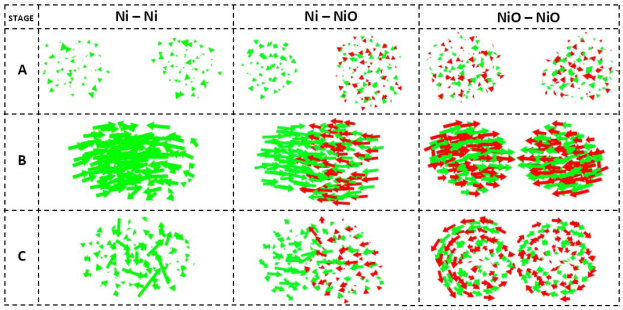


Figure 1. Displacement vectors the individual Ni (green) and O (red) atoms of NPs

References:
[1] V. Hoang [et al.] Phys.Rep., 518 (2012) 81-140.
[2] Z. Wu [et al.] Front.Chem.Engin. 1 (2007) 87-95.
[3] D.N. Srivastava [et al.] J. Phys.Chem. B 106 (2002) 1878-1883.
[4] E. Goudeli [et al.] Curr. Opin. Chem. Engin. 23 (2019) 155-163.

Computational Study of Thermodynamic Stability in Bimetallic Ni–Pt Nanoparticles: Effect of Size and Composition

F.A. Khaydarov[1*], X.Sh. Begmurodova[1], and U.B. Khalilov[1,2]
[1]*Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov, Academy of Sciences of Uzbekistan, 33 Durmon Yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan,*
**e-mail: feruzkhaydarov27@gmail.com*
[2]*University of Antwerp, Universiteitsplein 1, 2610 Antwerpen, Belgium*

Ni-Pt nanoalloys have attracted significant scientific attention due to their high catalytic activity, thermodynamic stability, and selectivity [1]. However, the structural stability of these nanoparticles concerning variations in shape, size, and composition has not been fully investigated [2]. In this study, the thermodynamic stability of $Ni_xPt(1–x)$ nanoparticles exhibiting prevalent cuboctahedral and icosahedral geometries, with particle sizes ranging from 2 to 10 nm, was systematically assessed through the calculations of the molar Gibbs free energy.

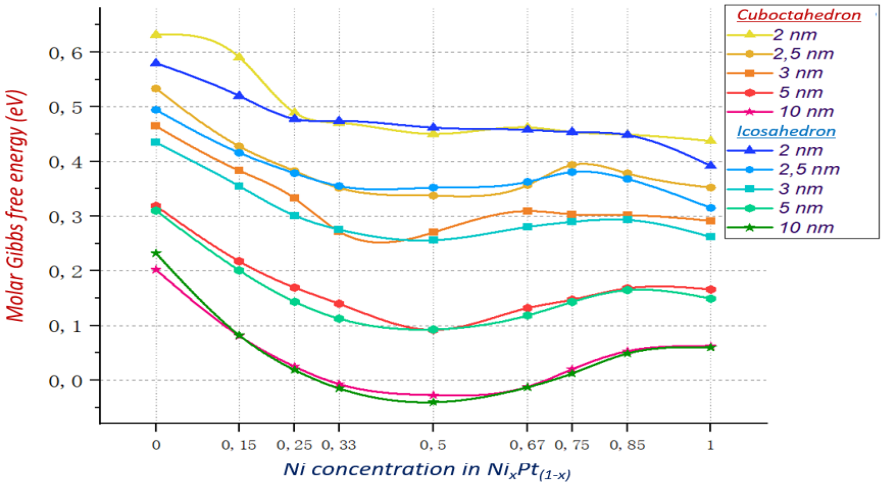


Figure 1. Composition-dependent molar Gibbs free energy of NixPt(1–x) nanoparticles exhibiting cuboctahedral and icosahedral morphologies with particle sizes ranging from 2 to 10 nm

The results revealed that the icosahedral shape is thermodynamically more favorable across all sizes. In general, an increase in particle size enhances stability, while the minimum energy was observed at a Ni concentration of approximately $x \approx 0.5$. These findings provide a scientific basis for optimizing the composition and geometric structure of Ni-Pt nanocatalysts.

Acknowledgment:
The research was carried out within the framework of the fundamental project F-FA-2021-512, funded by the Ministry of Innovative Development of the Republic of Uzbekistan. Simulations were conducted using the FISTUz supercomputer cluster of the NanoSimGroup at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of the Academy of Sciences of Uzbekistan

References:
[1] X. Lu [et al.] ACS Applied Nano Materials 7 (2024) 13.
[2] Y. Yang [et at.] Journal of Cluster Science 31 (2020) 609-614.

Моделирование структурных свойств и явления переноса в $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$

С.М. Асадов[1,3]* и С.Н. Мустафаева[2]

[1]*Научно-исследовательский институт «Геотехнологические проблемы нефти, газа и химия» Министерства науки и образования Азербайджана, пр. Азадлыг, 20, AZ 1010 г. Баку, Азербайджан, *e-mail: salim7777@gmail.com*

[2]*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of Azerbaijan, 131 G. Javid Ave., AZ 1143 Baku, Azerbaijan*

[3]*Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности Министерства науки и образования Азербайджана, пр. Азадлыг, 20, AZ 1010 г. Баку, Азербайджан*

Точность современных методов расчета свойств многокомпонентных систем на основе теории функционала плотности (DFT) продолжает улучшаться, а увеличение вычислительной мощности позволит сравнивать свойства материалов для конкретных приложений.

Целью данной работы был ab initio расчет структурных свойств, термодинамический анализ системы Tl–In–S–Cr и исследование зависимости структурно чувствительных свойств от состава 2D-полупроводников с моноклинной структурой $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$. Вторая цель –экспериментальное исследование эффекта частичного замещения индия примесью хрома (Cr), диэлектрических характеристик, проводимости на переменном токе и рентгеновских дозиметрических характеристик выращенных монокристаллов $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0,005 и 0,01).

В рамках теории функционала плотности (DFT) рассчитаны электронная структура, параметры решетки, магнитные и термодинамические свойства $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ с моноклинной системой. Изучено влияние степени легирования примесями хрома на свойства суперъячеек $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$. Расчеты проводились методами ab initio в приближении локальной электронной плотности (LDA) и в приближении обобщенного градиента (GGA). В DFT расчетах учитывались спин-орбитальные и кулоновские взаимодействия. Изменение концентрации примеси хрома (x = 0.001–0.02) в $TlInS_2$ не приводит к изменению равновесных параметров решетки и типа магнитного упорядочения в $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$. Фазовые равновесия и устойчивость бинарных и тройных соединений исследованы термодинамическим методом и методом DFT GGA в тройной системе Tl–In–S. Построенный изотермический участок фазовой диаграммы при 298 K подтверждает незначительную область гомогенности на основе промежуточных тройных соединений, системы Tl–In–S. Энергии образования тройных соединений $TlInS_2$ и $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.001–0.02) рассчитаны методом DFT и термодинамически согласуются друг с другом. Энергия образования соединения $TlInS_2$, рассчитанная теоретическими методами, также согласуется с экспериментальными данными. Это свидетельствует об адекватности используемых расчетных моделей. С целью определения условий стабильного легирования проанализированы термодинамические свойства фаз системы Tl–In–S, установлены стабильные состояния многокомпонентных фаз, устойчивые равновесия между бинарными и тройными соединениями системы $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$. Синтезированы поликристаллы и из них выращены монокристаллы $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ с различной концентрацией примеси хрома (x = 0, 0.001 и 0.02). Изучены кристаллическая структура, термодинамические, диэлектрические, электрические и дозиметрические характеристики монокристаллов $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$. Проведено сравнение расчетных термодинамических и физических свойств фаз $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ с экспериментальными данными. Полученные данные по регистрации дозиметрической информации с использованием материала $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ могут быть использованы для изготовления неохлаждаемых полупроводниковых детекторов ионизирующего излучения, работающих при комнатной температуре.

Моделирование пренуклеации перилена на поверхности Ni (111) и Ni (331)

Д. Х. Хусанова[1*], С. З. Мирзаев[1], и У. Б. Халилов[1,2]
[1]*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени Арифова, Академия наук Узбекистана, 100125 г. Ташкент, Узбекистан, *e-mail: dilfuzahusanova75@gmail.com*
[2]*Университет Антверпена, Университеитсплеин 1, 2610 г. Антверпен, Бельгия*

Процессы предзародышеобразования кристала перилена на поверхности катализатора до сих пор полностью не изучены. В данном исследовании, мы изучали процессы кластерообразования молекул перилена на поверхности Ni(111) и Ni(331) с использованием методов молекулярной динамики [1].

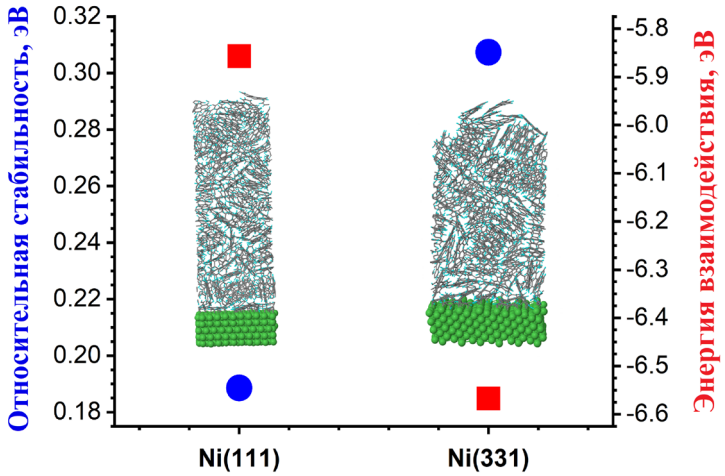


Рисунок 1. Свободная энергия Гиббса и изменения энергии связи молекулы перилена на поверхностях Ni(111) и Ni(331)

Были оценены начальные структуры в процессе кластеризации, включая энергию взаимодействия одной молекулы перилена с поверхностями, а также молярную свободную энергию Гиббса, характеризующую их стабильность (рис. 1). Хотя энергия взаимодействия на поверхности Ni(111) (-5,857 эВ) несколько ниже, чем на поверхности Ni(331) (-6,567 эВ), образующаяся структура на Ni(111) обладает большей стабильностью (0,189 эВ vs. 0,307 эВ). Полученные результаты позволяют предположить, что хотя исходные структуры более аморфны, тенденция указывает на то, что эти структуры стремятся стать кристаллическими структурами α- или β-перилена [2]. В целом данное исследование углубляет понимание каталитического образования периленовых кластеров и направляет манипуляции с органическими кристаллами на основе перилена.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено в рамках проекта F-FA-2021-512 при поддержке Агентства Инновационного Развития Узбекистана.

Список использованных источников:
[1]. D. Husanova [и др.] Chemical Physics 579 (2024) 112191.
[2]. J. H. Urbelis [и др.] Crystal Growth & Design, 14(10) (2014) 5244-5251.

Контактная задача для кругового штампа с учетом нелинейности упругих свойств основания

С. М. Айзикович*, П. А. Лапина, и И. А. Панфилов
*Донской государственный технический университет, пл. Гагарина, 1, 344003 г. Ростов-на-Дону, Россия, *e-mail: saizikovich@gmail.com*

Первые работы в области корректного моделирования задачи кручения круглым штампом упругого полупространства относятся к середине прошлого века. Задача кручения круглым штампом однородного упругого полупространства впервые была сформулирована и решена в динамической постановке Рейснером и Сагочи [1]. В работе Снеддона [2] задача сведена к решению интегрального уравнения, используя технику интегральных преобразований. Уже в 70-х годах прошлого века Грилицким В.Д. [3] было построено решение для изотропной двухслойной среды и ортотропного упругого слоя в виде ряда по отрицательным степеням параметра, являющегося отношением толщины первого слоя к радиусу штампа, которое является эффективным для относительно малого, по сравнению с толщиной слоя, радиуса штампа.

Кассир [4] построил решение задачи кручения неоднородного изотропного полупространства в случае степенного закона изменения модуля сдвига по глубине. Решение задачи для изотропного полупространства с неоднородным покрытием при произвольном законе изменения модуля сдвига по глубине покрытия получено Айзиковичем С.М. [5].

Задача активно изучается по настоящее время, в частности, Вонг применил кусочно-линейную аппроксимацию трансформанты ядра для сведения задачи к решению интегрального уравнения [6].

Настоящая работа посвящена задаче кручения круговым штампом полупространства с учетом нелинейности упругих свойств основания. В качестве модели нелинейности используется билинейная модель пластичности.

Благодарность (финансирование)
Работа выполнена при поддержке фонда РНФ 25-19-68068 (Продление 22-19-00732).

Список использованных источников:
[1] E. Reissner [и др.] J. Appl. Phys. 15 (1944) 652-654
[2] I.N. Sneddon. Proc. Glasgow Math. Assoc. 7 (1966) 136–144
[3] Д.В. Грилицкий. Прикладная механика. 7(1) (1961) 89–94
[4] M.K. Kassir. Int. J. Eng. Sci. 8 (1970) 875-885
[5] С.М. Айзикович Кручение круглым штампом неоднородного полупространства. Расчет оболочек и пластин. РИСИ. (1978) 156–169
[6] Tie-Jun Liu [и др.] Mechanics Research Communications. 36 (2009) 322–329

Расчет энергетических барьеров диффузии элементов третьей группы в InAlAs

И.А. Александров* и Д.В. Гуляев
*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, пр. ак. Лаврентьева, 13, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail aleksandrov@isp.nsc.ru*

Гетероструктуры с квантовыми ямами InGaAs/InAlAs согласованные по параметру решетки с подложкой InP перспективны для различных применений в оптоэлектронике, таких как полупроводниковые лазеры, модуляторы, фотонные интегральные схемы. Одним из методов модификации энергии излучения квантовых ям InGaAs/InAlAs является диффузия материалов квантовой ямы и барьера при постростовом отжиге. Для теоретического описания механизмов диффузии в этих материалах на микроскопическом уровне полезны расчеты энергетических барьеров элементарных процессов диффузии для различных механизмов.

В работе проведены расчеты энергетических барьеров диффузии элементов третьей группы в InAlAs по вакансионному и междоузельному механизмам. Расчеты проводились методами теории функционала плотности в приближении обобщенного градиента с использованием пакета программ Quantum Espresso и оптимизированных сохраняющих норму псевдопотенциалов Вандербильта. Расчетная энтальпия смешивания $In_{0.5}Al_{0.5}As$, усредненная для десяти 64-атомных сверхъячеек со случайным расположением атомов In и Al, положительна и составляет ΔH_{mix}=27.8 meV на единицу формулы, что сравнимо с экспериментальным значением 23.6 meV [1].

По результатам расчетов, наиболее энергетически выгодное положение для междоузельного In и междоузельного Ga в InAlAs в зарядовых состояниях 0 и +1 находится в тетраэдрическом междоузлии подрешетки элементов третьей группы. Для междоузельного Al в InAlAs положения в тетраэдрических междоузлиях подрешеток элементов третьей и пятой групп близки по энергии, и в зарядовом состоянии +1 второе положение имеет меньшую энергию.

Энергетические барьеры переходов атомов третьей группы по вакансионному механизму для бинарных соединений InAs и AlAs близки по энергии. Переход атома Al на место вакансии Al в AlAs имеет энергетический барьер 1.70 эВ в зарядовом состоянии –3 и 1.54 эВ в нейтральном зарядовом состоянии. Переход атома In на место вакансии In в InAs составляет 1.81 эВ в зарядовом состоянии –3 и 1.56 эВ в нейтральном зарядовом состоянии. Для тройного соединения InAlAs наблюдается больший разброс энергий переходов. Различные переходы атомов In и Al в InAlAs на место вакансии в подрешетке элементов третьей группы в зарядовом состоянии –3 имеют энергетические барьеры 1.38-1.79 эВ и 1.75-2.30 эВ, соответственно.

Переходы междоузельных атомов третьей группы в соседнее положение имеют энергетические барьеры 0.76-1.02 эВ. Переходы атомов из междоузельного положения в узел подрешетки третьей группы с вытеснением атома Al или In в междоузельное положение энергетические барьеры 0.12-1.56 эВ. Энергетически выгодны переходы с вытеснением атомов Ga атомами In и Al из подрешетки элементов третьей группы в междоузельное положение, а также с вытеснением в междоузельное положение атомов In атомами Al. Наименьшие энергетические барьеры наблюдаются для вытеснения атомов Ga атомами In: 0.32 эВ и 0.12 эВ в зарядовых состояниях +1 и 0. Обратные переходы имеют энергетические барьеры 1.04 и 0.81 эВ.

Список использованных источников:
[1] A. A. Mirtskhulava, L. G. Sakvarelidze, Zh. Fiz. Khim. 51 (1977) 513.

Высокоточный сохраняющий норму сепарабельный псевдопотенциал для рения

А. В. Баглов[1,2]*, Л. С. Хорошко[1,2]
[1]*Белорусский государственный университет, пр-т Независимости, 2, 220030 г. Минск, Беларусь, *e-mail: baglov@bsu.by*
[2]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 г. Минск, Беларусь*

В современной вычислительной физике конденсированного состояния теория псевдопотенциала в сочетании с теорией функционала плотности является основным подходом для исследования структурных, электронных, магнитных, оптических и иных свойств в рамках численного квантово-механического моделирования. Однако вопрос точности псевдопотенциала в прикладных расчетах часто оставался спекулятивным и необъективным. Ситуация изменилась после выхода статьи *K. Lejaeghere et al.* [1], в которой была введена дельта-калибровка (Δ-gauge), позволяющая сравнить между собой различные подходы в рамках теории функционала плотности. Авторы данной работы в своих исследованиях активно используют пакет OpenMX [2, 3], реализующий теорию функционала плотности в сочетании с теорией псевдопотенциала. Согласно данным статьи [1], ультрамягкие псевдопотенциалы в целом позволяют добиться большей точности, что, однако, не всегда справедливо для расчетов элементов с незаполненной d-оболочкой, где предпочтительным может являться псевдопотенциал, сохраняющий норму зарядовой плотности внутри «сердцевины» за счет использования бо́льших градиентов псевдоволновой функции. OpenMX использует сепарабельную форму псевдопотенциала, заключающуюся в представлении нелокального потенциала, действующего на волновую функцию, представляемого в виде комбинации проекционных операторов и локальных потенциалов путем преобразования Клейнмана-Байлендера.

Целью данной работы являлась генерация псевдопотенциала для рения и оценка его точности в рамках дельта-калибровки. Псевдопотенциал включал 5s-, 5p-, 5d-, and 6s-состояния в качестве валентных, радиус обрезания для базисных функций составлял 7,0 Бор. С целью повышения точности и переносимости псевдопотенциала использовали по три проекционных оператора Клейнмана-Байлендера для его частей, зависящих от углового момента электрона (L-components). Генерацию псевдопотенциала проводили с помощью специальной программы ADPACK [4]. Первичное тестирование псевдопотенциала на свободном атоме рения показало корректность заполнения электронной оболочки и положения энергетических уровней. В случае расчета зонной структуры металлического рения наличия ложных состояний (т. наз. ghost or spurious states) не обнаружено. Расчет дельта-калибровки осуществляли с помощью программного обеспечения из [1] после небольшой доработки для запуска на используемой системе. Для сгенерированного псевдопотенциала получено значение дельта- калибровки 0,225 мэВ/атом, что почти шестикратно меньше, чем предлагаемый в комплекте псевдопотенциал с дельта-калибровкой 1,285 мэВ/атом. Отметим, что полученная точность находится на уровне эталонных пакетов, использующих полный потенциал и базис линеаризованных присоединенных плоских волн.

Благодарность (финансирование): Исследования поддержаны БРФФИ (проект № Т25МЭ-007), заданием № 2.14.3 (№ г.р. 20212445) п/пр «Наноструктура» ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии».

Список использованных источников:
[1] K. Lejaeghere [et al.] Science 351 (6280) (2016) aad3000
[2] T. Ozaki. Physical Review B 67 (2003) 155108
[3] T. Ozaki [et al.] Physical Review B 69 (2004) 195113
[4] T. Ozaki [et al.] Computer Physics Communications 182 (6) (2011) 1245–1252

Топологические фазовые переходы в антиферромагнитных топологических изоляторах

А.В. Ерыженков*, А.В. Тарасов, и А.М. Шикин
*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб., д. 7–9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: st037623@student.spbu.ru*

Антиферромагнитные топологические изоляторы (ТИ) класса $MnBi_2Te_4$ представляют собой универсальную платформу для реализации экзотических квантовых фаз, включая аксионные изоляторы [**1**] и магнитные вейлевские полуметаллы [**2**].

Исследование чистого $MnBi_2Te_4$, проведённое в [**1**] путём численного моделирования, показало, что понижение константы спин-орбитального взаимодействия (СОВ) λ_{SOC} в данном материале приводит к топологическому фазовому переходу (ТФП) из топологической в тривиальную фазу. С точки зрения зонной топологической теории такие ТФП должны сопровождаться полным закрытием запрещённой зоны в объёме материала, однако наблюдать исчезновение щели в $MnBi_2Te_4$ не удаётся и минимально достижимая её величина составила порядка единиц мэВ при критерии сходимости 10^{-3} мэВ. При расчёте кристаллов с поверхностью аналогичное поведение было обнаружено и у топологических поверхностных состояний (ТПС), которые обладают собственной запрещённой зоной в силу наличия антиферромагнитного порядка в $MnBi_2Te_4$.

Феномен неполного закрытия запрещённых зон в ТПС может быть связан с наличием гипотетического скалярного аксионного поля, обуславливающего сохранение дираковскими электронами своей ненулевой массы. Если оно действительно существует, то в системах, близких к ТФП, должен наблюдаться ряд эффектов, подлежащих экспериментальной регистрации, например, топологический магнитоэлектрический эффект. Экспериментальная реализация и изучение этих систем, таким образом, представляет собой важную фундаментальную задачу.

В работе [**1**] была предложена система $MnBi_2Te_2Se_2$, где эффективное СОВ несколько ослаблено замещением Te/Se, что привело к состоянию с минимальной величиной запрещённой зоны, приблизительно воспроизводящему состояние, полученное при варьировании λ_{SOC} для чистого $MnBi_2Te_4$. Исследованная в [**2**] комбинированным экспериментально-теоретическим подходом система $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$ демонстрирует ТФП при $x \approx 50\%$. Важное наблюдение состоит в том, что с замещением Mn/Ge постепенно понижается магнитное поле, требуемое для перемагничивания системы в ферромагнитную (ФМ) фазу, чья топологическая фазовая диаграмма допускает существование вейлевского полуметаллического состояния, устойчивого в некотором диапазоне концентраций Ge даже при наличия возмущения, моделируемого вариацией λ_{SOC}. Более детальные расчёты показывают [**3**], что и другие виды возмущений (такие, как приложение одноосных напряжений или беспорядок магнитных примесей) не приводят к немедленному разрушению вейлевской полуметаллической фазы.

Полученные результаты помогают лучше понять механизмы топологических фазовых переходов в этих системах и открывают путь к синтезу материалов с аксионной и вейлевской физикой с перспективами применения в спинтронике.

Благодарность (финансирование): Работа проведена в рамках и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00016).

Список использованных источников:
[1] A.M. Shikin [и др.] Sci. Rep. 13 (2023) 16343.
[2] A.M. Shikin [и др.] Sci. Rep. 15 (2025) 1741.
[3] A.M. Shikin [и др.] (2025) (*to be published*)

Распространение электромагнитных волн в цилиндре, выполненном из материала с потерями

А. В. Дударев, Д. С. Клыгач*
Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), пр. Ленина, 76, 454080 г. Челябинск, Россия
** e-mail: klygachds@susu.ru*

Рассмотрим распространение электромагнитного поля в цилиндре радиуса r, выполненном из материалов с заданными электродинамическими параметрами. Такими как комплексные диэлектрическая и магнитная проницаемость. Электродинамические параметры изменяются по частоте.

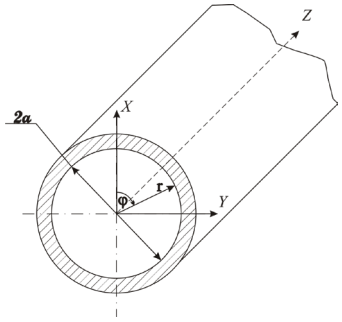


Рисунок 1 Круглый волновод

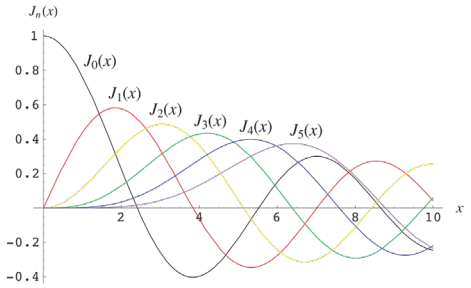


Рисунок 2 Функции Бесселя

Распространение электромагнитного поля внутри цилиндра будет описываться волновым уравнением с заданными граничными условиями:

$$\nabla^2 \dot{H} + \gamma^2 \dot{H} = 0$$

где $\dot{H}$ – комплексная амплитуда магнитного поля;
γ - постоянная распространения.

В общем случае решение уравнения, описывающее поведение амплитуды и фазы магнитного поля внутри цилиндра, будет выглядеть следующим образом:

$$\dot{H} = \dot{H}_0 J_m(\gamma r) cos[m(\varphi - \varphi_0)] e^{-i\beta z}$$

где $J_m(\gamma r)$ - функция Бесселя первого рода порядка m;
β - постоянная затухания.

На основе полученного решения были рассмотрены частные случаи распространения магнитного поля внутри цилиндра в зависимости от частоты распространения поля и параметров материала, из которого выполнен цилиндр. Показано, что при постоянной амплитуде магнитного поля и материале цилиндра выполненного из материала с проводимостью $\sigma \to \infty$ или материала с магнитной проницаемостью $\mu \to \infty$ амплитуда магнитного поля затухает пропорционально экспоненциальному закону при распространении вдоль цилиндра.

В случае, если цилиндр выполнен из материла, который имеет коненное значение диэлектричесакой и магнитной проницаемости, получены формулы ослабления амплитуды магнитной волны.

Исследование коэффициента усиления ГКР-активного слоя системы Mo-Ag на поверхности СИПМ-пипетки

С. А. Кондратьева[1]*, Д. В. Новиков[1], Г. А. Меденков[1], Л. С. Волкова[1,2], А. С. Ерофеев[3], В. С. Колмагоров[3,4], и Ю. Н. Пархоменко[3]
*[1]НИУ «МИЭТ», 124498 г. Москва, Россия, *e-mail: sonyk.220412@yandex.ru*
[2]Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, 115487 г. Москва, Россия
[3]НИТУ «МИСиС», 119049 г. Москва, Россия
[4]Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 г. Москва, Россия

В настоящее время остаются актуальными исследования направленные на раннее выявление заболеваний сельскохозяйственных культур, изучение клеточных процессов в фармацевтике. В этой связи изучаются процессы, происходящие на поверхности и внутри клеток. Так как размер анализируемых объектов мал, востребовано использование стеклянных пипеток с наноразмерным кончиком, которыми можно манипулировать отдельными клетками, визуализировать и анализировать внутриклеточные процессы, методом сканирующей ион проводящей микроскопии (СИПМ). Решающее значение имеют также надежное обнаружение и количественный анализ малых концентраций веществ, вплоть до единичных молекул, что реализуемо нанопипетками с плазмонными наночастицами на поверхности методом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР). Комбинация методов СИПМ и ГКР позволит исследовать клетки in situ, к примеру, реакция клеток опухоли на лечение. Основной задачей при создании таких пипеток является формирование плазмонных частиц на поверхности, которые будут обладать высокой стабильностью во времени и адгезионной прочностью для исследования в растворах. При этом кончик пипетки не должен перекрываться частицами. Формирование пленки системы Mo-Ag на поверхности пипетки методом ионно-плазменного напыления является одним из подходов при решении данных проблем. Плазмонные наночастицы Ag в таких пленках формируются путем термической обработки не посредственно перед использованием.

В данной работе были изготовлены образцы ГКР-пипеток и был произведён теоретический расчет коэффициента усиления сигнала комбинационного рассеяния света в зависимости от размера и расстояния между частицами с использованием уравнения Лапласа (рис. 1).

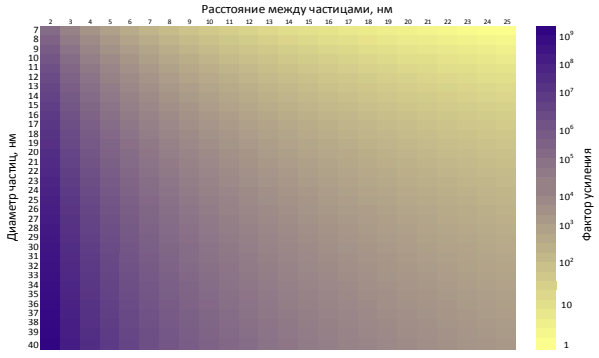


Рисунок 1. Диаграмма зависимости усиления сигнала комбинационного расеяния от размера и расстояния между частицами Ag на тонкой пленке окси-нитрида молибдена для излучения с длиной волны 532 нм

Благодарность (финансирование). Моделирование усиления ГКР-активных СИПМ-пипеток и их изготовление было произведено в рамках гранта Российского научного фонда № 22-19-00824. Формирование пленок с плазмонными наночастицами было проведено в научно-исследовательской лаборатории «Фотонная сенсорика и плазмонные материалы» в рамках государственного задания 2024-2026 FSMR-2024-0012.

Моделирование структурных, электронных и колебательных свойств нанографена легированного атомами азота.

С.А. Кутень[1]*, А.Л. Пушкарчук[1,2], Д.С. Ермак[1], Т.С. Пивоварчик[3], А.А. Хрущинский[1], Н.Н. Дубинецкий[1], Н.И. Волынец[3], и К.Г. Батраков[3]

*[1]Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки,6, 220013 г. Минск, Беларусь, * e-mail: semen_kuten@list.ru*
[2]Институт физико-органической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 13, 220072 г. Минск, Беларусь
[3]Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская, 11, 220030 г. Минск, Беларусь,

Выполнено моделирование методом HF-3C графеновой квантовой точки, легированноой атомами азота (GQD/N). Моднлировались три известные конфигурации в углеродной решетке, такие, как четвертичный N (quaternary N) (или графитовый N), пиридиновый N (pyridinic N) и пирролический N (pyrrolic N) (рисунок 1).

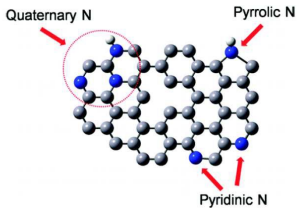


Рисунок1. Три конфигурации дефектов, образующихся при допировании графена азотом

Основной целью расчетов является анализ изменений геометрии, электронной структуры и колебательных свойств данных комплексов

На рисунке 2 представлены результаты расчета атомной структуры соответствующих GQD/N после полной оптимизации их геометрической структуры.

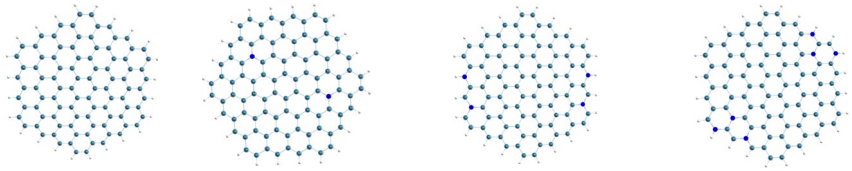


Рис. 2. Атомарное строение изучаемых наноструктур после оптимизации их геометрии. Атомы С – цианового цвета, атомы N – синего, атомы Н – белого

Установлено, что при образовании дефектных графеновых квантовых точек содержащих различные примесные комплексы, состоящих из атомов азота, в запрещенной зоне GQD/N формируются наборы примесных уровней энергетическое положение и локализация которых зависит от атомарной структуры примесного комплекса сформированного при легировании GQD азотом.

Проведена оценка механизма формирования отдельных пиков в пектрах КР при допировании GQD атомами N.

Благодарность (финансирование):
Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проекта Ф23УЗБ-036.

Первопринципные расчеты кубического и тетрагонального оксидов рутения и осмия

А. А. Резник[1,2]*, С. А. Горохов[1,2], и А. А. Резванов[1,2]
[1]*Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», улица Академика Валиева, 6/1, 124460 г. Зеленоград, г. Москва, Россия, *e-mail: reznik.aa@phystech.edu*
[2] *«Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Институтский пер., 9, 141701 г. Долгопрудный, Россия*

Ряд диоксидов переходных металлов, имеющих кристаллическую структуру, близкую к структуре рутила (TiO_2), обладают такой же высокой проводимостью, как и многие металлы. Заметным исключением является диоксид рутения (RuO_2), который с момента его успешного использования в качестве анода при производстве С12 также изучался как катализатор электродных реакций. Многие экспериментальные работы были опубликованы несколько десятилетий назад, а теоретические работы, например, для диоксида осмия (OsO_2), отсутствуют.

Таким образом, появилась возможность устранить пробел и провести теоретическую оценку физических свойств оксидов рутения и осмия. Мы используем квантово-механический подход, который позволяет рассчитать многие характеристики кристаллов с кубиеской и тетрагональной структурой - структурные, электрофизические и термодинамические (рисунок 1).

Все расчеты в настоящей работе проводились с использованием теории функционала плотности (DFT) и базисных наборов плоских волн, реализованных в пакете Quantum Espresso (QE). Для получения гармонических и квазигармонических свойств использовался пакет thermo_pw.

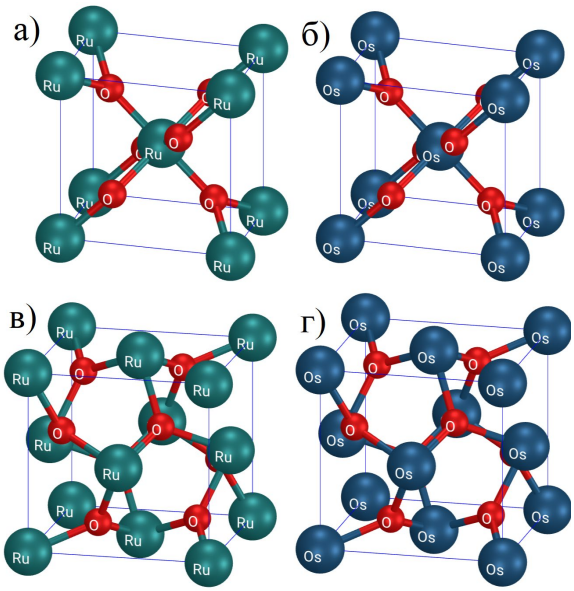


Рисунок 1. Элементарные ячейки, которые рассматриваютсся в работе а) t-RuO_2, б) t-OsO_2, в) c-RuO_2, г) c-OsO_2

Благодарность (финансирование). Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Поворот оси легкой намагниченности в зависимости от концентрации ионов переходных металлов в твердых растворах $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$

А. В. Чернышев[1], Т. И. Тисленко[1,2], Д. А. Великанов[1], Е. М. Мошкина[1], и С. Н. Софронова[1]*

[1]*Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, Академгородок, 50, 660036 г. Красноярск, Россия, *e-mail: ssn@iph.krasn.ru*

[2]*Сибирский федеральный университет, пр. Свободный, 79660041 г. Красноярск, Россия*

В соединениях $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ реализуется конкуренция анизотропий при смеси двух видов магнитных атомов Ni и Co с ортогональными магнитными анизотропиями. В диапазоне высоких концентраций атома Ni (Co) магнитные моменты всех составляющих атомов упорядочиваются параллельно легкой оси атома Ni (Co), тогда как в промежуточном диапазоне концентраций появляется новая фаза из-за конкуренции анизотропий.

Ориентационные исследования намагниченности твердых растворов $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ (x = 0, 0.19; 0.6; 0.93, 2, 3) в малых полях (H = 50 Э), выполненные на вибрационном магнетометре показали, что в составах $Ni_3B_2O_6$, $Ni_{2.81}Co_{0.19}B_2O_6$ ось *c* является осью легкого намагничивания. В составах $NiCo_2B_2O_6$ и $Co_3B_2O_6$ ось *b* является осью легкого намагничивания. В составах $Ni_{2.07}Co_{0.93}B_2O_6$ и $Ni_{2.4}Co_{0.6}B_2O_6$ из-за конкуренции анизотропий наблюдается наклон объемной намагниченности к обеим легким осям чистых компонентов.

Учет спин-орбитального взаимодействия при расчете энергии ферромагнитного состояния с помощью программного пакета Wien2k показывает, что в стехиометрических соединениях $Ni_3B_2O_6$ и $Co_3B_2O_6$ легкая ось намагничивания совпадает с кристаллографическими направлениями *c* и *b*, соответственно, что согласуется с экспериментальными данными.

Расчеты ряда упорядоченных твердых растворов показали, что в составах с большим содержанием кобальта x≥2 магнитным моментам ионов выгодно ориентироваться вдоль оси *b* (рис. 1). В составах $Ni_{1.5}Co_{1.5}B_2O_6$ и $Ni_{2.5}Co_{0.5}B_2O_6$ магнитным моментам ионов выгодно ориентироваться в плоскостях [110] и [011], соответственно (рис. 1), что также согласуется с экспериментальными данными.

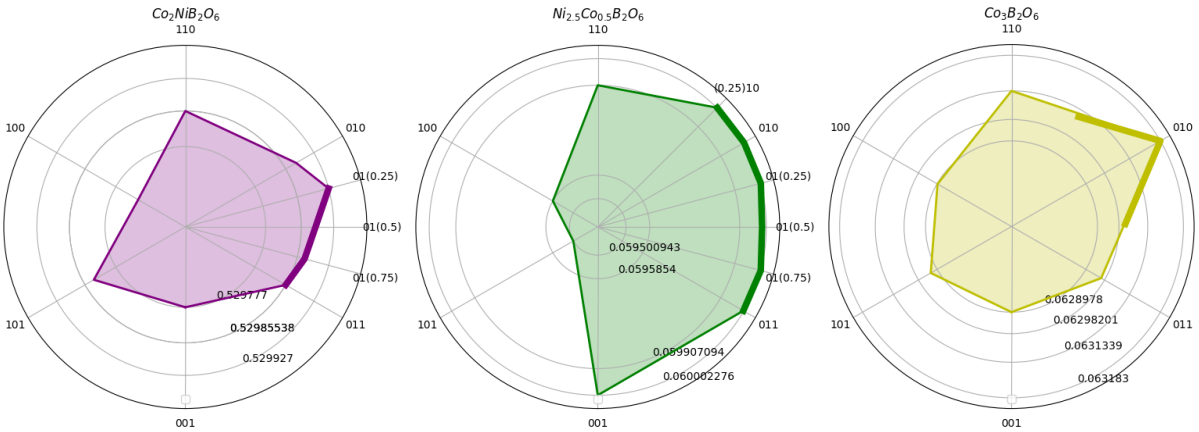


Рисунок 1. Энергии ферромагнитного состояния для различной ориентации магнитных моментов твердых растворов $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ (x=0.5, 2, 3)

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, проект № 23-12-20012 (https://rscf.ru/project/23-12-20012/).

Воздействие внешнего магнитного поля на структуру и свойства вихреподобных магнитных неоднородностей в наномодифицированных плёнках

Р. М. Вахитов и М. А. Филиппов*
*Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076 г. Уфа, Россия, *e-mail: mikhail.filippov.99@mail.ru*

Магнитные скирмионы представляют собой топологически устойчивые вихреподобные неоднородности, которые стабилизируются в магнетиках в основном за счёт взаимодействия Дзялошинского – Мория (DMI) [1]. Но при этом существуют методы стабилизации, основанные на использовании наномодифицированных плёнок. В статье [2] нами было проанализировано взаимное влияние DMI и дефектов типа «потенциальная яма» на устойчивость магнитных скирмионов в ферромагнитном диске. В данной же работе рассматривается влияние внешнего магнитного поля на стабилизированные на дефекте скирмионы. Поле направлено перпендикулярно плоскости плёнки и параллельно намагниченности кора скирмионов.

Все описанные выше исследования проводились методом микромагнитного моделирования в пакете программ OOMMF [3]. Микромагнитная модель представляет собой ферромагнитную плёнку в форме диска (радиус диска R = 300 нм, толщина h = 30 нм) с колумнарным дефектом в центре радиуса R_0. На дефекте скачком меняется величина магнитной анизотропии: на дефекте — $K_{u2} < 0$, вне дефекта — $K_{u1} > 0$.

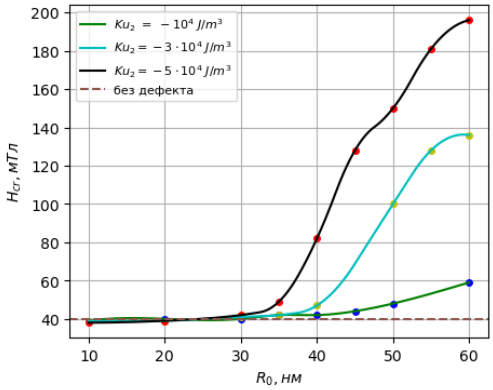


Рисунок 1. График зависимости величины критического поля H_{cr} уничтожения скирмиона от радиуса дефекта R_0

На рисунке показан график зависимости критической величины поля H_{cr}, при котором скирмион разрушается, а диск становится однородно намагниченным, при разных значениях радиуса дефекта R_0. На графике видно, что, начиная примерно с радиуса дефекта $R_0 \approx 25$ нм, критическое поле уничтожения скирмиона начинает возрастать при увеличении глубины потенциальной ямы магнитной анизотропии. При этом величина H_{cr} возрастает быстрее при бóльших по модулю значениях K_{u2}. Из этих данных можно сделать вывод, что наличие дефекта типа «потенциальная яма» оказывает существенное влияние на величину критического магнитного поля уничтожения скирмиона, которое направлено перпендикулярно плоскости плёнки.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение научных исследований лабораториями (№ 075-03-2024-123/1 от 15.02.2024).

Список использованных источников

[1] K. Everschor-Sitte [и др.] J. Appl. Phys. 124 (2018) 240901.
[2] R.M. Vakhitov [и др.] JPCM. 37 (2024) 5.
[3] M.J. Donahue [и др.] OOMMF User's Guide, Version 1.0 Interagency Report – National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1999).

Влияние габаритных размеров углекомпозитного материала на величину накопленной дозы в условиях космического пространства

А. С. Якушевич[1]*, С. И. Романович[2], и С. Б. Ластовский[1]
*[1]ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь, *e-mail: yakushevich@physics.by*
[2]ОАО «Пеленг», ул. Макаёнка, 25, 220114 г. Минск, Беларусь

Благодаря своей легкости и высоким прочностным характеристикам углекопмозитные материалы находят все большее применение в космической отрасли и авиации [1–2]. Одним из требований к их применению является стабильность характеристик материала к воздействию ионизирующих излучений (ИИ) космического пространства (КП). Поэтому данные материалы предварительно испытывают на установках, генерирующих ИИ (ускорители электронов, протонов, ионов и др.). На моделирующих установках (МУ) генерируется анизотропное поле ИИ. В данной работе показаны особенности накопления поглощенной дозы углекомпозитными образцами в изотропных полях ИИ КП, которые следует учитывать при проведении испытаний таких образцов на МУ к воздействию ионизирующих излучений по дозовым эффектам.

Рассмотрены углекомпозитные образцы в форме параллелепидов с различными габаритными параметрами (образцы № 1–3) и в форме диска (образец № 4). Габаритные размеры образцов указаны в таблице. Углекопмозитный материал состоит на 65 % из графитизированного углеродного однонаправленного волокна и на 35 % из эпоксидианового связующего. Плотность материала составляет 1,55 г/см^3

С помощью программном комплексе Geant4 v.11.3 методом Монте-Карло рассчитывались значения накопленной дозы D в каждом образце углекомпозитного материала при изотропном внешнем потоке ИИ. Оценка величины накопленной дозы от электронов D_e и протонов D_p КП проводилась для солнечно-синхронной околокруговой орбиты с высотой орбиты $H = 525$ км и наклонением $i = 98°$ при минимуме солнечной активности.

Из приведенных в таблице результатов видно, что величина накопленной дозы в условиях изотропного поля КП в значительной степени зависит от отношения площади поверхности образца к его объему как для электроного, так и для протоного излучения. Чем эта величина больше, тем большее значение имеет D. При этом если значения S / V для разных образцов оказываются достаточно близкими (образцы № 2–4), то форма и размеры в значительно меньшей степени влияют на значения D.

Таблица 1. Зависимость накопленной дозы от габаритных размеров образцов углекомпозитного материала

Номер образца	Габаритные размеры образца, мм	Объем V, мм^3	Площадь поверхности S, мм^2	S / V	D_e, крад / год	D_p, крад / год
1	90 × 6 × 0,5	270	1176	4,4	33,8	2,77
2	15 × 3 × 3	135	198	1,5	13,5	1,09
3	90 × 10 × 2	1800	2200	1,2	11,7	0,94
4	12,5 × 4 (диск)	491	402	0,8	8,2	0,69

Таким образом при одинаковых условиях эксплуатации за одно и то же время элементы могут получать значительно разную дозовую нагрузку в зависимости от своих габаритных размеров. Этот факт следует учитывать при создания объектов для космической отрасли, а также их испытании на радиационную стойкость на МУ.

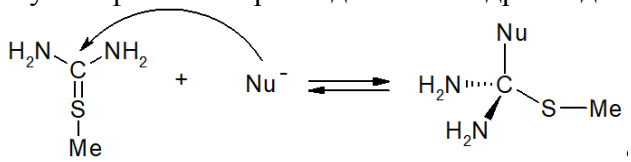
[1] Э. Фитцер. Углеродные волокна и углекомпозиты. Мир (1988)168.
[2] Z. S. Toor. J. Space Techn. 8(1) (2018) 65–70.

Механизм формирования тонкопленочного CuS с позиции нуклеофильного присоединения

А. В. Поздин[1], Н. В. Торопов[1]*, и Л. Н. Маскаева[1,2]
[1]*Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, 620002 г. Екатеринбург, Россия, *e-mail: nikichtor@mail.ru*
[2]*Кафедра химии и процессов горения. Уральский институт ГПС МЧС России, ул. Мира, 22, 620022 г. Екатеринбург, Россия*

Для получения тонких пленок халькогенидов металлов наиболее перспективным среди физических и химических методов является химическое осаждение из водных растворов, отличающееся простотой технологического оформления, высокой производительностью, экономичностью и адаптацией к промышленному производству. В основе метода лежит химическая реакция взаимодействия ионов металла с халькогенизатором в водном растворе. Несмотря на большое количество публикаций по химическому осаждению пленок халькогенидов металлов, до настоящего времени нет единого мнения о механизме процесса их образования.

Современные представления о механизме взаимодействия тиомочевины с солями металлов в процессе химического осаждения базируются на двух основных гипотезах: формировании промежуточных реакционных комплексов N_2H_4CS - Me за счет координационной связи серы с металлом, либо на гидролитическом разложении тиомочевины при нуклеофильном присоединении гидроксид-иона (Nu) [1] по реакции:



Комплекс тиомочевины N_2H_4CS с металлом формируется в результате атаки нуклеофилом Nu атома углерода с последующим разрушением π-системы центрального фрагмента халькогенизатора и последующим разрывом связи C–S с синхронным отщеплением сульфида металла.

Представления об активации тиомочевины с позиций нуклеофильного присоединения гидроксид-иона по тиокарбонильному атому углерода в настоящем исследовании расширены за счет присоединения к N_2H_4CS электронодонорных частиц (SO_4^{2-}, NO_3^-, CH_3COO^-, Cl^-, Br^-), присутствующих в составе солей меди при получении тонкопленочного сульфида меди CuS.

Снижение энергии гидратации анионов $\Delta_{hyd}G^0$ в ряду $SO_4^{2-} \rightarrow NO_3^- \rightarrow CH_3COO^-$ и $Cl^- \rightarrow Br^-$, а также уменьшение радиусов обсуждаемых анионов с гидратной оболочкой, приведенных в таблице 1, способствует замедлению скорости разложения тиомочевины, следовательно, снижению концентрации S^{2-} при фиксированной концентрации соли металла, и, следовательно, замедлению взаимодействия $Cu^{2+} + S^{2-} = CuS$.

Таблица 1. Энергия гидратации ($\Delta_{hyd}G^0$) и радиус гидратированного аниона r_{hyd} [2]

Анион	SO_4^{2-}	NO_3^-	CH_3COO^-	Cl^-	Br^-
$\Delta_{hyd}G^0$, кДж/моль	-1080	-365	-300	-340	-315
r_{hyd}, нм	0.273	0.223	0.217	0.225	0.231

Снижение активности тиомочевины в результате нуклеофильного присоединения кислород- либо галогенсодержащих анионов меди приводит как к замедлению разложения тиомочевины, так и снижению толщины пленки CuS от 0.3 до 0.2 мкм.

Список использованных источников

[1] Ю.Н. Макурин. Промежуточный комплекс в химических. АН СССР УрО (1990) 78.
[2] Y. Marcus. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 87 (1991) 2995–2999.

Multidisciplinary Section

Мультидисциплинарная Секция

Vector magnetometer based on NV color centers in diamond

S.V. Bolshedvorskii [1,2]*, V.V. Soshenko [1,2], I.S. Cojocaru [1,2], S.M. Drofa [1,2,3], A.N. Smolyaninov[1], and A.V. Akimov [1,2,3]
[1]*P.N. Lebedev Institute RAS, Leninskij Prospekt 53, 119991 Moscow, Russia, *e-mail : bolshedvorskijsv@lebedev.ru*
[2]*LLC Diamond Sensors, Narvskaya st., 1A, 125130 Moscow, Russia*
[3]*Russian Quantum Center, Bolshoy Boulevard 30, building 1, 143025 Moscow, Russia*

Nowadays, nitrogen-vacancy color centers (NV centers) in diamond widely used for development quamtum sensors. In particular, a highly sensitive thermometer [1] and a gyroscope [2] have been implemented on their basis, a magnetometer with a sensitivity better than 1 pT [3] has been created in laboratory conditions, and chip versions of the magnetometer are currently being actively developed [4].

The NV center is formed by a nitrogen atom in the substitution position and a vacancy in the neighboring node of the diamond crystal lattice, thus the NV center is an artificial atom "frozen" in the crystal lattice. NV center electron spin state can be polarized and readuot by an optical pumping, electron spin addressed by MW signal. Due to the Zeeman effect ground state energy levels with $m_s \neq 0$ shifts. NV centers can be located in any of the 4 directions in the diamond crystal lattice, therefore, using an ensemble of NV centers makes possible to develop a vector magnetometer.

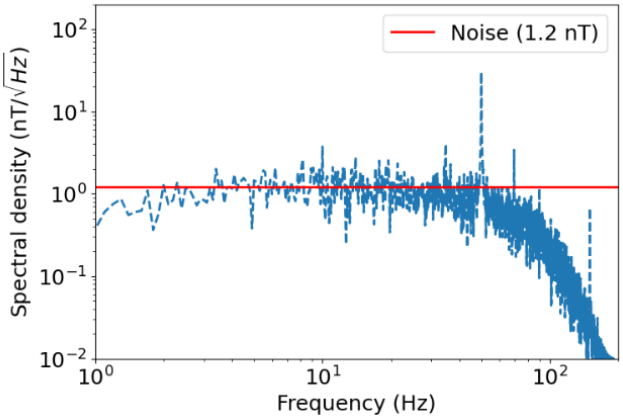


Figure 1. Spectral noise density of NV magnetometer

In this work, we use NV centers in diamond to create a compact vector magnetometer. The magnetometer uses the technique of synchronous detection of conditions for optical detection of magnetic resonances of NV centers in diamond. This technique allows continuous measurements of vector inductions of magnetic fields. The magnetometer has no dead zones and sensitivity about 1.2 nT/√Hz (see Figure 1).

References:

[1] R. Schirhagl [et al.] Annu. Rev. Phys. Chem. 65 (2014) 83–105.
[2] V. V. Soshenko [et al.] Phys. Rev. Lett. 126 (2021) 197702.
[3] T. Wolf [et al.] Phys. Rev. X. 5 (2015) 041001.
[4] D. Kim [et al.] Nat. Electron. Springer US. 2 (2019) 284–289.

Nuclear reaction mechanisms between the boron ores and neutrons/gamma rays

Mengge Dong [1,2]*, Xiangxin Xue [1,2]

[1] *Department of Resource and Environment, School of Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110819, PR China, *e-mail: mg_dong@163.com*
[2] *Key Laboratory of Metallurgical Resources Recycling Science, Liaoning Province, Shenyang 110819, PR China*

For over 70 years, boron- and iron-bearing minerals have been directly utilized in high-value nuclear shielding materials, primarily driven by engineering practice. However, the underlying mechanisms governing their neutron/gamma-ray attenuation remain poorly understood, hindering performance optimization at a fundamental level. In this study, we integrate multidisciplinary theories spanning mineralogy, metallurgy, physics, and chemistry, combining experimental characterization and computational simulations to systematically elucidate the attenuation mechanisms across multiple scales—from elemental composition and microstructure to macroscopic. Our work advances the foundational theory of boron- and iron-based mineral shields and establishes a comprehensive computational framework for their design.

Keywords: Boron- and iron-bearing minerals; Neutron; Gamma-ray; Multiscale attenuation mechanism

The study of volumetric and acoustic properties for binary mixtures of 1-chlorohexane + two hydrocarbons at temperatures between 298.15 K and 318.15 K

D. Drăgoescu[1]*, F. Sîrbu[1], and A. Shchamialiou[2]
[1] *Institute of Physical Chemistry - Ilie Murgulescu, Romanian Academy, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania; *e-mail: ddragoescu@icf.ro*
[2] *Belarusian State University of Food and Chemical Technologies, Department of Heat and Refrigerating Engineering, 3 Schmidt Ave., 212027 Mogilev, Belarus*

The thermophysical properties (densities and speeds of sound) for the binary mixtures of 1-chlorohexane with two hydrocarbons (cyclohexane and *n*-hexane) have been measured over the entire range of composition, at several temperatures from 298.15 K to 318.15 K and atmospheric pressure p = 0.1 MPa.

All the chemical used were commercial products of the good purity: 1-chlorohexane (Aldrich 99%), cyclohexane (Fluka 99.5%) and *n*-hexane (Merck 97%).

The densities and speeds of sound values of the pure components and binary mixtures were measured simultaneously, by means of a digital vibrating-tube densimeter and speed of sound analyser (Anton Paar DSA 5000M), with an accuracy of ± 0.001 K for temperature, ± 0.05 kg·m^{-3} for density and ± 0.01 m·s^{-1} for speed of sound, respectively.

The liquids were dried and stored over 4A molecular sieves and were used without further purification. Experimental densities and speed of sound, of the pure components were in a good agreement with the literature values

The experimental values for densities and speeds of sound, for both systems were correlated by the Jouyban-Acree model with good accuracy

From the experimental results, the excess molar volumes, the partial/apparent molar volumes, the isentropic compressibilities and the excess molar isentropic compressibilities, have been calculated.

A Redlich−Kister polynomial equation was applied in order to correlate the excess properties of the binary mixtures with composition. The correlation parameters were estimated at working temperatures.

The experimental and calculated results are discussed in terms of molecular interactions and structural effects between components of mixtures.

Acknowledgement:
The authors gratefully express their acknowledgement to the Romanian Academy, for the financing the research programme “Chemical thermodynamics and kinetics. Quantum chemistry” of the Institute of Physical Chemistry – Ilie Murgulescu. The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, which allowed for the acquisition of the research infrastructure under POS-CCE O 2.2.1 Project INFRANANOCHEM - Nr. 19/01.03.2009, is acknowledged.

The study of optical and viscometric properties for 1-chlorohexane + two hydrocarbons binary mixtures at different temperatures in the range of 298.15-318.15 K

D. Drăgoescu[1]*, F. Sîrbu[2], and A. Shchamialiou[2]
[1]*Institute of Physical Chemistry - Ilie Murgulescu, Romanian Academy, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania; *e-mail: ddragoescu@icf.ro*
[2]*Belarusian State University of Food and Chemical Technologies, Department of Heat and Refrigerating Engineering, 3 Schmidt Avenue, 212027 Mogilev, Belarus*

The optical and viscometric properties for two binary mixtures of 1-chorohexane with cyclohexane and *n*-hexane, were measured at several temperatures in the range of (298.15 to 318.15) K and atmospheric pressure.

The refractive index was measured by means of a digital automatic refractometer (Anton Paar RXA 170) with accuracy of ± 0.01 K for temperature and of ± 0.000001 for refractive index. For the measurements of dynamic viscosities of pure liquids and their mixtures from (0.3 to 10) mPa·s, we used an Anton-Paar AMVn automated viscometer, which works on the rolling-ball principle.

The model Jouyban-Acree has been used, with good accuracy, for the correlation of experimental data of refractive indices, n_D, and viscosities, η, for both systems at working temperatures.

By using the obtained experimental results, the related excess and deviation quantities, as the deviation in refractive indices, the excess molar refractions, and the deviation in viscosities, were calculated and reported in this work. All these excess properties were correlated with the Redlich-Kister polynomial equation.

The capability of different theoretical (n,ρ) mixing rules (Lorentz-Lorenz, Gladstone-Dale, Arago-Biot, Edwards and Eykman) to predict the refractive index was evaluated.

Some different equations: Grunberg–Nissan, Katti Chaudry, Hind, Dolezalek, and three-body McAllister interaction model, were used to calculate the viscosities values and a comparison with those values with the experimental data was made.

Discussions concerning the experimental and calculated results in relation to the molecular interactions and structural effects between components of mixtures are presented.

Acknowledgement:
The authors gratefully express their acknowledgement to the Romanian Academy, for the financing the research programme “Chemical thermodynamics and kinetics. Quantum chemistry” of the Institute of Physical Chemistry – Ilie Murgulescu. The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, which allowed for the acquisition of the research infrastructure under POS-CCE O 2.2.1 Project INFRANANOCHEM - Nr. 19/01.03.2009, is acknowledged.

Thermophysical properties of amino acids in aqueous D-Fructose solutions at 298.15 K

I. L. Gheorghe[1]*, A. Stefaniu[2], F. Sirbu[1], and C. S. Stoicescu[1]
[1] *„Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, 202 spl. Independentei, P.O.Box. 12-194 060021 Bucharest, Romania, *e-mail: ioana_gheorghe1983@yahoo.com*
[2] *"National Institute for Chemical - Pharmaceutical Research and Development – Bucharest", 112 Vitan Av., 031299 Bucharest, Romania*

The thermophysical properties of amino acids and carbohydrates in aqueous mixtures are important in many domains of applied chemistry and are important for understanding the chemistry of biological systems [1–3]. The interactions between studied compounds are important for understanding the stability of complex organic compounds as polysaccharides and proteins, are implicated in several physiological and biochemical processes in a living cell [4, 5].

The current work presents the physicochemical properties obtained from new measurements of density, speed of sound, and refractive index of Glycine (Gly) and *L*-Alanine (L-Ala) in aqueous D-Fructose solvent.

The density, speed of sound, and refractive index experimental data for Glycine and *L*-Alanine at different molalities between (0.1009 and 0.9754) x 10^{-3} mol·m^{-3} with *D*-Fructose of the 0.5362 x 10^{-3} mol·m^{-3} have been evaluated/ were obtained at four temperatures and atmospheric pressure.

The measured densities, sound speeds, and refractive indices for aqueous studied mixtures have been obtained using an Anton Paar DSA 5000 digital vibrating tube densitymeter (Austria) and GmbH Abbe automatic refractometer apparatus, respectively, at temperature 298.15 K.

The values of apparent molar volumes V_{Φ} for the solutes (Gly) and (L-Ala), and adiabatic compressibility coefficient k_S were computed on basis of the experimental data.

The values of refractive indices of (Gly), and (L-Ala) in aqueous solutions have also been estimated using the Lorentz-Lorenz equation.

The obtained results of thermodynamic properties have been presented graphycally and interpreted at the temperature T = 298.15 K for exemplification for both Gly/L-Ala + D-Fructose studied systems.

Acknowledgement: This contribution was carried out within the research programme "Chemical Thermodynamics and Kinetics. Quantum chemistry" of the "Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, financed by the Romanian Academy (RA). The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, for the acquisition of the research infrastructure under Project INFRANANOCHEM-Nr. 19/01.03.2009, is also gratefully acknowledged

References

[1] K. Gekko. J. Biochem. (Tokyo) 90 (1981) 1643–1652.
[2] B. Paiecz [et al.] J. Solut. Chem. 26 (1997) 621–629.
[3] A. Chaudhari [et al.] Int. J. Quantum Chem. 101 (2005) 97–103.
[4] R. Palani [et al.] Res. J. Phys. 1 (2007) 82–89.
[5] A. Meister. Biochemistry of the Amino Acids, 2nd ed. Academic Press (1965).

The influence of the amino acids on the structural and thermal properties of the hydroxyapatite synthesized from eggshells

A. Sofronia[1], A. Botea-Petcu[1], D. Gheorghe[1], A. Neacsu[1], I. Atkinson[1], C. Marinescu[1]*
[1]*Institute of Physical Chemistry Ilie Murgulescu of Romanian Academy, 202 Spaiul Independentei, 060021, Bucharest, Romania, aalcorinaa@yahoo.com**

Hydroxyapatite ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$), the inorganic part of human bones and teeth, is of interest in various research domains, such as bone tissue engineering, drug carriers, sorbents for dye removal, and catalysts [1–4]. Morphology, surface, and crystalline structure of biomaterials play a significant role in inducing an apatite-like layer formation. This study investigates the effect of four amino acids (AA) on the structural and thermal parameters of nanocrystalline hydroxyapatite (HA) powder consequently impacting the HA biomineralization.

Both charged and polar uncharged AA were used, as follows: glutamine, threonine (neutral, polar AAs), arginine (alkaline AA), and aspartic acid (acidic AA). HA was synthesized by the precipitation method starting from CaO obtained from eggshells in the presence of AAs. Surface and structural modifications of HA in the presence of AAs were examined by BET, X-ray, DLS, and Zeta potential techniques. Thermal properties in terms of temperature and enthalpies of decomposition are reported. The role of different AAs on the thermochemical properties of HA is discussed comparatively, and the proper AA for improving biomineralization of HA is established.

[1] S.V. Dorozhkin, Calcium Orthophosphates in Nature, Biology and Medicine, Materials, 2(2), 2009, 399-498; https://doi.org/10.3390/ma2020399
[2] N. Safitri, N. Rauf, D. Tahir, Enhancing drug loading and release with hydroxyapatite nanoparticles for efficient drug delivery: A review synthesis methods, surface ion effects, and clinical prospects, J Drug Deliv Sci Technol, 2023, 90, 105092, https://doi.org/10.1016/j.jddst.2023.105092
[3]R.Vinayagam, S. Pai, G. Murugesan, T. Varadavenkatesan, K. Kaviyarasu, R. Selvaraj, Green synthesized hydroxyapatite nanoadsorbent for the adsorptive removal of AB113 dye for environmental applications, Environmental Research, 212, 2022, 113274, https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.113274
[4] M. Tavafoghi, M. Cerruti, The role of amino acids in hydroxyapatite mineralization. J. R. Soc. Interface 13: 20160462, 2016, http://dx.doi.org/10.1098/rsif.2016.0462

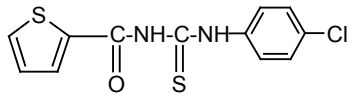
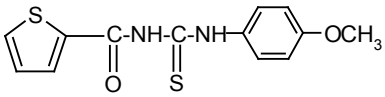
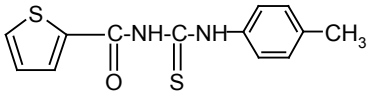
New N-(p-R)-N'-(2-thenoyl)-thiourea compounds: physicochemical investigation and thermal stability study

A. Sofronia[1], C. Munteanu[1], D. Gheorghe[1], A. Neacsu[1], A. Neacsu[1], C. Marinescu[1]*
[1]*Institute of Physical Chemistry Ilie Murgulescu of Romanian Academy, 202 Spaiul Independentei, 060021, Bucharest, Romania, aalcorinaa@yahoo.com**

A large number of thioureide-derived compounds have been already reported for therapeutical activities. In previuos papers, the synthesis and evaluation the „in vitro" antimicrobial activity of 4 new N-(p-R)-N'-(2-thenoyl)-thiourea compounds have been presented [1, 2]. The aim of this study was to investigate their thermal stability and melting kinetics. The thermal behavior and kinetic study of these thioureide-derived compounds is of interest in establishing the processing and storage parameters in the pharmaceutical industry.

Molecular structure of the pharmaceutical compounds is shown in Table 1. Fourier Transformation Infrared Spectroscopy (FTIR) and Scanning Electron Microscopy (SEM) techiques were used for structural and morphological characterization. Coupled thermal analysis (differential scanning calorimetry - thermogravimetry - DSC / TG) techniques showed that these compounds are thermally stable up to ~ 160 °C; above this temperature endothermic processes attributed to melting and decompositions, respectively, are observed. I-chlorine compound undergoes a melting process without decomposition with a melting heat of 21.964 kJ/mol. The onset and peak decomposition temperatures are very close for II-methoxy and III-methyl compounds, though the methoxy radical stabilize the structure, decomposition enthalpy being higher for II-methoxy (ΔH = 69.187 kJ/mol) than III-methyl (ΔH = 52.523 kJ/mol) compound. Kinetic and thermodynamic parameters for the melting process were obtained.

Table 1. The thioureas chemical structures

Chemical Structure	Chemical Name	R	Label
	N-(p-chlorophenyl)-N'-(2-thenoyl)- thiourea	p-chlorophenyl	I-chlorine
	N-(p-methoxyphenyl)-N'-(2-thenoyl)-thiourea	p-methoxyphenyl	II-methoxy
	N-(p-methylphenyl)-N'-(2-thenoyl)- thiourea	p-methilphenyl	III-methyl

References
[1] C.D. Badiceanu [et al.] FARMACIA 57:4 (2009) 473-478.
[2] C.D. Badiceanu [et al.] Farmacia 57:3 (2009) 339-345.

A calorimetric study of 4-hydroxy-L-proline (L-hydroxyproline)

A. Neacsu[1]*, D. Gheorghe[1], C. Marinescu[1], and A. M. Sofronia[1]
[1]*Institute of Physical Chemistry - Ilie Murgulescu of the Romanian Academy,*
*202 Spl. Independentei, 060021 Bucharest, Romania, *e-mail: anna_matache@yahoo.com*

4-hydroxy-L-proline (L-hydroxyproline) is a neutral heterocyclic and the most prevalent amino acid found in animal proteins. It is a non-proteinogenic amino acid, synthesized by hydroxylation of proline during collagen biosynthesis [1]. This cyclic hydroxyl-amino acid is one of the main scaffolds of collagen. The collagen stability is highly affected by the prolyl ring conformations which confer the ability of L-hydroxyproline to form different intramolecular hydrogen bonds caused by the capacity of reorientation of both −COOH and imine groups [2]. 4-hydroxy-L-proline is an effective therapeutic agent for chronic pain, inflammation, and wounds being widely used in pharmaceuticals and also in food, cosmetics, biomedical industries, photography and the daily chemical and beauty industry [3-4].
Differential scanning calorimetry, combustion calorimetry and FTIR characterization of 4-hydroxy-L-proline were performed. A micro-combustion calorimeter was used to obtain the standard molar enthalpy of formation of 4-hydroxy-L-proline. The standard molar energy of combustion, was determined by combustion calorimetry in a static bomb and then the standard molar enthalpy of formation in crystalline phase, was calculated. We also intended to bring more information about 4-hydroxy-L-proline thermal behaviour, thus, thermodynamic properties such as enthalpy of fusion ($\Delta_{fus}H$), melting temperature (T_{fus}) were carried out by differential scanning calorimetry (DSC).

Using 4-hydroxy-L-proline as a biomarker may provide useful information for both biomedical research and drug development [5], thus, reliable data on thermodynamic properties of this amino acid are required. Despite the possible biological activity of 4-hydroxy-L-proline, its enthalpy of formation is not reported in the literature.
Knowledge of this property provides the suitable conditions for the synthesis of new compounds in which 4-hydroxy-L-proline is involved.

References

[1] Q.Bing [et al.] Molec. Med. Rep. 10 (2014) 1157-1163.
[2] S. Mata [et al.] Phys. Chem. Chem. Phys. 11 (2009) 4141-4144.
[3] M.M.Hans [et al.] Eur. Pat. Appl. 10 (1996)14480-5.
[4] X. Zhou [et al.] Org. Biomol. Chem. 10 (2012) 8314-20.
[5] A.K.Srivastava [et al.] Curr. Prot. Peptide Sci.17 (2016) 596-602.

Efficient recovery of metalic lithium by electrodeposition from organic media

M.T.Olaru[1], A.M.Popescu[1]*, M.Ioța[1], I.Atkinson[2], A.Matei[1]
[1]*National Research & Development Institute for Non-ferrous and Rare Metals-IMNR, 102 Blv.Biruinței, 077145J u.Ilfov, Romania;* e-mail: popescuamj@yahoo.com*
[2] *"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry", 202 Spl.Independenței, 0600021 Bucharest, Romania*

Efficient recovery of metallic lithium by electrodeposition from organic media is a subject of increasing importance, particularly in the context of lithium-ion batteries and other energy storage technologies. The process typically involves extracting lithium ions from solutions and depositing them as metallic lithium on an electrode surface using electrochemical techniques. This recovery method can be more energy-efficient, environmentally friendly, and selective compared to other traditional methods.The efficient recovery of metallic lithium (Li) by electrodeposition in a glove box, from organic media such as dimethyl sulfoxide (DMSO) with lithium nitrate ($LiNO_3$) as a lithium source is a key research topic in the field of energy storage, particularly for lithium-ion batteries. DMSO is an attractive solvent due to its high dielectric constant, ability to dissolve a wide range of salts, and relatively low volatility. The use of $LiNO_3$ in DMSO forms a lithium-rich electrolyte. The concentration of $LiNO_3$ plays a significant role in the efficiency of the process, as it governs the ionic conductivity of the electrolyte and the driving force for lithium deposition and we chossed a 10 wt% $LiNO_3$. We used a Parstat 4000 potentiostat, a Cu working electrode,a Pt as a quasi reference electrode and Pt foil as a counter electrode. The potential applied to the working electrode should be carefully controlled to ensure that lithium deposits (proved by cyclic volttametry measurements) rather than unwanted side reactions (demonstrated by FTIR measurments on the electrolyte before and after electrodeposition) like oxygen evolution or solvent decomposition occur. The applied potential must be controlled also to ensure that lithium metal is deposited efficiently taking in account that the overpotentials for lithium electrodeposition in DMSO-based systems are typically higher compared to aqueous systems due to the difference in solvation dynamics of lithium ions in organic solvents. The rate of lithium deposition is dependent on the applied current density. High current densities might lead to the formation of rough or dendritic lithium deposits (which can affect the efficiency and long-term stability of the deposition process) and also can make decomposition of DMSO. The structure, morphology and composition of the electrodeposit deposit was determine by XRD, SEM and ICP-OES. The morphology of lithium deposits plays a key role in determining the efficiency of the process. Smooth, compact lithium deposits are more desirable because they minimize the risk of short-circuiting or mechanical failure in applications such as batteries. Typical deposition efficiencies can range from 60% to 90%, depending on how well all these factors presented above are optimized.

Acknowledgement: This work was funded by the European Union, from the Horizon Europe program, grant agreement number 101069789: project RELiEF – Recycling of Lithium from secondary raw materials and further. Views and opinions expressed are however those of the author(s) only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Climate, Infrastructure and Environment Executive Agency (CINEA). Neither the European Union nor the granting authority can be held responsible for them.This work was also supported by a grant of the Ministry of Research, Innovation and Digitization, CNCS/CCCDI - UEFISCDI, project , project number PN-IV-P8-8.1-PRE-HE-ORG-2023-0130, within PNCDI IV, ctr. no. 48PHE/2024 -RELiEF.



Figure 1. Lithium deposit

Density measurement and equation of state for normal hexane

A. Shchamialiou[1]*, V. Samuilov[1], N. Holubeva[1], A. Paddubski[1], and D. Drăgoescu[2]
[1]*Belarusian State University of Food and Chemical Technologies, 3 Schmidt Ave., 212027 Mogilev, Belarus, shche70@mail.ru**
[2] *"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, 202 Splaiul Independentei, 12-194 Bucharest, Romania*

n-Hexane is widely used as a raw material in the chemical industry and as a solvent in extraction processes. In recent years, *n*-hexane has also been considered as a promising natural working fluid for implementing the organic Rankine cycle and high-temperature heat pumps. The equations of state for wide temperature and pressure ranges, are required for designing various process and power equipment. Quite reliable equations of state have been previously developed for *n*-hexane.

Nevertheless, in recent years, new experimental data on the thermodynamic properties of *n*-hexane have been obtained. In addition, we have measured the density of liquid n-hexane in a large range of temperature (298.15–433.15) K and at pressures up to 100.1 MPa, with an uncertainty of no worse than 0.03%. The use of new data makes it possible to increase the accuracy and expand the pressure range in which the equation of state describes the thermodynamic properties of *n*-hexane.

Based on our own obtained results for density of *n*-hexane and the new data on thermodynamic properties from other authors, the values of the coefficients and parameters of the equation of state were obtained, in the form of which was proposed earlier in [1]. The equation describes the reduced Helmholtz energy $\alpha(\rho, T)$ presented as the sum of two parts – ideal gas part $\alpha^0(\delta, \tau)$ and residual part $\alpha^r(\delta, \tau)$:

$$\alpha(\delta, \tau) = \frac{a(\rho, T)}{RT} = \frac{a^0(\rho, T) + a^r(\rho, T)}{RT} = \alpha^0(\delta, \tau) + \alpha^r(\delta, \tau),$$

where $\delta = \rho/\rho_c$ is the reduced density, $\tau = T_c/T$ is the inverse reduced temperature, ρ and ρ_c are the density and critical density, T and T_c are the temperature and critical temperature, R is the gas constant.

The residual part of the reduced Helmholtz energy is determined by the equation:

$$\alpha^r(\delta, \tau) = \sum_{i=1}^{6} N_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} + \sum_{i=7}^{11} N_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \exp\left(-\delta^{l_i}\right) + \sum_{i=12}^{17} N_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \exp\left[-\eta_i (\delta - \varepsilon_i)^2 - \beta_i (\tau - \gamma_i)^2\right],$$

where N_i, d_i, t_i, l_i, η_i, ε_i, β_i, γ_i are parameters and coefficients of the equation of state.

The ideal gas part of the reduced Helmholtz energy is expressed by the relation:

$$\alpha^0(\delta, \tau) = \frac{h_0^0 \tau}{RT_c} - \frac{s_0^0}{R} - 1 + \ln\frac{\delta\tau_0}{\delta_0\tau} - \frac{\tau}{R}\int_{\tau_0}^{\tau}\frac{C_p^0}{\tau^2}d\tau + \frac{1}{R}\int_{\tau_0}^{\tau}\frac{C_p^0}{\tau}d\tau,$$

where δ_0 and τ_0 are the reduced density and the inverse reduced temperature at reference temperature and pressure, h_0^0 and s_0^0 are the enthalpy and entropy at reference temperature and pressure, C_p^0 is the isobaric heat capacity of an ideal gas.

The deviations of the experimental data from the values calculated using the obtained equation of state are at the level of uncertainties of these data. In our study it is shown the possibility of using the equation of state to describe the thermodynamic properties of *n*-hexane, such as density, speed of sound, isobaric and isochoric heat capacities, isobaric expansion coefficient, isentropic and isothermal compressibility coefficients, in a wider range of pressures, up to 1000 MPa, as well as in the temperature range from the triple point to 573 K.

References

[1] A.A. Gerasimov [et al.] Vesti Gazovoy Nauki 1 (2018) 117.

Thermodynamic and acoustic investigations of manganese salts in aqueous mixtures with applications in the natural mineral waters

F. Sirbu[1]*, A. C. Ion[2], G. Martinica[2], and I. Ion[2]
[1] *"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry of Romanian Academy, Department of Chemical Thermodynamics, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania,*
**e-mail: sflorinela@yahoo.com*
[2]*National University of Science and Technology Politehnica Bucharest, Department of Analytical Chemistry and Environmental Engineering, 1-7 Polizu St., 011061 Bucharest, Romania*

In this work, the density, ultrasonic speed, and refractive index of aqueous binary blends of manganese sulphate and manganese chloride at 298.15 K and atmospheric pressure have been measured.

The concentrations for the two manganese-based salts, chloride and sulfate, in aqueous systems vary between ($7x10^{-6}$ and 0.05) mol kg^{-1}, and were chosen as close as possible to the natural concentrations of mineral waters in the environment.

Densities and ultrasonic speeds of aqueous solutions of $MnCl_2$ and $MnSO_4$, have been measured by vibrating tube densitometer Anton Paar 5000 M with a precision of $\pm 10^{-6}$ g·cm^{-3}. The refractive indices were measured using an Anton Paar GmbH Abbe automatic refractometer with a precision of $\pm 10^{-6}$. The temperature of the samples was controlled within ± 0.001 K to measure the density and speed of sound, and with ± 0.01 K for refractive index determination, respectively.

From obtained experimental data, the apparent molar volume, the acoustic impedance, the isentropic compressibility coefficient, the space-filling factor, the specific refraction, the relaxation strength, the intermolecular free length, the surface tension, and the solvation number were estimated.

A graphically comparison of the obtained properties, for both studied mixtures, at the temperatures T = (293.15 and 298.15) K was made. This comparison gives informations about the nature and the extent of the interactions between the constituent molecules of the studied liquid blends.

The results obtained are very important in optimizing bottled mineral waters treatment processes.

Acknowledgement: This contribution was carried out within the research programme "Chemical Thermodynamics and Kinetics. Quantum chemistry" of the "Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, financed by the Romanian Academy (RA). The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, for the acquisition of the research infrastructure under Project INFRANANOCHEM-Nr. 19/01.03.2009, is also gratefully acknowledged.

References:
[1] K. Rathina [et al.] IJEAT, 8 (2019) 151-159.
[2] T. Vielma [et al.] J. Solution Chem. 53 (2024) 203–227.
[3] S. Baluja [et al.] J. Basic Appl. Sci. 2 (2012) 63-73.

Study of optical and viscometric properties for binary (cyclohexane and n-propylbenzene/izo-propylbenzene) mixtures, at 298.15 K temperature and pressure of 0.1 MPa

F. Sirbu* and D. Drăgoescu

*"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry of Romanian Academy, Department of Chemical Thermodynamics, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania, *e-mail: sflorinela@yahoo.com**

This work presents new experimental data of viscosities and refractive indices at the temperature of 298.15 K and atmospheric pressure, for two binary systems such as cyclohexane + n-propylbenzene and cyclohexane + iso-propylbenzene, respectively.

The study of viscometric and optical properties, as well as their thermodynamic properties, have a great importance in understanding the nature and molecular interactions between components in blends.

The viscometric and optical properties for binary mixtures of cyclohexane with two alylbenzenes, as *n*-propylbenzene and *iso*-propylbenzene, were measured at temperature of 298.15 K and p = 0.1 MPa. The both mixtures, were investigated for whole range of compositions in molar fractions, from (0 to 1).

The measurements of viscosities of pure liquids and their mixtures were carried out by means of an Anton-Paar AMVn falling ball automated viscometer.

The refractive indices were measured using an Anton Paar Abbemat RXA 170 digital Refractometer, with a precision of $\pm 2 \times 10^{-5}$ n_D.

By using the obtained results, the related excess or deviation quantities, as deviation in viscosities and deviation in refractive indices, excess molar refractions, and, were calculated and reported in this work. All these excess properties were correlated with the Redlich-Kister equation. The measured values of viscosities and refractive indices were correlated with the well-known models; the capability of different theoretical (n,ρ) mixing rules to predict the refractive index was evaluated.

Different equations, as Grunberg–Nissan, Katti-Chaudry, Hind, Dolezalek, and three-body McAllister interaction model, have been used to calculate the viscosities values and a comparison with those values with the experimental data was made.

These results have importance in chemical industry with different applications such as, the designs of processes of mass transfer, fluid flow, and the phase separation processes design but and waste materials recycling [1-3].

Acknowledgements: This contribution was carried out within the research programme "Chemical Thermodynamics and Kinetics. Quantum chemistry" of the "Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, financed by the Romanian Academy (RA). The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, for the acquisition of the research infrastructure under Project INFRANANOCHEM-Nr. 19/01.03.2009, is also gratefully acknowledged.

References:

[1] J. M. Prausnitz [et al.] Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, Prentice Hall, PTR (1998).
[2] S. Fujii [et al.] J. Chem. Thermodyn. 27 (1995) 1319–1328.
[3] I. Gascon [et al.] J. Solution Chem. 31 (2002) 905–915.

Thermodynamic analysis in mixtures of glycine and aqueous NaCl solvent at 298.15 K and atmospheric pressure

F. Sirbu[1]*, A. Stefaniu[2], C. Stoicescu[1], A. C. Ion[3], G. Martinica[3], and I. Ion[3]
[1] *"Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry of Romanian Academy, Department of Chemical Thermodynamics, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania, *e-mail: sflorinela@yahoo.com*
[2]*National Institute of Chemical - Pharmaceutical Research and Development, 112 Calea Vitan St., Bucharest, Romania*
[3]*National University of Science and Technology Politehnica Bucharest, Department of Analytical Chemistry and Environmental Engineering, 1-7 Polizu Str., 011061 Bucharest, Romania*

The refractive indices and densities in aqueous ternary mixtures of Glycine in NaCl have been measured experimentally at 298.15 K.

For NaCl salt the composition was of (0, 0.5 and 1) mol/Kg in molality, and for Glycine the studied molalities were (0; 0.5; 1; 1.5 and 2) mol kg-1, at temperature of 298.15 K.

The refractive index was measured using an Anton Paar GmbH Abbe automatic refractometer with a precision of ± 0.0001.

The density of samples were measured with an Anton Paar DSA 5000 M digital (Austria) analyser with a precision of ± 0.00001 $g \cdot cm^{-3}$, and the temperature of the samples was controlled within ± 0.001 K.

The values of the molar refraction, the apparent molar volume, and the apparent molar volume at infinite dillution of glycine were computed on basis experimental results.

The solvation number N_S of glycine in water and of glycine in NaCl + water was also calculated versus NaCl molality for binary and ternary mixtures.The obtained results show that the size of a glycine molecule is larger in a solution with higher NaCl concentration.

The volumetric properties of amino acid in water and water + electrolyte mixtures are discussed in terms of the dehydration effect of the electrolytes upon the amino acid, of the charge, size and hydrogen bonding effect. Morever, by density functional theory (DFT) at wB97XD/6-31 G + (d, p) level a computational investigation in water and in vacuum of dipole moment and molecular polarizability is presented for glycine as solute.

Acknowledgement: This contribution was carried out within the research programme "Chemical Thermodynamics and Kinetics. Quantum chemistry" of the "Ilie Murgulescu" Institute of Physical Chemistry, financed by the Romanian Academy (RA). The financial support of the EU (ERDF) and Romanian Government, for the acquisition of the research infrastructure under Project INFRANANOCHEM-Nr. 19/01.03.2009, is also gratefully acknowledged.

References:
[1] M.K. Khoshkbarchi [et al.] Ind. Eng. Chem. Res., 35 (1996), 2735 - 2742.
[2] D. Kumar, Can. J. Chem. 77 (1999), 1288 - 1294.
[3] A. Soto [et al.] Biophys. Chem. 74 (1998) 165 – 173.
[4] Y. Akhtar Int. J. Sci. Tech. Soc. 3 (2015), 6 - 9.
[5] H. Shekaari [et al.] J. Sol. Chem., 45 (2016) 624 – 663.

Material-related problems of neuromorphic technologies

N.A. Sobolev*

Departamento de Física & i3N, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal,
** e-mail: niksob@gmail.com*

Advancements in materials science have been instrumental in the progression of neuromorphic technologies. However, existing neuromorphic hardware often relies on rigid and energy-intensive fabrication processes. There is an urgent need for innovative materials and device architectures that can bridge this gap while ensuring scalability and eco-friendliness.

The inevitability of a revolution in electronic technologies is dictated by the emergence of new paradigms of electronics which cannot be implemented on existing hardware. Traditional computing architectures struggle with energy efficiency, scalability, and adaptability, particularly as AI and data-intensive applications demand greater computational power. In the past decades, electronics and telecommunications have become a new global energy consumer. Machine learning tends, in the limit, to consume all the power produced in the world, and this development model is costly, inefficient and unsustainable. Neuromorphic computing, inspired by biological neural networks, presents a promising alternative by enabling real-time, low-power processing. Crucial for this development are materials being able to implement bio-inspired functions. However, existing neuromorphic hardware often relies on rigid and energy-intensive fabrication processes, limiting material flexibility, integration potential, and environmental sustainability. There is an urgent need for innovative materials and device architectures that can bridge this gap while ensuring scalability and eco-friendliness.

Thus, the presentation is dedicated to the material problems of neuromorphic technologies and aims to review a wide range of theoretic and experimental results in this field.

Acknowledgement:

This research was supported by the Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT) and the Ministério da Educação e Ciência (MEC) of Portugal through the projects i3N (UIDB/50025/2020, UIDP/50025/2020 and LA/P/0037/2020).

Carrier medium for hybrid nanofluids with heat transfer behaviour

S. Z. Mirzaev[1], K. B. Egamberdiev[1,2], O.V. Trunilina[1]*, and B.A. Allaev[1]
[1]*Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov Academy of Sciences of Uzbekistan, 33 Durmon Yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan, *e-mail: ov_trunilina@iplt.uz*
[2]*University of Geological Sciences, 64 Olimlar St., 100164 Tashkent, Uzbekistan*

A hybrid nanofluid heat carrier, owing to its enhanced thermal conductivity and heat transfer properties compared to a conventional monofluidic heat carrier, has the potential to significantly improve heat exchange efficacy [1]. A hybrid nanofluid comprises two or more distinct types of nanoparticles dispersed in a base fluid. An important parameter for technology of the heat transfer process is the sedimentation stability, which is tuned by modification. To improve the stability of hybrid nanofluids, ionic or nonionic surfactants - molecules possessing both hydrophobic and hydrophilic segments with a pronounced solubility in polar solvents such as water - are commonly employed as stabilizing agents. The efficacy of these surfactants in enhancing the stability of nanofluids containing metal oxide nanoparticles depends not only on the type, dispersion, and concentration of both the nanoparticles and the surfactant but also on the critical micelle formation concentration (CCMF) of the surfactant, which is temperature-dependent. In this study, TiO_2 (SigmaAldrich, 100 nm), Al_2O_3 (Alpha, 100 nm), and SiO_2 nanoparticles synthesized at the Ion-Plasma & Laser Technology Institute named after U.A. Arifov [2] were utilized. The nanoparticle size was characterized using the NanoSight LM10 instrument (Malvern Panalytical) at a wavelength of 405 nm, employing nanoparticle tracking analysis (NTA) in solutions diluted to 5×10^8 particles/mL following a preliminary ten-minute sonication at a frequency of 44 kHz. The concentration of metal oxide nanoparticles in the hydrosol ranged from 3 to 10 wt.%. Polyethylene glycol (PEG) was used as a nonionic surfactant, while sodium alkylbenzenesulfonate served as an ionic surfactant. The surfactant concentration was varied within the CCMF range, ensuring it remained above the Krafft temperature and below the lower permissible turbidity temperature threshold (Table). The obtained data reveal a correlation between the nature of the surfactant and the sedimentation stability of the nanofluid. The effects of ionic and nonionic surfactants differ significantly. During heat transfer, an increase in temperature leads to a rise in the CCMF of the ionic surfactant due to the disaggregating effect of thermal motion, whereas the CCMF of the nonionic surfactant decreases as a result of dehydration of the oxyethylene chains. The stabilizing effect of the ionic surfactant at concentrations below the CCMF arises from the adsorption of individual surfactant molecules onto the surface of TiO_2 and SiO_2 nanoparticles, facilitating the formation of a stable nanofluid even at elevated SiO_2 nanoparticle concentrations. Conversely, for nonionic surfactants, stability is achieved at concentrations exceeding the CCMF, suggesting a distinct stabilization mechanism. In this case, the adsorption-solvation factor ensures the stability of the dispersed system through the formation of multilayer protective shells characteristic of nonionic surfactants. Owing to the unique stabilization mechanisms of metal oxide hydrosols, their properties can be effectively leveraged for a broad range of practical applications [3].

Table. Metal oxide nanoparticle nanofluids sedimentation stability conditions of depending on CCMF

N/N	1	2	3	4
1	Nanoparticle	Al_2O_3	TiO_2	SiO_2
2	Size, nm	100	100	100±20
3	Concentration, wt.%	3-10	3-6	3-6
4	Surfactant	nonionic	ionic	ionic
5	Condition of stability	≥ CCMF	< CCMF	< CCMF

References

[1] J.E. Manikanta [et al.] Iran J. Sci. Technol. Trans. Mech. Eng. 49 (2025) 67–79.
[2] M.Sh. Kurbanov [et al.] J. Nanopart. Res. 25 (2023) 202.
[3] U. Yokubov [et al.] J. Chem. Tech. & Met. 58 (2023) 932-936.

Measurement of magnon spectrum features of amorphous ferromagnets by small-angle neutron scattering method

L.A. Azarova[1,2]*, K.A. Pschenichniy[1], O.I. Utesov [1,3], and S.V. Grigoriev[1,2]
[1] *Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of NRC "Kurchatov Institute", 1 Orlova Roscha, 188300 Gatchina, Russia,*e-mail: loveazarova@gmail.com*
[2] *Saint Petersburg State University, 7-9 Universitetskaya Embarkment, 199034 Saint Petersburg, Russia*
[3] *Center for Theoretical Physics of Complex Systems, Institute for Basic Science, 34126 Daejeon, Republic of Korea*

Amorphous magnetic materials, valued for their low coercive fields (e.g., in transformer cores), exhibit complex interplay between structural disorder and magnetic behavior. While progress has been made in understanding static spin clusters in these systems, their dynamic properties - particularly magnetic excitations and magnon dispersion - remain poorly explored [1]. The morphology-dependent response of spin clusters to external fields, coupled with unresolved correlations between structural and magnetic disorder, highlights critical gaps in knowledge. To bridge this gap, we employ polarized neutron small-angle scattering (SANS) combined with an inclined magnetic field configuration - an indirect yet precise method - to study spin wave spectra and excitations, enabling detailed characterization of dynamic processes in amorphous magnetic systems.

The dispersion of spin waves in an amorphous ferromagnet can be described through the model of a ferromagnet with random anisotropy: $\epsilon(q) = Aq^2 + g\mu_B H + \delta\omega(q)$, where $\delta\omega(q)$ is a linear in $|q|$ additive [1-3]. In this paper, we investigate the temperature dependence of the energy characteristics in the spin wave spectrum of the amorphous ferromagnetic alloy $Fe_{48}Ni_{34}P_{18}$ and show that it is possible to obtain information not only about the spin-wave stiffness, but also about the characteristic random anisotropy constant that determines the appearance of the additive $\delta\omega(q)$. We use the method of small-angle scattering of polarized neutrons to prove the significance of the additional term $\delta\omega(q)$ in the dispersion. The measurements were carried out at different values of the external magnetic field H and the neutron wavelength λ. The neutron scattering map is a circle of a certain radius centered at the point $q = 0$. The spin-wave stiffness A is extracted directly from the λ-dependence of the radius of this circle. The spin-wave stiffness A of an amorphous alloy decreases slightly from 140 to 110 meV Å^2 with an increase in temperature in the range of 50 to 300 K. The field dependence of the radius demonstrates the presence of an additive $\delta\omega(q)$ in the form of an energy gap, which is practically independent of field and temperature. Therefore, the experiments have revealed an internal "effective energy gap" associated with random anisotropy in the spin wave spectrum of the $Fe_{48}Ni_{34}P_{18}$ alloy over a wide range of temperatures and magnetic fields. The "gap" value of 0.015 meV was measured with an accuracy of 0.002 meV, which is a record achievement in terms of its accuracy. The presence of a linear additive in the spectrum of spin waves is experimentally demonstrated, confirming the validity of the "random anisotropy theory" for amorphous ferromagnets [3].

Acknowledgement. This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under Agreement No.075-15-2022-830 dated 27 May 2022 (continuation of Agreement No.075-15-2021-1358 dated 12 October 2021). Contribution to the work of O.I. Utesov was supported by the Russian Science Foundation (grant No.22-22-00028).

References:
[1] R. S. Iskhakov [et al.] JETP Lett. 72 (2000) 304.
[2] V. A. Ignatchenko [et al.] Zh. Eksp. Teor. Fiz. 72 (1977) 1005.
[3] S. V. Grigoriev [et al.] J. Exp. Theor. Phys. 137, 463 (2023).

Application of ultrasonic vibrations for fabrication lead-ree ferroelectric ceramics

V.V.Rubanik[1]*, V.K. Frolov[1], A.D. Shilin[1], V.V. Rubanik jr.,[1] and C. A. Peláiz-Barranco[2]
[1]*Institute of Technical Acoustics of the National Academy of Sciences of Belarus, General Lyudnikov Ave. 13 , 210009 Vitebsk, Belarus, *e-mail: ita@vitebsk.by*
[2]*Grupo de Materiales Ferroicos, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 10400 La Habana, Cuba*

Stoichiometric mixtures of the initial NBT and (1-x)NBT-xBT powders obtained after synthesis were subjected to ultrasonic mechanical activation in distilled water for 30 minutes at a frequency of ~22 kHz with a generator power of 2 kW. The granulometric study results demonstrated that the degree of particle agglomeration in the powder subjected to ultrasonic treatment decreased. The average particle agglomerate size of the original powder was 67.5 μm, the average particle size was 5.7 μm after ultrasonic treatment.

Ultrasonic pressing of the synthesized powder was carried out using a manual hydraulic press at frequency of ~ 22 kHz with a generator power of 0.4 kW. The pressing force was 35 kPa.

The dielectric constant of the synthesized piezoceramics for samples of each composition increased as a result of the application of ultrasonic vibrations during the mechanical activation and pressing of the powder (Figure 1).

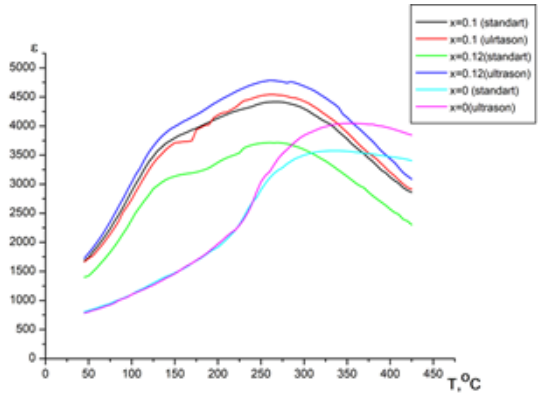


Figure 1. Temperature dependence of dielectric constant ε

The greatest increase in the dielectric constant value was observed for the composition with x=0.12.

Thus, the application of ultrasonic vibrations at the stage of mechanical activation and pressing allows us to obtain NBT and (1-x)NBT-xBT ceramic samples with a dielectric constant exceeding the permeability of samples obtained by standard solid state reaction method.

Acknowledgement. The work is carried out with the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (project T23KUB-023).

The evaluation of the thermal stability of quercetin following accelerated electron beam (e-beam) irradiation

A. Neacsu, C. Marinescu, A.M. Sofronia, and D. Gheorghe*
*Institute of Physical Chemistry - Ilie Murgulescu of the Romanian Academy, 202 Spl. Independentei, 060021 Bucharest, Romania, *e-mail: gheorghedanny2@gmail.com*

The quercetin is a natural flavonoid found in vegetables, fruits and grains. It is know of antioxidant properties and has been studied for various health benefits.

The thermal stability of quercetin is crucial for considering its use in food, pharmaceutical, or nutraceutical applications, especially when it is exposed to certain conditions, such as radiation. The sterilization method that uses high-energy electrons (e-beam) is employed to eliminate microorganisms, including bacteria, viruses, and fungi of the product or material. This method is commonly used in the medical device industry, food processing, and pharmaceuticals. In this context, clearly labeling the maximum acceptable dose (e.g., "MAXIMUM 50 kGy" supplied to the Radiation Technology Center (RTC) [1]) is critical for ensuring safe handling, processing, and monitoring.

Two different calorimetric techniques DSC8500 (power-compensated differential scanning calorimeter supplied Perkin Elmer) and simultaneous TG–DSC SETSYS Evolution 17 analyser (from Setaram) were used to investigate the thermal stability (temperature and enthalpy of transformations, and mass loss) of the quercetine. Discussions about e-beam effects upon the the physicochemical properties and thermal stability of studied quercetin were made both before and after irradiation.

The conducted studies enable the conclusion that quercetin in the solid state show resistance to ionizing radiation at a typical sterilization dose of 25 kGy and this technique can be utilized safely for the sterilization and decontamination of these compounds. No changes of their thermal behavior were observed after irradiation with a dose up to 50 kGy which indicates that this quercetin can be exposed to radiation sterilization in solid state.

References:

[1] https://www.steris-ast.com/wp-content/uploads/2020/03/57-Overview-of-an-e-beam-irradition-validation-of-healthcare-products.pdf

Использование методов рассеяния нейтронов на выведенных пучках для прикладных исследований

Е. В. Алтынбаев[1,2]*, С. С. Мохова[2], и К. В. Гоголинский[2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская набережная, д. 7–9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия, *e-mail: altynbaev_ev@pnpi.nrcki.ru**
[2]*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Орлова Роща, д.1, 188300 г. Гатчина, Россия*

Методы рассеяния нейтронов на выведенных пучках являются мощным инструментом для исследования структуры и динамики материалов на атомном и молекулярном уровнях. Эти методы широко применяются в физике конденсированного состояния, химии, биологии и материаловедении. Основная идея заключается в анализе взаимодействия нейтронов с веществом, что позволяет получать информацию о структуре, магнитных свойствах и других характеристиках материала.

Основные методы рассеяния нейтронов в области материаловедения включают:

1. Дифракция нейтронов используется для изучения кристаллической структуры материалов. Ввиду нулевого заряда, нейтроны рассеиваются на атомных ядрах, в результате, анализ дифракционной картины позволяет определить положение атомов в кристаллической решетке, в том числе их смещение относительно невозмущенного состояния. Данный метод особенно полезен для изучения легких элементов (например, водорода), которые слабо рассеивают рентгеновские лучи, а также поиска различных изотопов.
2. Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) применяется для исследования наноструктур, таких как полимеры, коллоиды, биологические макромолекулы. Метод МУРН позволяет изучать объекты и неоднородности в материалах размером от 1 до 1000 нм.
3. Методы нейтронной визуализации (радиография и томография) используется для исследования материалов и их неоднородностей на масштабах от 30 мкм до 1000 см.

Использование такой особенности нейтрона, как ненулевой спин, позволяет эффективно исследовать не только атомную, но и магнитную структуру вещества. Кроме того, высокая проникающая способность нейтрона, в силу его нулевого заряда, предоставляет уникальные возможности по неразрушающему контролю объемных образцов, например, изделий аддитивных производств. Возможность изотопного контрастирования позволяет эффективно контролировать процессы заводораживания и окисления материалов.

Передача единицы плотности жидкости эталонным средствам измерений

Н.В. Баковец*, К.В. Козадаев

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 г. Минск, Республика Беларусь, *E-mail: BakavetsNV@bsu.by*

Национальный эталон единицы плотности жидкости (далее - эталон) был создан в соответствии с заданием 2.14: «Разработать и создать национальный эталон единицы плотности жидкости» научно-технической подпрограммы «Эталоны Беларуси» ГНТП «Разработка и изготовление эталонов Беларуси, уникальных приборов и установок для научных исследований («Эталоны и научные приборы»). Эталон предназначен для воспроизведения, хранения единицы плотности жидкости и передачи единицы плотности жидкости методом гидростатического взвешивания. Эталонной мерой является сфера кремниевая массой 1 кг.

При передаче единицы плотности эталонам 0-го и 1-го разряда действительное значение плотности ($\rho_Д$, кг/м^3) на установленной отметке шкалы вычисляют по формуле:

$$\rho_Д = \frac{(M_{АВ}+m')\cdot(\rho_{пж}-e_ж)}{((M_{АВ}-M_{АЖ})+m)\cdot(1+\beta_{ар}(t_{ном}-t_{пж}))} + e, \qquad (1)$$

Не исключенную систематическую погрешность (НСП) (Θ, кг/м^3) передачи единицы плотности жидкости определяют по формуле:

$$\Theta = \pm\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\Theta_i^2}, \qquad (2)$$

Среднее квадратическое отклонение (СКО) результатов измерения рассчитывают по формуле:

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(\rho_i-\overline{\rho_j})^2}{n-1}}, \qquad (3)$$

где $\overline{\rho_j}$ – результат измерения j-ой входной величины (среднее арифметическое исправленных результатов наблюдений) вычисляют по формуле (4), 10^{-3} кг/м^3:

$$\overline{\rho_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\rho_i}{n}, \qquad (4)$$

НСП передачи единицы плотности жидкости по приведенной модели составила 2,1·10^{-3} кг/м^3, СКО – 3,14·10^{-3} кг/м^3 в диапазоне измерений от 650 до 2000 кг/м^3, что позволяет передавать единицу плотности жидкости эталонным средствам измерений 0-го и 1-го разрядов.

Список использованных источников

[1] Н. Баковец [и др.] Журнал Белорусского государственного университета. Физика 3 (2022) 113-119.

[2] ГОСТ OIML R 111-1 — 2009 «Государственная система обеспечения единства измерений. Гири классов E_1, E_2, F_1, F_2, M_1, M_{1-2}, M_2, M_{2-3} и M_3. Часть 1. Метрологические и технические требования».

Применение μSR-метода для исследования магнитных свойств вещества

С.И. Воробьев*, Е.В. Виноградов, А.Л. Геталов, В.С. Лобин, Е.Н. Комаров, С.А. Котов
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Орлова роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия,
**e-mail: Vorobyev_SI@pnpi.nrcki.ru*

Приводятся сведения о μSR-установке [1], предназначенной для исследования распределения магнитных полей в исследуемых образцах методом вращения спина мюона (μSR-метод). Установка имеет высокую степень однородности магнитного поля в месте расположения исследуемого образца. Компенсация рассеянных магнитных полей до уровня ~ 10^{-2} Гс.

На мюонном пучке синхроциклотрона СЦ-1000 НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ регулярно проводятся эксперименты по исследованию магнитных материалов с помощью μSR-метода. В частности, в настоящее время традиционная μSR-методика используется для исследования наноструктурных материалов.

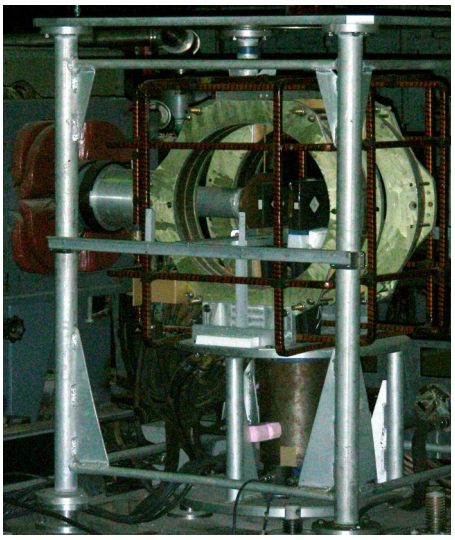


Рисунок 1. Фото μSR-установки, расположенной на выходе мюонного канала синхроциклотрона СЦ-1000.

Основные параметры μSR-установки:

1. Установка позволяет проводить μSR-исследования на образцах с поперечными размерами, вписывающимися в окружность диаметром 3-6 см и толщиной по пучку ≥ 4 г/см^2 в диапазоне температур 10-300 К со стабильностью температуры в данном интервале ± 0,1 К.
2. На установке можно проводить исследования как в нулевом магнитном поле, компенсируя рассеянные поля кольцами Гельмгольца до уровня ~ 0,05 Гс, так и во внешнем магнитном поле (поперечном или продольном) в диапазоне 5-1,5 кГс. Однородность внешних магнитных полей в объеме 200 см^3 не хуже 10^{-4}; что позволяет вести измерения при скоростях релаксации не менее 0,005 мкс$^{-1}$.

С помощью данной μSR-установки возможно решать такие задачи как:

– исследование магнитных свойств гомогенных медно-марганцевых сплавов [2];
– исследование сплавов со случайным конкурирующим взаимодействием [3];
– исследование мультферроиков [4-10];
– исследование магнитных свойств наноструктурных материалов (в частности, проводятся исследования феррожидкостей, эластомеров) [11-13].

[1] С.Г. Барсов [и др.] ПТЭ 50(6) (2007) 36-42.
[2] С.Г. Барсов [и др.] ФТТ 49(9) (2007) 1660-1663.
[3]. С.Г. Барсов [и др.] ФТТ 49(8) (2007) 1421-1426.
[4]. С.И. Воробьев [и др.] Письма в ЖЭТФ, 91(10) (2010) 561-566.
[5]. С.Г. Барсов [и др.] Известия РАН. Серия физическая 74(5) (2010) 738-740.
[6]. С.И. Воробьев [и др.] ФТТ 55(3) (2013) 422-430.
[7]. С.И. Воробьев [и др.] ФТТ 55(3) (2013) 422-430.
[8]. С.И. Воробьев [и др.] ЖЭТФ, 150(6) (2016) 1170-1178.
[9]. Д.С. Андриевский [и др.] Письма в ЖЭТФ 106(5) (2017) 275-281.
[10]. С.И. Воробьев [и др.] Письма в ЖЭТФ 110(2) (2019) 118-125.
[11]. М. Балашою [и др.] Письма в ЖЭТФ 88(3) (2008) 243-247.
[12]. T.N. Mamedov [и др.] Journal of optoelectronics and advanced materials 17(7-8) (2015) 1086-1091.
[13]. S.I. Vorob'ev [и др.] Magnetochemistry 7 (2021) 104.

Низкоэнергетическое циклическое индентирование для оценки усталостных характеристик металлов

А.П. Крень[1]*, Т. Жанг[2], Г. А. Ланцман[1], и О. В. Мацулевич[1]
[1]*Институт прикладной физики НАН Беларуси, ул. Академическая, 16, 220072 г. Минск, Республика Беларусь, *e-mail: alekspk@mail.ru*
[2]*Юго-восточный университет, г.Нанкин, провинция Цзянсу, Китайская Народная Республика*

Оценка усталостных свойств металлических материалов стандартными методами требует времени и дорогостоящих экспериментов. В этой связи создание применимых в реальных условиях эксплуатации методов экспресс-оценки усталостной выносливости и долговечности представляет большой интерес. Попытки установить связь между такими параметрами, как твердость и усталостная долговечность достаточно описаны в литературе [1-3]. Однако они показывают, что одного испытания на твердость недостаточно. В настоящей работе показана возможность использования инструментального динамического микроиндентирования, осуществляемого в циклическом режиме с энергией удара не более 2,5 мДж, для получения дополнительных параметров материала, связанных с долговечностью. Энергия удара при измерениях выдерживается постоянной и определяется массой индентора и его начальной скоростью.

На рисунке 1 показано изменение характера диаграммы нагружения «контаткное усилие P – глубина внедрения h» в зависимости от числа циклов нагружения, производимого в одной и той же точке, для стали с твердостью 27,1 HRC.

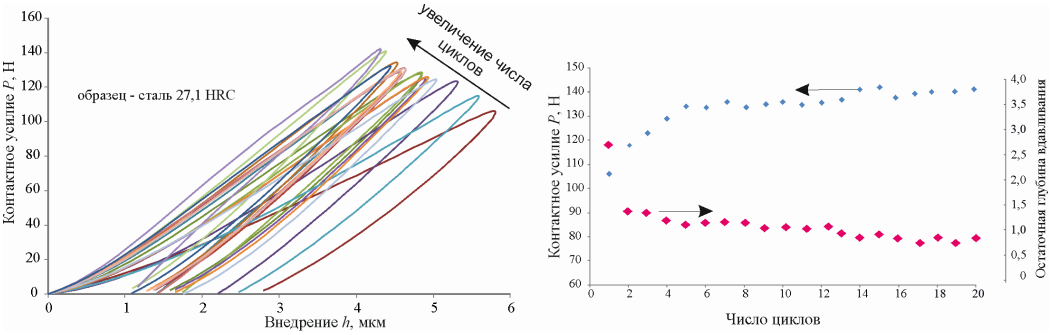


Рисунок 1. Изменение кривой нагружения и ее параметров

В работе показано, что для оценки усталостных свойств металлов целесообразно использовать такие показатели, как глубина остаточного отпечатка, макимальное контактное усилие и ширина петли гистерезиса при динамическом внедрении в зависимости от числа циклов. Описание изменения этих параметров возможно с помощью степенных законов. При этом показатели степени в уравнениях имеют хорошую связь с усталостными свойствами сталей, использующихся для изготовления напорных трубопроводов.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (Грант Т25КИ-004 «Исследование механизма накопления повреждений при индентировании сталей напорных трубопроводов для прогнозирования их малоцикловой усталости»

Список использованных источников:
[1] M.L. Roessle [и др.] Int. J. Fatigue 22 (2000) 495–511.
[2] Y. Murakami [и др.] Fatigue 16 (1994) 163–182.
[3] P. Starke [и др.] Mater. Test 51 (2009) 261–268.

Применение бидоменных кристаллов ниобата лития для измерения магнитострикции

И. В. Кубасов*, А. В. Турутин, А. М. Кислюк, В. В. Куц, Э. Э. Максумова, М. Д. Малинкович, и Ю. Н. Пархоменко

НИТУ «МИСИС», Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1, 119049 г. Москва, Россия,
**e-mail: kubasov.ilya@gmail.com*

Магнитострикция является фундаментальным параметром, который определяет магнитоупругие свойства материалов и играет важную роль в устройствах, в которых используются функциональные свойств тонких магнитных слоев. Точные знания о магнитострикции необходимы для проектирования и оптимизации магнитоэлектрических датчиков, магнитострикционных актюаторов, спинтронных устройств и других магнитных систем. Однако экспериментальное определение магнитострикционных свойств, особенно в тонкопленочных материалах, является достаточно сложной задачей, так как неминуемо связано с необходимостью разделения механических свойств пленки и подложки. Структура «пленка – подложка» представляет собой биморф с сильно различающимися толщинами слоев, и приложение внешнего магнитного поля к нему приводит в общем случае к изгибной деформации со сложной формой поверхности, часто седлообразной. Результирующая деформация является комбинированным эффектом магнитострикции пленки и механического сопротивления подложки. Существуют подходы, позволяющие осуществить пересчет изгибной деформации структуры «пленка – подложка» в магнитострикционный коэффициент пленки, однако для их применения необходимо измерить этот изгиб, например, интерферометрическими методами. Необходимость применения дорогостоящего оптического оборудования делает измерение магнитострикции менее доступным.

В данной работе предлагается расчет полевой зависимости магнитострикции из магнитоэлектрического коэффициента узких биморфных консолей, содержащих в качестве пьезоэлектрической подложки бидоменный кристалл ниобата лития. Благодаря монокристалличности и коммерческой доступности механические характеристики кристаллов ниобата лития обладают воспроизводимостью, не уступающей таковой у кремниевых подложек, что выгодно выделяет этот материал на фоне сегнетокерамик семейства PZT. При этом выраженные пьезоэлектрические свойства позволяет регистрировать электрический отклик на изгиб в широком диапазоне деформаций и частот. Это позволяет, единожды откалибровав характеристики подожки (пьезоэлектрический коэффициент и упругую податливость), использовать её затем многократно для анализа магнитострикционных свойств тонких пленок без необходимости в дорогостоящем интерферометрическом оборудовании. В работе дается сопоставление результатов измерения изгибной деформации и полевых зависимостей магнитоэлектрического, пьезомагнитного коэффициентов, а также магнитострикции на примере структуры «бидоменный ниобат лития – метглас», приводится алгоритм расчета магнитострикции по данным измерения магнитоэлектрического коэффициента, предлагается теоретическое обоснование методики.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-49-10017, https://rscf.ru/project/24-49-10017/ .

Гибридные наноматериалы на основе функционализированных нанопластин оксида графена для устройств электроники

А. В. Кухто[1]*, и Т. А. Павич[2]
[1]*Институт ядерных проблем Белгосуниверситета, ул. Бобруйская, 11, 220006 г.Минск, Беларусь, *e-mail: al.kukhta@gmail.com*
[2]*Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр.Независимости, 70, 220072 г.Минск, Беларусь*

Нанопластины графена и других 2D материалов находят широкое применение в устройствах электроники. Функционализация нанопластин различными атомами и молекулами позволяет изменять их свойства в широких пределах. Особый интерес вызывает функционализация органическими материалами [1-3], выбор которых, так же как их свойств, необычайно широк. В настоящем докладе представлены свойства нанопластин оксида графена, функционализированного органическим комплексом европия, а также линейными ароматическим аминами и диаминами.

Полученный в результате функционализации оксида графена (GO) комплекс GO–$Eu(BQ)_2(NO3)_2$ (BQ – дихинолин дикарбоновой кислоты) использует огромную поверхность оксида графена для увеличения его стабильности и оптического поглощения. Оказалось, что пленки из этого материала обладают уникальными свойствами: высокой люминесцентной способностью и одновременно высокой электропроводностью, близкой к электропроводности чистого оксида графена. Как правило, электропроводные материалы не обладают люминесценцией или она очень слаба, а люминесцирующие материалы не проводят электрический ток. Наш материал состоит из графена, функционализированного органическим комплексом европия, у которого люминесценция происходит на внутренних переходах иона европия. Это свойство европия, а также наличие экранирующей органической оболочки ответственно за то, что тушение люминесценции сильно затруднено.

Функционализация нанопластин оксида графена линейными молекулами паратерфенила с одним или двумя аминами на концах позволяет получить стабильные пористые пленки без заметного ухушения электропроводности.

В докладе представлены результаты исследования их спектрально-люминесцентных свойств и теоретического моделирования электронных свойств в рамках программы Гауссиан на ДФТ уровне, а также перспективы их практических применений.

Список использованных источников:

[1] A. Kukhta [и др.] Appl.Nanosci. 12 (2022) 665-671.
[2] A. Kukhta [и др.] PSS. A 219 (2022) 2100492.
[3] A. Kukhta [и др.] Photonics 10 (2023) 1295.

Разработка научно-исследовательских станций на выведенных нейтронных пучках силами НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

С. С. Мохова[1*] и Е. В. Алтынбаев[1,2],
*[1]НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Орлова Роща, д.1, 188300 г. Гатчина Россия, *e-mail: mokhova_ss@pnpi.nrcki.ru*
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская набережная, д. 7–9, 199034 г. Санкт-Петербург, Россия

Научно-исследовательские станции на выведенных нейтронных пучках – это специализированные объекты, которые используются для изучения свойств материалов, биологических образцов и других объектов с помощью нейтронов. Нейтроны, как нейтральные частицы, обладают уникальной способностью глубоко проникать в материалы, что делает их мощным инструментом для исследований в физике, химии, биологии, материаловедении и других науках.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – один из ведущих научных центров России, который играет ключевую роль в развитии научной инфраструктуры и создании уникальных экспериментальных установок. Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова, входящий в состав НИЦ «Курчатовский институт», является важнейшим элементом этой инфраструктуры. Его деятельность сосредоточена на фундаментальных и прикладных исследованиях в области ядерной физики, нейтронной физики, физики элементарных частиц, материаловедения и биологии.

Производственный и кадровый потенциал учреждения позволяет производить в научных и коммерческих целях уникальное научное оборудование для научно-исследовательских станций:

– нейтронные суперзеркальные поляризующие элементы;
– нейтроноводные тракты различной геометрии;
– оптические элементы на основе нейтрон-отражающих наноструктурированных покрытий;
– флипперы и комплектующие магнитных систем;
– источники холодных нейтронов с применением водорода и дейтерия;
– детекторы нейтронов на основе изотопов ^{3}He и ^{6}Li;
– регистрирующую электронику.

Структура и колебательные свойства кремния, легированного диспрозием

Х.С. Далиев[1], Ш.Б. Утамурадова[2], Ж.Ж. Хамдамов[2], Ш.Б. Норкулов[2]*
[1]Филиал НИУ "МЭИ" в г. Ташкенте, ул. Ёгду, 1, 100175 г. Ташкент, Узбекистан,
**e-mail:nshb19990@gmail.com*
[2]НИИ физики полупроводников и микроэлектроники при НУУз, ул. Янги Олмазор, 20, 100057 г. Ташкент, Узбекистан

В работе представлены результаты комплексного анализа структуры и колебательных свойств образцов кремния (n-Si), легированных диспрозием (Dy), полученных методом термической диффузии при температуре 1200–1373 K в течение 40–50 часов. Исследования проводились с использованием Рамановской и ИК-Фурье спектроскопии, а также микроскопических методов: АСМ и СЭМ/ЭДС.

Рамановская спектроскопия показала усиление основного кристаллического пика при 523,93 $см^{-1}$ и снижение интенсивности аморфных мод при 127,16 и 196,24 $см^{-1}$, что свидетельствует о повышении кристалличности и снижении дефектности. Дополнительный пик при 307,94 $см^{-1}$ указывает на формирование нанокристаллитов Dy_2O_3 [1-2] (рис.1).

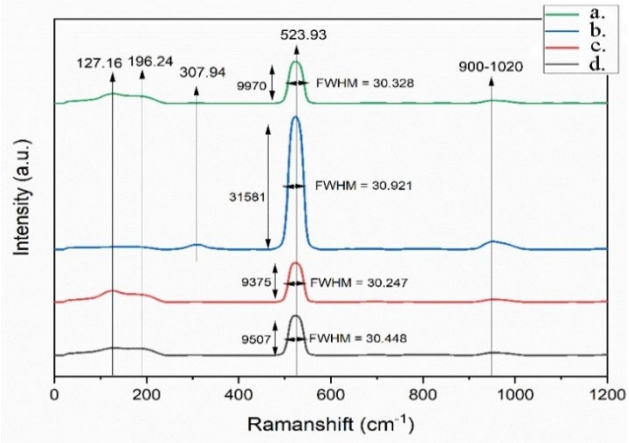


Рисунок 1. Спектры комбинационного рассеяния исследованных образцов: ***a.*** *n-Si, легированный диспрозием (<Dy>), термообработанный при 1373 K в течение 50 часов с последующим быстрым охлаждением и удалением слоя толщиной 15 мкм;* ***b.*** *n-Si, легированный диспрозием (<Dy>), термообработанный при 1373 K в течение 50 часов с последующим быстрым охлаждением;* ***c.*** *n-Si (контрольный образец), термообработанный при 1373 K в течение 50 часов с последующим быстрым охлаждением; d. n-Si (исходный материал).*

ИК-Фурье спектры образцов n-Si<Dy> выявили новые полосы поглощения при 516,71 и 805 $см^{-1}$, а также локальные моды в диапазоне 1950 –2250 $см^{-1}$, связанные с образованием дефектов и взаимодействием Dy-Si [3-4].

Методом АСМ было установлено снижение шероховатости поверхности: максимальные отклонения высоты уменьшились с 10–12 нм до 6–8 нм, что указывает на сглаживание поверхности и уменьшение микронеровностей.

СЭМ-изображения показали образование пористой структуры, изменение границ слоёв и наличие объёмных дефектов. ЭДС подтвердила присутствие Dy и неравномерное распределение на поверхности. Образование фаз $DySi_2$ -x и $SiDy_x$ также подтверждено.

Комплексное исследование показало, что легирование диспрозием улучшает структурные и оптические свойства кремния, способствует образованию новых фаз и снижению дефектов, что делает n-Si<Dy> перспективным материалом для полупроводниковой электроники и фотоники.

Список использованных источников:

[1] V. Mankad [и др.] J. Appl. Phys. 112 (2012) 54318.
[2] T. Liu, [и др.] Micromachines 12 (2021) 429.
[3] K.S. Daliev [и др.] East Eur. J. Phys. 2 (2024) 283.
[4] K.S. Daliev [и др.] East Eur. J. Phys. 4 (2024) 311-321.

Установка малоуглового рассеяния нейтронов на компактном нейтронном источнике

К. А. Павлов*, Н. А. Коваленко, и С. В. Григорьев
НИЦ «Курчатовский институт» - Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, мкр. Орлова роща, д.1, 188300 г. Гатчина, Россия,
**e-mail: fairy.neutrons@yandex.ru*

Методы нейтронного рассеяния являются важным инструментом исследований в современной физике твёрдого тела и комплементарных областях науки. В числе наиболее востребованных техник выделяют малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН), характеризующее ядерную и магнитную структуру вещества на нано- и субмикромасштабе. Актуальными примерами применения метода МУРН служат определение магнитной структуры соединений, перспективных для разработки материалов для магнитной памяти, или наблюдение структурных эффектов, потенциально полезных для построения систем ионного транспорта и хранения.

Эта работа представляет собой физическое обоснование возможности реализации метода МУРН в условиях компактного нейтронного источника. Компактные источники нейтронов (КИН) ускорительного типа – это новейшее мировое течение в области нейтронного приборостроения [1]. Источник такого вида представляет собой лабораторию из нескольких установок, реализующих различные нейтронные методы исследований, и, хотя уступает несколько порядков интенсивности современным установкам мега-класса, однако имеет светосилу, достаточную для проведения широкого класса востребованных экспериментов. Работа ведётся авторами в рамках разработки проекта российского КИН DARIA – импульсного источника на сильноточном низкоэнергетичном (13МэВ, 100мА) протонном ускорителе с бериллиевой мишенью [1-3].

Для реализации метода МУРН в условиях компактного источника нейтронов предложена экспериментальная схема, обеспечивающая регистрацию малоуглового рассеяния по методу времени пролёта на ограниченной рабочей полосе длин волн. В программном пакете McStas [4] создана модель разрабатываемой установки и сделаны численные оценки измерительного диапазона, достижимого на установке, а также средней плотности нейтронного потока в позиции образца, которая непосредственно обуславливает скорость набора статистики. Для реализации метода установка использует лишь часть спектра нейтронного излучения в диапазонах длин волн 2÷8 Å или 6÷12 Å с разрешением по длине волны $\Delta\lambda \approx 0.14$ Å. Такое решение является ключевым для маломощного источника, так как позволяет использовать максимальную возможную частоту повторения импульсов, и, таким образом, поднять среднюю по времени мощность/интенсивность источника. Показано, что метод может быть реализован со светосилой до 10^6 н/(с·см^2) в диапазоне переданных импульсов $3\cdot10^{-3} \div 0.5$ Å^{-1} с разрешением $3\cdot10^{-3}$ Å^{-1} [5]. Для верификации расчётов выполнено моделирование эксперимента по рассеянию на твёрдых контрастных наносферах различного диаметра 8 нм и 80 нм, что демонстрирует экспериментальные возможности установки [6].

Список использованных источников

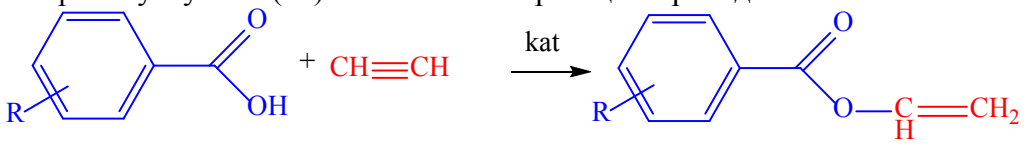
[1] К. Павлов [и др.] Кристаллография 67(1) (2022) 5-20.
[2] С. Григорьев [и др.] Известия РАН 87(11) (2023) 1526-1533.
[3] Т. Кулевой [и др.] ПТЭ 67(1) (2024) 16-26.
[4] P. Willendrup [и др.] JNR 22(1) (2020) 1-16.
[5] К. Павлов [и др.] Поверхность 7 (2023) 1-9.
[6] K. Pavlov [и др.] J. Surf. Inv. 18(1) (2024) 1-9.

Реакция винилирования ароматических карбоновых кислот ацетиленом в гомогенно-каталитических условиях

A.Б.Parmanov[1,*], S.Nurmanov[1], L.Khoroshko[2,3], O.Ruzimuradov[4]
[1]*Department of Organic and Oil & Gas Chemistry, Faculty of Chemistry, National University of Uzbekistan, 100174 Tashkent, Uzbekistan.*
[2]*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 220013 Minsk, Belarus*
[3]*Faculty of Physics, Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus*
[4]*Turin Polytechnic University in Tashkent, 100095 Tashkent, Uzbekistan*

Винил эфиры карбон кислот широко используются в органической химии в качестве промежуточных реагентов. Они применяются как промежуточные вещества в реакциях полимеризации, гидрирования и взаимного циклования.

В данной работе реакции винилирования карбоновых кислот ацетиленом проводились гомогенно-каталитическим методом. Из виниловых эфиров ароматических карбоновых кислот были синтезированы виниловые эфиры бензойной (**1**), 2-фенилуксусной (**2**), 4-метилбензойной (**3**), 4-метоксибензойной (**4**), 2-бромбензойной (**5**), 4-бромбензойной (**6**), 4-нитробензойной (**7**), 4-трет-бутилбензойной (**8**), 4-гидроксибензойной (**9**) и 2-гидрокси-2-фенилуксусной (**10**) кислот. Схема реакции приведена ниже.



Реакция проводилась в обычных условиях в растворе ДМСО и ДМФА при участии катализаторов. В качестве катализаторов использовались кислоты Льюиса — ацетат цинка (в количестве 10% по массе от исходной карбоновой кислоты) и каталитические системы с $AlCl_3$ (в количестве 10% по массе от ацетата цинка). Влияние природы растворителей на выход винилового эфира карбоновой кислоты было систематически изучено и проанализировано (Рис. 1).

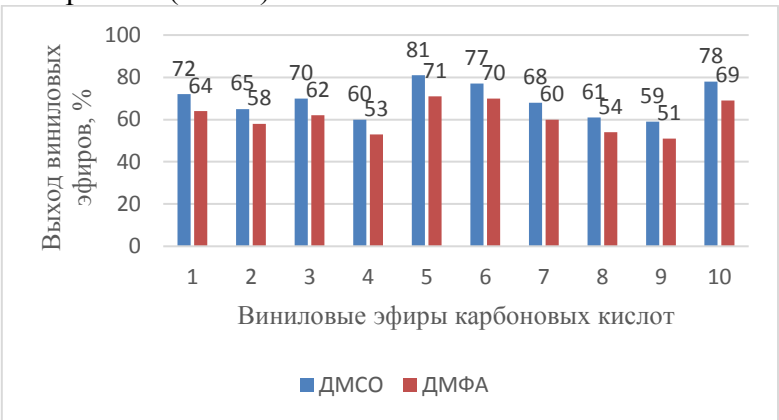


Рисунок 1. Влияние природы растворителей на выход продукта (температура 120 °C, продолжительность реакции — 4 часа, катализатор — $Zn(CH_3COO)_2 + AlCl_3$)

Во всех изученных случаях было установлено, что при использовании ДМСО в качестве растворителя выход виниловых эфиров был выше по сравнению с ДМФА.

Благодарность (финансирование): Авторы выражают признательность Министерству высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан (Грант № FL-7923051904), Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований (Грант № T23UZB-111) за финансовую поддержку.

Список использованных источников

[1] A.B.Parmanov [и др.] Azerbaijan Chemical Journal 2 (2024) 53-59.

Безызлучательный перенос энергии и многократное увеличение эффективности фотолюминесценции в кристаллах $CaGa_2S_4$:Nd, легированных иттербием

П. П. Першукевич [1*], О. Б. Тагиев [2], Э. Г. Асадов [2], Т. Ш. Ибрагимова [2], Ф. А. Казимова [2], М. В. Бельков [1], Е. В. Луценко [1], А. В. Мудрый [3], В. Н. Павловский [1], Г. П. Яблонский [1]
[1]*Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 г.Минск, Беларусь*
**e-mail: p.persh@ifanbel.bas-net.by*
[2]*Институт физики НАН Азербайджана, Az1143 Баку, пр. Г. Джавида, 33, Азербайджан*
[3] *ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», , ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь*

Исследованы спектры фотолюминесценции (ФЛ), спектры возбуждения ФЛ (СВФЛ) и кинетика ФЛ микропорошков соединений $CaGa_2S_4$:3%Nd,5%Yb и $CaGa_2S_4$:3%Nd при комнатной температуре в широком диапазоне уровней непрерывного и импульсного оптического возбуждения в интервале длин волн 300–1500 нм. Синтез соединения $CaGa_2S_4$ был осуществлён твердофазной реакцией стехиометрической смеси порошков CaS и Ga_2S_3 в высококачественной кварцевой ампуле, в которой был создан вакуум 10^{-4} – 10^{-5} мм. рт. ст. Легирование Yb и Nd проводилось в процессе синтеза с использованием YbF_3 и NdF_3. Установлено, что в результате легирования кристаллов $CaGa_2S_4$:3%Nd ионами иттербия в спектрах возбуждения полос ФЛ (900 нм и 1075 нм) появляется фиолетово-зеленая полоса с максимумом около 488 нм, при возбуждении в пределах которой интенсивность ФЛ ИК полос неодима возрастает более чем в 100 раз (рис. 1), а при возбуждении вне максимума этой полосы – в 10–15 раз. В кинетике свечения полосы ФЛ возникает начальный участок возрастания интенсивности свечения в течение 15–30 мкс, а затем происходит экспоненциальный спад его интенсивности с постоянной затухания около 90 мкс (рис. 2).

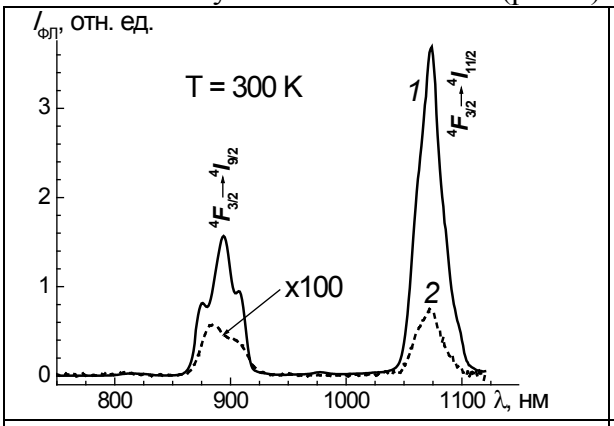


Рис. 1. Спектры ФЛ кристаллов $CaGa_2S_4$:3%Nd,5%Yb (1) и $CaGa_2S_4$:3%Nd (2) при $\lambda_{возб}$ = 450 нм

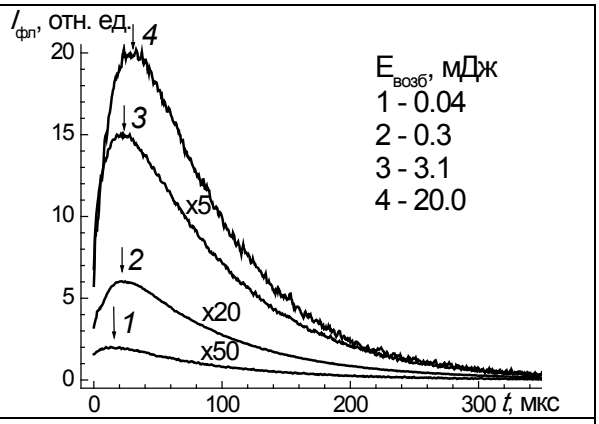


Рис. 2. Кинетика затухания ФЛ кристаллов $CaGa_2S_4$:3%Nd,5%Yb на длине волны 1075 нм при $\lambda_{возб}$ = 532 нм и различных уровнях возбуждения

Основные закономерности кинетики затухания ФЛ в соединении $CaGa_2S_4$:3%Nd,5%Yb интерпретируются в рамках модели безызлучательного переноса энергии (Förster Resonance Energy Transfer), в соответствии с которой возбуждение люминесценции осуществляется за счет безызлучательной передачи энергии с возбужденных донорных состояний на акцепторные состояния. Существенный вклад вносит также и прямое возбуждении акцепторных состояний люминофора, о чем свидетельствует ненулевая интенсивность ФЛ в начальный момент времени.

Применение настольного рентгеновского дифрактометра для измерения тонкопленочных структур

Н. В. Ржеуцкий*, Д. М. Кабанов, и Л. М. Буй
ЗАО «АДВИН Смарт Фэктори», Новодворский с/с 116, 220000 г. Минск, Беларусь,
**e-mail: rzheutski@advin-group.com*

Для измерений и контроля структурного качества кристаллов в полупроводниковой промышленности обычно используют дорогие и габаритные рентгеновские дифрактометры высокого разрешения. В то же время, для решения некоторых задач, связанных с исследованием тонкопленочных структур, могут применяться компактные и недорогие дифрактометры, оснащенные соответствующими опциями.

В работе представлен пример использования настольного дифрактометра POWDIX 600 для измерения тонкопленочных структур методами скользящей дифракции, рефлектометрии, а также определения остаточных напряжений. Использование двухосного столика (Phi, Z) позволило осуществлять прецизионное выравнивание образца относительно пучка излучения.

На рисунке 1 приведены результаты измерения остаточных напряжений по методу $\sin^2\psi$ в слое молибдена, осажденном на кварцевую подложку, а также рефлектометрия эпитаксиальных структур, представляющих собой слой AlN, выращенный на подложке сапфира, и гетероструктуру с квантовыми ямами InGaN/GaN. Точность работы гониометра в несимметричном режиме сканирования оценивалась посредством измерения релаксированного порошкового материала по методу $\sin^2\psi$ и составила ±0.005°. Измерение многослойной структуры солнечного элемента на основе поликристаллического соединения $CuInGaSe_2$ в геометрии скользящего падения при различных направлениях первичного пучка относительно поверхности образца позволило разделить вклад слоев структуры, залегающих на различной глубине.

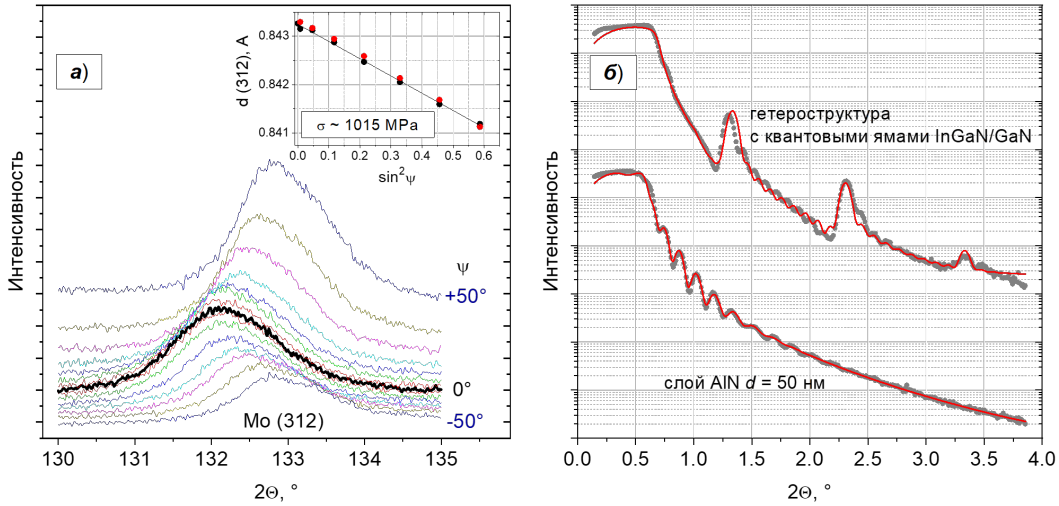


Рисунок 1. а) Результат измерения остаточных напряжений в слое молибдена (на вставке – зависимость межплоскостного расстояния при различных направлениях вектора дифракции); б) Измеренные (точки) и рассчитанные (сплошные линии) кривые рефлектометрии для нитридных эпитаксиальных структур.

Полученные результаты демонстрируют возможность применения компактного порошкового дифрактометра для исследования тонкопленочных образцов, включая эпитаксиальные структуры.

Исследование распределения ловушек в МОП-структурах методом частотных зависимостей емкости

Д. В. Сорокин *
ИНМЭ РАН, Ленинский пр., д. 32А, 119334 г. Москва, Россия,
**e-mail: dbmoksor@gmail.com*

Проведено исследование плотности поверхностных состояний (D_{it}) в металл-оксид-полупроводниковых (МОП) структурах методом сопоставления высокочастотных и квазистатических вольт-фарадных характеристик. В качестве объекта исследования использовалась тестовая структура, состоящая из 20 параллельно соединенных МОП-конденсаторов. Измерения выполнялись на полуавтоматической зондовой станции с использованием полупроводникового параметрического анализатора Keysight B1500A.

Для определения плотности поверхностных состояний был применен метод Термана, основанный на сравнении экспериментальных данных с теоретической моделью идеальной МОП-структуры. На первом этапе рассчитана идеальная высокочастотная характеристика, не учитывающая поверхностные состояния, после чего по отклонению экспериментальных данных от теоретической кривой определено распределение D_{it} вдоль запрещенной зоны кремния. Последующая корректировка теоретической модели с учетом выявленных поверхностных состояний позволила достичь хорошего согласования расчетных и экспериментальных кривых.

Верификация результатов проводилась путем сопоставления высокочастотных и квазистатических CV характеристик, что подтвердило достоверность полученных данных. Установленные значения плотности поверхностных состояний составили порядка 10^{15} $см^{-2} \cdot эВ^{-1}$, что указывает на концентрацию электронных ловушек на границе раздела кремний-диэлектрик. Квазистатические измерения позволили детально исследовать распределение заряда в приповерхностной области и выявить особенности поведения носителей заряда в условиях медленного изменения потенциала. Наблюдаемый сдвиг напряжения плоских зон в CV характеристиках свидетельствует о наличии фиксированных зарядов в диэлектрике или заряженных состояний на границе раздела.

Полученные результаты применимы для физико-топологического моделирования МОП-приборов, поскольку учитывают влияние поверхностных состояний на зарядовые эффекты и переходные процессы в полупроводниковых структурах. Перспективным направлением дальнейших исследований является изучение зависимости D_{it} от параметров технологического процесса, включая условия термической обработки и состав диэлектрического слоя, что позволит разработать рекомендации по совершенствованию методов создания МОП-структур с улучшенными характеристиками.

Концентрационная зависимость электросопротивления в интерметаллидах системы Ti-Al

Р. М. Эмиров*, М. Х. Рабаданов, Д. К. Палчаев, М.Э. Исхаков, и Ж.Х. Мурлиева
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Дагестанский государственный университет», ул. Магомета Гаджиева, д. 43-а, 367000 г. Махачкала, Республика Дагестан, Россия,
**e-mail: aderron@mail.ru*

Температурная зависимость электропроводимости интерметаллидов существенно зависит от их состава [1]. В области составов, соответствующих упорядоченным структурам, как правило, наблюдается металлический характер проводимости. Однако при определенных концентрацфиях компонентов возможен переход к полупроводниковому поведению, что возможно связано с формированием запрещенной зоны в электронном спектре [2] (рисунок 1 а).

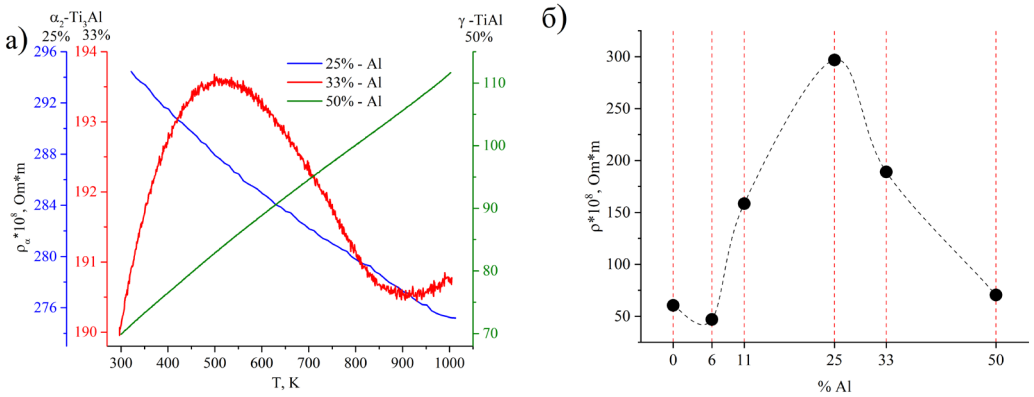


Рисунок 1. а) – Экспериментальные данные о температурной зависимости удельного электросопротивления интерметаллидов α2- Ti3Al (25% и 33% Al) и γ-TiAl (50% Al). б) – Концентрационная зависимость удельного электросопротивления интерметаллидов системы Ti-Al при комнатной температуре

Наши экспериментальные исследования показывают, что в области гомогенности интерметаллических фаз зависимость электропроводности от состава имеет нелинейный характер (см. рисунок 1, а) [3].

Как видно на рисунке 1 б, при увеличении концентрации алюминия в системе Ti-Al сопротивление возрастает и доходит до своего максимума при 25%, что соответствует стехиометрической структуре α_2-Ti_3Al. При дальнейшем увеличении содержания алюминия от 25% до 50%, сопротивление вновь начинает уменьшаться. Это может быть связано как с уменьшением количества дефектов, так и с уменьшением концентрации носителей заряда.

Также стоить отметить, что при изменении состава характер проводимости изменяется от металлической к полупроводниковой и наоборот (см. рис. 1, б). Это, в свою очередь, может быть связано с увеличение ковалентных связей в структуре интерметаллида.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено в рамках ГосЗадания № FZNZ-2025-0003.

Список использованных источников

[1] В.М. Малышев [и др.] Золото. Металлургия (1979) 288.
[2] M. S. Likhanov [и др.] Journal of Solid State Chemistry, 236 (2016) 166-172.
[3] M. E. Iskhakov [и др.] High Temperature, 60(2) (2022) 172-176.

Workshop «Advanced Techniques for Materials Science»

Семинар «Передовые Технологии для Материаловедения»

Small-angle neutron scattering instruments at the PIK reactor: method and capabilities

L.A. Azarova[1,2]*, D.O. Skanchenko[1,2], E.V. Altynbaev[1,2], and S.V. Grigoriev[1,2]
*[1] Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of NRC "Kurchatov Institute", 1 Orlova Roscha, 188300 Gatchina, Russia, *e-mail: loveazarova@gmail.com*
[2] Saint Petersburg State University, 7-9 Universitetskaya Embarkment, 199034 Saint Petersburg, Russia

The development of neutron scattering methods plays a key role in the study of structural and dynamic properties of materials at the nano- and micro-metre scales. As part of the development of the instrumentation base of the PIK reactor complex (Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC "Kurchatov Institute" - PNPI) [1], small-angle neutron scattering instruments "TENZOR" and "Membrane-2" have been developed to study large-scale inhomogeneities in various materials. Small-angle neutron scattering (SANS) is a non-destructive diffraction method in which elastic scattering of neutrons occurs on sample inhomogeneities (1-1000 nm) exceeding the radiation wavelength. This method allows analysing the structural characteristics of materials on the nanometre scale, including the determination of size, morphology and interparticle interactions in systems of nano-objects, molecular ensembles, cluster systems, etc. [2].

The TENZOR instrument is a high-flux monochromatic instrument with the option of polarised neutrons. The use of polarised neutrons makes it possible to study magnetic structures and interactions in materials with high spatial resolution in the range of 1-1000 nm, which is critical for studies of complex spin systems, superconductivity and hybrid nanocomposites. The Membrane-2 instrument combines a monochromatic mode of operation with a promising time-of-flight technique, which will be implemented in the next stage of modernisation. In its current configuration, the instrument enables studies in biology (e.g., membrane proteins and lipid bilayers), polymer physics, and materials science, focusing on static sample properties. With the introduction of the time-of-flight mode, the instrument will be key to the analysis of in situ kinetic processes, including phase transitions and relaxation dynamics in soft materials.

The report presents the capabilities of the method, technical parameters of the facilities, and examples of their application in interdisciplinary research. The PIK instrumentation opens up new opportunities for solving problems in nanotechnology, biomedicine and development of functional materials, providing a full cycle of analysis - from the atomic-molecular level to mesoscopic systems.

[1] M.V. Kovalchuk [et al.] Crystallography Reports 66 (2021) 195-215.
[2] W. Schmatz [et al.] Journal of Applied Crystallography 7(2) (1974) 96-116.

Методы контактной разности потенциалов в исследованиях твердых тел

А. Л. Жарин*
*Белорусский национальный технический университет, пр-т Независимости, 65, 220013 г. Минск, Республика Беларусь, *e-mail: anatoly.zharin@gmail.com*

Термин Контактная Разность Потенциалов (КРП) был введен А.Вольта для описания обнаруженной разности потенциалов *в зазоре* между двумя разнородными металлами, соединенными внешним проводником. С появлением квантовой теории твердого тела КРП объяснили разностью Работ Выхода Электрона (РВЭ) металлов.

РВЭ чувствительна к дефектам поверхности, химическому составу, процессам адсорбции/десорбции и др., что затрудняет определение абсолютного значения РВЭ и интерпретацию результатов, полученных методами измерения КРП.

Многолетний опыт автора в разработке и использовании методов и техники измерения КРП показывает, что с помощью подхода «черного ящика» можно получать уникальные результаты, например, при регистрации данных в процессе возмущения, а также при картировании поверхностей. В случае диэлектриков также применимы методы КРП, однако в таких случаях регистрируется не РВЭ, а электрические заряды на поверхностях. Измерение КРП является не тривиальной задачей. Большинство методов измерения КРП основаны на конденсаторе, образованном измеряемой и эталонной поверхностями. Для получения высокого пространственного разрешения эталонной поверхность должна быть как можно меньше.

Рассмотрены оригинальные методы анализа поверхностей на основе КРП и их техническая реализация, а именно модифицированный зонд Кельвина, невибрирующий зонд КРП, ионизационный зонд КРП, цифровой зонд КРП и цифровой зонд поверхностной фото-ЭДС. Приведены примеры их использования при исследованиях поверхностей металлов, диэлектриков и полупроводников как при картировании поверхностей, так и при регистрации изменений поверхностей при различных воздействиях. Рассмотрен также метод мониторинга РВЭ трущихся поверхностей и полученные оригинальные результаты, а именно периодические изменения РВЭ трущихся поверхностей, обусловленные периодическим усталостным разрушением поверхностных слоев, а также критические точки зависимости РВЭ трущейся поверхности от нормальной нагрузки.

Учитывая бесконтактный характер рассматриваемых методов, они особенно привлекательны в современных полупроводниковых технологиях. Для таких применений был оригинально разработан универсальный цифровой зондовый электрометр, картировать полупроводниковые пластины, как по РВЭ, так и по времени жизни неосновных носителей заряда и поверхностному сопротивлению.

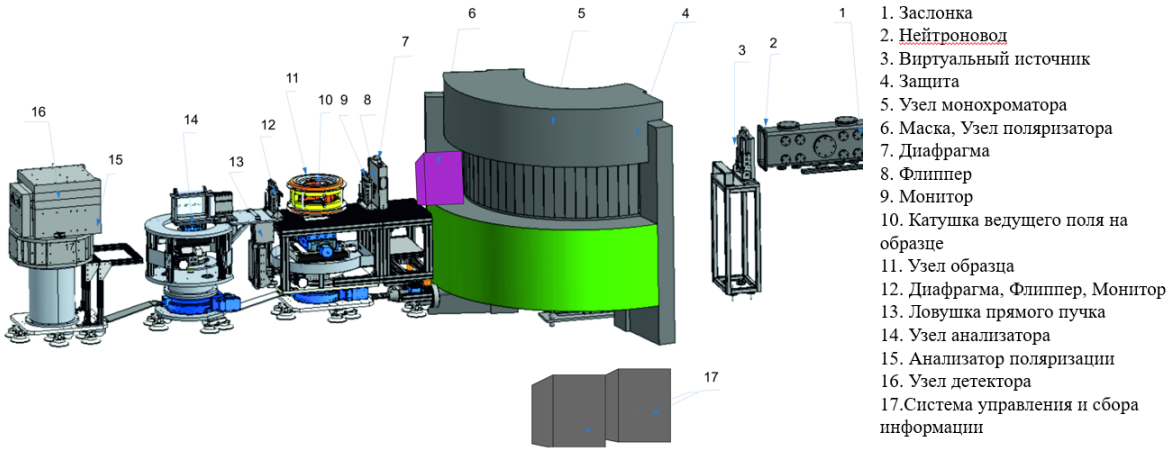
Методы КРП практически уникальны по своей чувствительности, универсальности и простоте практической реализации. Они применимы при исследованиях прецизионных поверхностей современных материалов, контроле и мониторинге технологических процессов в инженерии поверхностей и для построения сенсоров контроля и прогнозирования отказов машин и механизмов.

[1] A.L. Zharin. Macro- and micro Kelvin probe in tribological studies. In book: Fundamentals of tribology and bridge the gap between the macro-and micro/nanoscales. Kluwer (2001) 451-463.
[2] A.L. Zharin. Contact potential difference techniques as probing tools in tribology and surface mapping. In book: Scanning probe microscopy in nanoscience and nanotechnology. Springer (2010) 687-720.
[3] А.Л. Жарин [и др.] Приборы и методы измерений 14(3) (2023) 161-172.

Трехосный спектрометр поляризованных нейтронов на РК ПИК

А.Н. Матвеева[1] и И.А. Зобкало[1]
[1] Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Орлова Роща, 1, 188300 г. Гатчина, Россия,
e-mail: matveeva_an@pnpi.nrcki.ru

На РК ПИК (Гатчина) ведется разработка трехосного спектрометра поляризованных нейтронов IN3 (рисунок 1), который будет располагаться в нейтроноводном зале. Диапазон рабочих энергий спектрометра лежит в пределах от 15 до 100 мэВ, что соответствует длинам волн от 0.9 Å до 2.36 Å. Планируется использование двух типов монохроматоров – на основе пиролитического графита PG(002) и германия Ge(220). Основным монохроматором являются кристаллы пирографита, германий используется в случае работы с более высокими начальными энергиями. Кристаллы PG также будут использоваться и в качестве анализатора. В качестве поляризатора планируется использовать компактный «kink»-поляризатор, а в качестве анализатора поляризации – С-бендер.



Рисуок 1. 3D модель спектрометра поляризованных нейтронов IN3

Спектрометр поляризованных нейтронов IN3 ориентирован на разделение магнитных и кристаллических возбуждений при энергиях до 100 мэВ, что очень важно для исследований соединений со взаимодействующими параметрами порядка. Эффективное решение задач для сложных ситуаций, когда магнитные и решеточные возбуждения близки по энергии или импульсу. Проведение исследований соединений с малыми размерами и сложной схемой магнитных взаимодействий, спин-решеточных взаимодействий. Измерения на спектрометре поляризованных нейтронов IN3 позволят получить энергии магнитных взаимодействий в кристаллических веществах прямым методом. Использование магнитного рассеяния нейтронов позволит наиболее достоверно определить фундаментальные основы, позволяющие выработать новые подходы к получению функциональных материалов. Спектрометр оснащен системой окружения образца, что позволяет выполнять измерения в условиях низкой температуры, сильных магнитных полей, а также может использоваться в режиме анализа поляризации нейтронов, в дополнение к другим трехосным спектрометрам на РК ПИК.

Лазерный синтез многофукциональных алмазных материалов в атмосферных условиях

О. В. Седельникова[1]*, Д. В. Городецкий[1], Ю. В. Федосеева[1], О. Г. Поддубская[2], и А. В. Окотруб[1]

[1]*Институт неоргенической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Акад. Лаврентьева, д. 3, 630090 г. Новосибирск, Россия, *e-mail: o.sedelnikova@gmail.com*

[2]*Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, д. 11, 220006 г. Минск, Беларусь*

Благодаря уникальным свойствам, таким как высокое удельное сопротивление, напряженность поля пробоя, теплопроводность, химическая и радиационная стойкость, алмаз является перспективным материалом для высокотехнологичных применений. Ограниченность природных алмазов и высокая стоимость синтетических аналогов ранее сдерживали их широкое использование. Однако с развитием методов химического осаждения из газовой фазы (CVD) стали доступны поликристаллические алмазные пленки, сопоставимые по характеристикам с монокристаллами. Лазерное излучение позволяет направленно изменять структуру и свойства этих пленок, вызывая локальную графитизацию в приповерхностном слое. Метод прямой лазерной печати, формируя углеродные материалы непосредственно на алмазной подложке, позволяет объединять диэлектрические и проводящие компоненты в единые структуры. Это открывает перспективы для аддитивного производства многофункциональных электронных и фотонных компонентов, стимулируя разработку передовых устройств и систем.

В данной работе представлены результаты исследований структурных, оптических и электрических характеристик поликристаллических алмазных пленок, модифицированных лазерным излучением. Пленки были получены методом плазмохимического осаждения из газовой фазы с использованием смеси пентана и водорода. Лазерная обработка проводилась наносекундными импульсами УФ-лазера в атмосферных условиях. Микрофотографии, полученные с помощью сканирующей электронной микроскопии, показали, что УФ-лазер формирует на поверхности канавки, покрытые рыхлым углеродным материалом. Рамановская спектроскопия и рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия подтвердили, что верхний слой модифицированной поверхности представляет собой пироуглерод, с проводимостью поверхности достигающей 30000 См/м. Методами терагерцовой спектроскопии продемонстрирована возможность создания поляризаторов и фильтров ТГц-излучения на основе поликристаллической алмазной пленки с созданной лазером решеткой. Отклик таких поляризаторов определяется распространением волноводной моды внутри подложки и может быть настроен под заданный частотный диапазон и поляризацию падающей ТГц волны. Тестирование этих материалов показало их потенциал в качестве компонентов сенсорных систем, в частности, датчиков оптического и рентгеновского излучений.

Благодарность (финансирование):
Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-72-10097.

Станция и канал для облучения микросхем СОЧИ

В. И. Тюлькин, Е. М. Сыресин, А. В. Бутенко, А. А. Сливин, Г. А. Филатов, А. Р. Галимов, А. М. Тихомиров, В. В. Ефимов.
Объединенный институт ядерных исследований Российская Федерация, МО, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6, tyulkin@jinr.ru

В Объединенном институте ядерных исследований в рамках реализации проекта NICA ведется сооружение ускорительного комплекса, включающего в себя станции и каналы для прикладных исследований в области радиобиологии, ядерной энергетики и электроники. Облучение производится пучками различных типов ионов от $^{12}C^{4+}$ до $^{197}Au^{31+}$ с энергией до 4,5 ГэВ/нуклон. Одной из действующих установок является комплекс облучения микросхем (СОЧИ), облучение в котором происходит импульсными пучками с энергией до 3,2 МэВ/нуклон, выведенными из линейного ускорителя тяжелых ионов (ЛУТИ)[1].

Комплекс включает в себя станцию для облучения чипов и канал транспортировки пучка от линейного ускорителя ЛУТИ.

Станция Облучения ЧИпов (СОЧИ), предназначена для исследований и тестирования на радиационную стойкость декапсулированных микросхем. Тестирование позволяет провести оценку рисков влияния космического излучения.

Канал транспортировки пучка от ЛУТИ до СОЧИ, интегрированный в канал ЛУТИ–бустер, обеспечивает транспортировку пучка от ЛУТИ до СОЧИ и требуемую неоднородность распределения пучка (менее 10 %) в области мишени размером 20 × 20 мм [2]. Формирование пучка в канале транспортировки осуществляется магнитной системой. Для возможности изменения интенсивности пучка применяется коллиматорная станция, с тремя щелевыми диафрагмами из нержавеющей стали толщиной 50мкм с различной перфорацией.

Так как система является однопролетной, для снижения потерь пучка с энергией до (3,2МэВ/н) на молекулах остаточного газа в канале транспортировки пучка требуется получить давление не хуже, чем 10^{-6} Па. При этом состав остаточных газов не должен включать углеводороды. выделяемые из образцов углеводороды и пары воды попадающие в объем станции при загрузке образцов не должны мигрировать в объем линейного ускорителя ЛУТИ. Вакуумная система с дифференциальной откачкой, представленной турбомолекулярными и ионно-геттерным насосами, системой диафрагм и быстродействующими затворами, позволяет получить требуемые параметры и облучать образцы с длительностью цикла в течение 30 минут.

Станция облучения чипов включает в себя систему позиционирования объекта испытаний, универсальную испытательную плату, кабели, модуль нагрева, быстрый люминофорный детектор полного поглощения и газоанализатор. Вакуумная система станции позволяет производить откачку камеры после загрузки образца, до рабочего давления 10^{-3} Па, в течение 6-7 минут.

К настоящему моменту на комплексе СОЧИ проведено четыре сеанса пуско-наладочных работ (ПНР), каждый из которых включал в себя тестовое облучение декапсулированных микросхем в активном режиме и облучение различных образцов.

Список использованных источников:

[1] Г. А Филатов [и др.] Каналы и станции для прикладных исследований ускорительного комплекса NICA, Письма в ЭЧАЯ. 2023. Т. 20, № 4(249). С. 812–818.

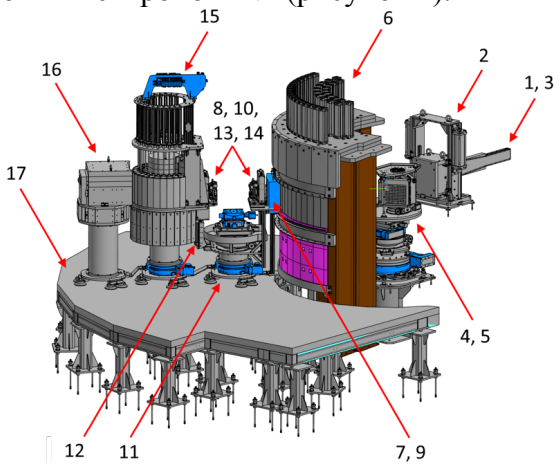
[2] A. Slivin [et al.]. Commissioning of the SOCHI Applied Station Beam and Beam Transfer Line at the NICA Accelerator Complex // Proc. of the 13th Intern. Part. Accel. Conf. (IPAC’2022), Bangkok, June 12–17, 2022. P. 3099.

Трехосный спектрометр тепловых нейтронов

М. Х. Юзвюк[1]* и И. А. Зобкало[1]
[1]*НИЦ КИ - ПИЯФ, Орлова роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия,*
**e-mail: yuzvyuk_mh@pnpi.nrcki.ru*

Неупругое рассеяние нейтронов – основной универсальный метод исследования атомной и магнитной динамики в различных веществах, который позволяет получить информацию о природе и характере сил и взаимодействий, определяющих основные свойства и строение вещества. Данный метод лежит в основе работы трехосных спектрометров неупругого рассеяния.

На РК ПИК (Гатчина, Россия) ведутся работы по созданию трехосного спектрометра тепловых нейтронов IN1 (рисунок 1).



1. Источник виртуальный;
2. Заслонка;
3. Фильтр нейтронный;
4. Монитор 1 пучка нейтронов;
5. Узел монохроматора;
6. Защита;
7. Коллиматор монохроматора;
8. Монитор 2 пучка нейтронов;
9. Маска защитная;
10. Диафрагма первичная;
11. Узел образца;
12. Ловушка пучка прямого от монохроматора;
13. Диафрагма вторичная;
14. Монитор 3 пучка нейтронов;
15. Узел анализатора;
16. Узел детектора;
17. Фальшпол. Кабина управления. Рабочая зона установки.

Рисунок 1. 3D модель спектрометра IN1

Научные задачи для IN1:

- Исследование динамики решетки и магнитных возбуждений;
- Изучение критических явлений вблизи фазовых переходов в материалах с различным типом упорядочения;
- Изучение влияния внешних факторов (температура, магнитные и электрические поля, давление) на природу фазовых переходов и динамику решетки;
- Разделение рассеяния от коллективных возбуждений и от медленно релаксирующих кластеров с ближним порядком.

Благодаря оснащению спектрометра системой окружения образца возможно выполнять измерения в условиях низкой температуры, сильных магнитных полей, высоких давлений.

Основные характеристики спектрометра IN1

Расстояние «источник – монохроматор»	4.70 м
Энергия нейтронов	15 мэВ < E_i < 100 мэВ
Разрешение (FWHM)	ΔE = 0.8 мэВ, 3 мэВ (E_i = 15 мэВ, 35 мэВ)
Монохроматоры Двойная фокусировка	10° < $2\Theta_M$ < 90° PG(002), Ge(220), Si(111)
Анализаторы Двойная фокусировка	–110° < $2\Theta_A$ < 110° PG(002), Si(111)
Образец	–90° < $2\Theta_S$ < 90°
Детектор	Счетчик ^{3}He (точечный)
Коллиматор (опция)	20’, 40’, 60’

Workshop «Multiferroics and Magnetoelectric Materials»

Семинар «Мультиферроики и Магнитоэлектрические Материалы»

Особенности полевых зависимостей прямого и обратного нелинейных МЭ эффектов в мультиферроидных структурах

Д.А. Бурдин*[1], и Д.В. Савельев[1]
[1]*РТУ МИРЭА, пр. Вернадского, 78, 119454 г. Москва, Россия,*
**e-mail: phantastic@mail.com*

В последние годы научными группами всего мира исследуется магнитоэлектрический (МЭ) эффект в композитных структурах [1]. Как правило, полевые зависимости компонент МЭ сигнала определяются свойствами магнитострикционных слоёв структуры, причём для прямого МЭ эффекта величины пьезомагнитных модулей могут быть прямо вычислены путём кратного дифференцирования полевой зависимости магнитострикции $\lambda(H)$. Так, линейный пьезомодуль прямого МЭ эффекта описывается выражением $q_d = \frac{\partial \lambda}{\partial H}$, нелинейный, определяющий амплитуду эффекта удвоения частоты, - $p_d = \frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2}$ [2]. Для обратного эффекта пьезомодули пропорциональны производным намагниченности по механичекому напряжению: $q_c = \frac{\partial M}{\partial \sigma}$, $p_c = \frac{\partial^2 M}{\partial \sigma^2}$ [3]. В то время, как зависимость $\lambda(H)$ может быть легко получена экспериментально, измерение зависимости $M(\sigma)$ сопряжено с экспериментальными трудностями. В работе [4] продемонстрирована взаимность линейных прямого и обратного эффектов в смысле их полевых зависимостей, что позволяет для расчёта обратного линейного МЭ эффекта использовать зависимость $\lambda(H)$, что также вытекает из термодинамических соображений: $\frac{\partial \lambda}{\partial H} = \frac{\partial B}{\partial \sigma}$ [5].

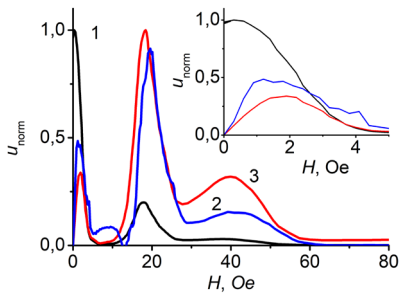


Рисунок 1. Нормированные полевые зависимости пьезомагнитных модулей: 1) измеренный p_d, 2) измеренный p_c, 3) расчёт: $p_c = p_d * H$

В данной работе проведён анализ связи прямого p_d и обратного p_c нелинейных пьезомагнитных модулей. В качестве исходной выбрана модель намагничивания Стонера-Фольхфарта, основанная на вращении домена в условиях одноосной магнитной анизотропии, с учётом магнитоупругого взаимодействия. Показано, что в таком случае между пьезомагнитными модулями имеется связь вида: $p_c = DHp_d$, где D – некая постоянная, не зависящая от магнитного поля, H – внешнее магнитное поле. Измерения МЭ эффекта в композитных структурах с разными материалами магнитострикционных слоёв (ЖИГ и аморфный сплав FeBSiC) показали неплохое соответствие сделанным теоретическим оценкам (см. рис. 1).

Таким образом, показано, что приближённую полевую зависимость нелинейного обратного МЭ коэффициента можно рассчитать на основе полевой зависимости магнитострикции ФМ слоя. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых устройств на основе нелинейного МЭ эффекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00233, https://rscf.ru/project/25-22-00233/.

Список использованных источников

[1] G.Srinivasan. Mat. Struct. and Appl.: Composite Magnetoelectrics (2015) 55-70.
[2] D. A. Burdin [и др.] JMMM 358-359 (2014) 98-104.
[3] L.Y. Fetisov [и др.] Appl. Phys. Lett. 113 (2018) 212903.
[4] J. Lou [и др.] Appl. Phys. Lett. 100 (2012) 102907.
[5] R.E. Newnham. Oxford University Press (2005).

Влияние электрического поля на свойства керамики BS-PT-PMN для управления магнитоэлектрическим эффектом

Д.В. Савельев*, Д.А. Бурдин, Е.В. Болотина, Ф.А. Федулов, Д.Ю. Федулов, и Ю.К. Фетисов
РТУ «МИРЭА», пр. Вернадского, 78, 119454 г. Москва, Россия,
**e-mail: dimsav94@gmail.com*

В композитных структурах, состоящих из механически соединенных слоев пьезоэлектрика (ПЭ) и ферромагнетика (ФМ), наблюдается магнитоэлектрический (МЭ) эффект, который заключается во взаимном преобразовании магнитных и электрических полей в материале. В настоящее время перспективным направлением являются исследования в области управления характеристиками МЭ эффекта с помощью электрического поля [1]. Для этих целей представляет интерес использование сегнетоэлектриков-релаксоров, способных создавать деформации, намного превышающие деформации создаваемые пьезокерамикой, а также обладающие нелинейной зависимостью диэлектрической проницаемости от электрического поля [2].

В работе исследованы свойства керамики сегнетоэлектрика-релаксора системы $(1–2x)BiScO_3 \cdot xPbTiO_3 \cdot xPbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ с x=0.42 (BS-PT-PMN). Образец представлял собой диск диаметром 10 мм и толщиной 250 мкм. Перед проведением измерений образец был поляризован в электрическом поле 20 кВ/см. Пьезомодуль d_{33} составил 243 пКл/Н, измеренная на частоте 1 кГц диэлектрическая проницаемость $\varepsilon \approx 2800$, частота электромеханического резонанса $f = 233$ кГц. На первом этапе были исследованы электромеханические свойства пьезокерамики. Величина электрострикции составила около 200 ppm в поле 20 кВ/см (рис.1). На зависимости наблюдается смещение нуля, обусловленное наличием остаточной поляризации. Следует отметить, что приложенное поле не превышало поля насыщения исследуемого образца.

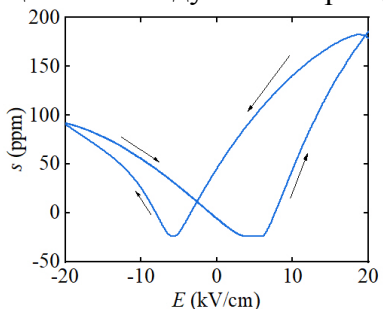


Рисунок 1. Зависимость деформации керамики BS-PT-PMN от электрического поля.

Поскольку величина МЭ коэффициента зависит от диэлектрических свойств слоя ПЭ[1], были измерены зависимости диэлектрической проницаемости, тангенса угла диэлектрических потерь, активного сопротивления и импеданса от постоянного электрического поля. Полученные зависимости имели форму бабочки. Благодаря высокому значению электрострикционной деформации (до 0.02% в поле 20 кВ/см) данный материал может быть использован для создания МЭ структур. На следующем этапе была изготовлена композитная структура BS-PT-PMN/Metglas и исследованы характеристики МЭ эффекта.

Благодарность (финансирование). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00233, https://rscf.ru/project/25-22-00233/.

Список использованных источников:

[1] B. Luo [и др.] Nat. Rev. Electr. Eng. 1 (2024) 317-334.
[2] F. Li [и др.] Appl. Phys. Rev. 1 (2014) 011103.

Роль орбитального разупорядочения в формировании гриффитсо-подобной фазы в $Bi_xLa_{1-x}MnO_3$ ($0.0 \le x \le 0.2$)

Т.Н. Тарасенко*
ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»,
*ул. Р. Люксембург, 72, 83114 г. Донецк, Россия, *e-mail: t.n.tarasenko@mail.ru*

Ян-теллеровские (ЯТ) манганиты характреизуются сильной связью между спиновыми, орбитальными и решеточными степенями свободы. Оба крайних состава – и $LaMnO_3$, и $BiMnO_3$ – имеют структуру перовскита, при этом для слоистого антиферромагнетика $LaMnO_3$ (T_N=140 K) характерны ромбоэдрические искажения структуры (пр. гр. R3c), а для ферромагнетика (ФМ) $BiMnO_3$ (T_C=100 K) – моноклинные (пр. гр. C2). При одинаковой валентности La^{3+} и Bi^{3+} имеют близкие ионные радиусы: 1,22 Å и 1,24 Å, соответственно. Отличие La^{3+} и Bi^{3+} состоит в том, что на внешней электронной оболочке иона Bi^{3+} имеется стереохимически активная изолированная пара $6S^2$-электронов, которая дает иону висмута дополнительную степень свободы для перемещения вдоль <111>-направления перовскитной кубической ячейки [1]. Оба манганита орбитально упорядочены: в $LaMnO_3$ ЯТ искажения кристаллической структуры ответственны за 2d-упорядочение dz^2 орбиталей иона Mn^{3+}, а в $BiMnO_3$ – 3d-упорядочение [1]. Магнитная подсистема обоих манганитов представлена ионами Mn^{3+} в октаэдрическом окружении ионов кислорода O^{2-}.

Замещение La^{3+} на Bi^{3+} в структуре $LaMnO_3$ приводит к локальным искажениям кислородных октаэдров, характерным для $BiMnO_3$, при этом изменяются углы связи Mn-O-Mn и расстояния Mn-O.

Вид температурной зависимости обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ для $Bi_xLa_{1-x}MnO_3$ (рис.1), свидетельствуют о существовании фазы, подобной фазе Гриффитса [3], в диапазоне $T_C<T<T_G$, где ФМ температура Кюри T_C = 143 К и температура Гриффитса $T_G \approx$ 300 К (для x=0,2). Исследование температурных зависимостей мнимой части магнитной восприимчивости $\chi''(T)$ образцов (Bi-La)MnO_3, синтезированных золь-гель методом [2], показало присутствие в системе трех ФМ фаз в интервале от 150 до 170 К, что связано с наличием трех неэквивалентных позиций иона Mn^{3+} в структуре $BiMnO_3$. Все эти три ФМ фазы находятся в температурном диапазоне гриффитсоподобной фазы.

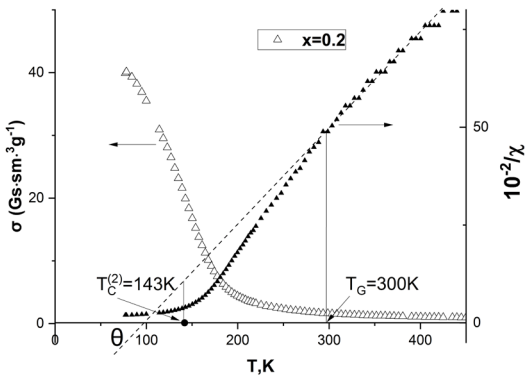


Рисунок 1. Температурные зависимости уд. намагниченности σ(T) и $\chi^{-1}(T)$ $Bi_{0.2}La_{0.8}MnO_3$ (тв.-фазный синтез).

Таким образом, фаза, подобная фазе Гриффитса, наблюдаемая в слаболегированных Bi-La манганитах, возникает не из-за отсутствия некоторых ФМ связей [3], а вследствие изменения части этих связей с 2d- на 3d-орбитальное упорядочение, конкуренцией между этими ФМ фазами и их сосуществованием, т.е. обусловлена орбитально разупорядоченным состоянием в $Bi_xLa_{1-x}MnO_3$.

[1] A. Moreira dos Santos [и др.] Phys. Rev. 66 (2002) 064425.
[2] Т.Н. Тарасенко [и др.] Известия РАН. Серия физическая. 81 (3) (2017) 344-348.
[3] В.Н. Криворучко. ФНТ 40 (7) (2014) 756-774.

Исследование магнитных фазовых переходов в ортоферрите $TmFeO_3$ методом нейтронографии при воздействии внешнего магнитного поля.

К. Ю. Ткаченко[1,2*], А. К. Овсяников[2], и О. В. Усманов[2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, ул. Ульяновская, д. 3, 198504 г. Санкт-Петербург, г. Петергоф, Россия,*
**e-mail: st096187@student.spbu.ru*
[2]*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова «ПИЯФ», Орлова Роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия*

Ферриты представляют собой распространенные соединения в области материаловедения. Они классифицируются на четыре группы, однако в данной работе основное внимание будет уделено соединениям, в которых редкоземельный элемент R связан с оксидом железа Fe2O3. Эти соединения особенно интересны для исследования, поскольку демонстрируют электрическую поляризацию, что открывает возможности для применения ортоферритов в устройств хранения информации с ультравысокой плотностью записи, а также в других современных технических устройствах.

TmFeO3 является одним из представителей группы редкоземельных ортоферритов, в которой наблюдаются различные магнитные фазовые переходы, включая переход через смешанную фазу [1,2]. Образец был исследован с использованием методов рентгеновской и нейтронной дифракции в присутствии внешнего магнитного поля.

Рентгеновский эксперимент осуществлялся в Петербургском институте ядерной физики имени Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab. Эксперимент по нейтронной дифракции был проведён в Institut Laue-Langevin (ILL) на дифрактометре D23.

В результате анализа данных рентгеновского эксперимента были уточнены параметры решётки и расположение атомов. На основании этих данных было рассчитано направление электрического дипольного момента, а также построены карты электронной плотности Fe-O-Fe и Tm-O-Fe, которые помогли косвенно продемонстрировать пути суперобменного взаимодействия.

Результатом анализа нейтронной части эксперимента стало создание магнитной фазовой диаграммы тулиевого ортоферрита при приложении внешнего магнитного поля вдоль осей b и c.

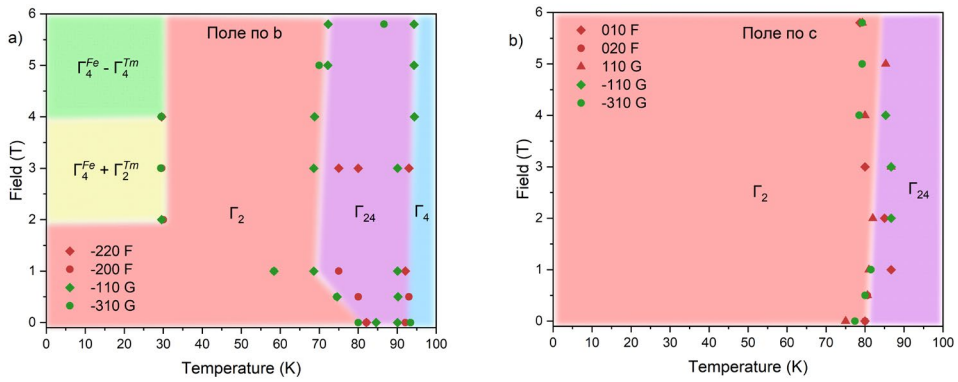


Рисунок 1. Магнитная фазовая диаграмма $TmFeO_3$

Список использованных источников:
[1] A. Bombik [и др.] J. Magn. Magn. Mater. 214 (2000) 243.
[2] L. T. Tsymbal [и др.] Low Temp. Phys. 31 (2005) 277.

Магнитоэлектрические композитные материалы от объемных к МЭМС

А.В. Турутин*, И.В. Кубасов, А.А. Темиров, В.В. Куц, А.М. Кислюк, Е.В. Болотина, М.Д. Малинкович, и Ю.Н. Пархоменко
*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1, 119049 г. Москва, Россия, *e-mail aturutin92@gmail.com*

Композитные магнитоэлектрические (МЭ) материалы, объединяющие магнитострикционные (МС) и пьезоэлектрические (ПЭ) свойства, обладают высоким потенциалом для применения в чувствительных датчиках магнитных полей и других бесконтактных измерительных приборах, а также в устройствах микроэлектроники. Чувствительные элементы на основе МЭ композитных структур обладают высокой чувствительностью к слабым магнитным полям (пределы детектирования приближаются к единицам пТл/Гц$^{1/2}$ на низких частотах (1-100 Гц) и десяткам фТл/ Гц$^{1/2}$ на частотах порядка нескольких кГц при комнатной температуре), что достаточно для детектирования магнитных полей сердца человека. В подавляющем большинстве современных исследований для физического соединения пьезоэлектрических и магнитострикционных слоёв в МЭ композитных структурах используют клеевой слой. Такой подход технологически несовершенен, так как применение клея снижает воспроизводимость свойств сенсоров, приводит к температурной нестабильности и ограничивает диапазон рабочих температур, что делает такие конструкции непригодными для коммерческого применения.

Поэтому развитие технологий изготовления МЭ композитных материалов для применения в сенсорах сверхслабых магнитных полей происходит в направлении использования более технологичных методов нанесения функциональных ПЭ и МС слоёв, подбора более эффективных материалов, включая направленную модификацию их свойств с целью увеличения чувствительности и миниатюризации с постепенным переходом к технологиям микроэлектромеханических систем (МЭМС).

Переход к тонкоплёночным МЭ материалам сопряжен с применением различных физических и химических методов осаждения функциональных слоёв. Достаточно большое количество работ посвящено получению ПЭ слоёв и исследованию влияния их свойств на МЭ эффект. При этом гораздо меньше внимания уделяется изучению материалов для МС слоев, особенно тонкопленочных. Существуют работы, в которых изучаются тонкие пленки магнитомягких аморфных сплавов, применяемых в различных устройствах микроэлектроники, например, памяти, однако систематических исследований по использованию таких плёнок в МЭ композитах, а также влияния параметров их получения на МЭ характеристики в литературе не представлено.

В работе представлен переход от объемных МЭ стркутур к МЭМС на основе бидоменного кристалла ниобата лития (b-LN) y+128°-среза и метгласа ($Fe_{77}Co_4Si_8B_{11}$). Процесс осаждения метгласа проводили в универсальной вакуумной технологической камере SUNPLA-40TM. Рабочее давление в камере составляло 0,5 Па, подаваемая на магнетрон мощность не превышала 100 Вт. Проведены исследования влияния температуры подложкодержателя во время осаждения магнитострикционного слоя на МЭ свойства композитных структур. Показана возможность управлять доменной структурой и коэрцетивной силой в тонких пленках метгласа при помощи постростового отжига.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-49-10017, https://rscf.ru/project/24-49-10017/.

Методика расчета параметров кристаллического поля в редкоземельных ортоферритах $RFeO_3$

О. В. Усманов*, А. К. Овсяников, и И. А. Зобкало
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Орлова роща, д. 1, 188300 г. Гатчина, Россия,
e-mail: usmanov_ov@pnpi.nrcki.ru

На основе данных рентгеноструктурного анализа, изотермической намагниченности и спектров неупругого рассеяния нейтронов для соединений $RFeO_3$ (R = Dy, Ho, Tm) в рамках модели точечного заряда получены наборы параметров кристаллического электрического поля (КЭП) для соответствующих ионов редкоземельных металлов R^{3+} [1, 2].

Рассмотрены оптимальные алгоритмы определения параметров КЭП с использованием программных пакетов PyCrystalField и CrysFieldExplorer [3, 4]. Из наборов расчетных параметров выполнены оценки расщепления энергетических уровней мультиплета основного состояния редкоземельного иона R^{3+}, а также температурных зависимостей спектров расщепления.

[1] M. Hutchings. Solid State Physics 16 (1964) 227-273.
[2] A. Ovsianikov [и др.] J. Magn. Magn. Mater. 557 (2022) 169431.
[3] A. Scheie. J. Appl. Cryst. 54 (2021) 356-362.
[4] Q. Ma [и др.] J. Appl. Cryst. 56 (2023) 1229-1241.

Workshop «Superhard Materials and High Pressures»

Семинар «Сверхтвердые Материалы и Высокое Давление»

Исследование факторов, влияющих на синтез наноалмазов с люминесцентными центрами в условиях высоких статических давлений

Р.Х. Баграмов*
Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, Калужское шоссе, 14, 142190 г. Москва, г. Троицк, Россия,
**e-mail: bagramov@hppi.troitsk.ru*

Повышенный интерес к развитию методов получения наноалмазов в настоящее время обусловлен их востребованностью для современных оптических, квантовых и биологических применений. Так, они признаны одними из наиболее перспективных носителей лекарственных веществ, могут быть использованы для разработки биосенсоров, действующих агентов в терапии рака и контрастных веществ.

Метод высоких статических давлений, наряду с другими методами, может быть использован для синтеза наноалмазов, в том числе и с люминесцентными центрами, такими как N-V, Si-V, Ge-V и другими. Однако, для эффективного контроля свойств получаемых кристаллов необходимо изучить влияние параметров синтеза на такие процессы, как нуклеация и рост.

Задача настоящей работы состояла в разработке подхода контроля среднего размера получаемых частиц, их разброса по размерам и уровня легирования кремнием при синтезе наноалмазов с люминесцентными Si-V центрами. В качестве исходных использовались адамантан $C_{10}H_{16}$ (99%, Sigma-Aldrich), тетракис(триметилсилил)силан $C_{12}H_{36}Si_5$ (>97%, Sigma-Aldrich), детонационные наноалмазы 3-4 нм (Adamas Nanotechnologies Inc., USA). Исследования полученных образцов проводились методами рентгеновской дифракции, комбинационного рассеяния и фотолюминесценции. Для получения изображений применялась электронная микроскопия.

При давлении 7,5 ГПа и температурах до 1500°C исследовались двойные и тройные смеси адамантана, тетракис(триметилсилил)силана и детонационных наноалмазов (ДНА). Полученные результаты позволили сделать выводы о влиянии соотношения исходных компонентов и параметров (давления и температуры) на получаемый продукт, и могут быть использованы в дальнейших разработках. Было показано, что при массовом соотношении адамантан/ДНА, равном 1/1 и 25/1, и температурах синтеза 1200-1400°C в полученных образцах преобладает алмазная фаза, а характерные размеры алмазных наночастиц находятся в диапазоне 10-50 нм. Была продемонстрирована возможность контролируемого формирования Si-V центров в образцах размером менее 50 нм путем изменения атомного соотношения кремний/углерод в прекурсоре от 1/100 до 1/10000. Показано, что использование наноалмазов как прекурсора позволяет контролировать средний размер и разброс по размерам синтезируемых алмазов, а также увеличить выход желаемой фракции.

Благодарность: В.П. Филоненко, И.П. Зибров, И.И. Власов, Д.Г. Пастернак, А.М. Ромшин, О.С. Кудрявцев. Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования Российской Федерации FFUW-2021-0003

Список использованных источников:
[1] R. H. Wentorf. J. Phys. Chem. 69 (1965) 3063.
[2] E. A. Ekimov [и др.] Adv. Mater. 27 (2015) 5518.
[3] V.A. Davydov [и др.] Carbon 90 (2015) 231.
[4] D.G. Pasternak [и др.] Nanomaterials 14 (2024) 1843.

Перспективы использования наноалмазов, полученных в условиях высоких статических давлений, в биологических исследованиях

Д.А. Костылев* и Р.Х. Баграмов
*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Калужское шоссе, 14, 108840 г. Троицк, г. Москва, Россия, *e-mail: danil0196@bk.ru*

Сегодня наблюдается заметный прогресс в развитии методов синтеза наноалмазов, однако такая задача, как контролируемое формирование в них флуоресцентных примесных центров, все еще остается актуальной.

Настоящая работа посвящена синтезу наноалмазов с люминесцентными SiV^- центрами в условиях высоких статических давлений. Такие наноалмазы можно использовать для высоколокального нагрева и термометрии, в том числе при исследовании биологических объектов. Несомненно, наноалмазы с люминесцентными SiV^- центрами будут полезны и в других областях.

Синтез наноалмазов проводили при давлении 7,5 ГПа и температуре в диапазоне 1200–1500 °C. Сырьем являлась смесь адамантана и детонационного наноалмаза (3-4 нм) в различных соотношениях (0/1–100/1). Для легирования кремнием применялся тетракис (триметилсилил)силан с химической формулой $C_{12}H_{36}Si_5$.

Было установлено, что изменение соотношения кремний/углерод в прекурсоре в диапазоне от 0,01% до 1% позволяет контролировать формирование SiV^- центров с требуемыми характеристиками. Оптимальная температура для синтеза наноалмазов с размерами около 50 нм – 1350 °C [1].

Характеристики полученных наноалмазов (геометрический размер, уровень и стабильность люминесценции), наряду с биологической совместимостью и не токсичностью позволяют применять их в биологических исследованиях. Такие кристаллы были использованы в качестве термосенсоров с ультравысокой локальностью для изучения влияния температурного градиента в клетке на различные биологические процессы [2]. Температура отслеживалась по спектральному сдвигу характерной для центров SiV^- линии люминесценции, зависящей от температуры.

Полученные наноалмазы с SiV^- люминесцентными центрами были также использованы для тепловой стимуляции отдельной живой клетки [3]. Благодаря наличию аморфного углерода на межкристаллитных границах, такая частица является эффективным поглотителем света, и при освещении лазером она становится локальным источником тепла. Температура локального «нагревателя» отслеживается по сдвигу линии SiV^- люминесценции. Таким образом, наноалмазная частица действует одновременно как «нагреватель» и «термометр». Это свойство наноалмазов может быть использовано в инновационном разделе медицины – тераностике.

Анализ литературных источников [4] показал, что существуют и другие направления медико-биологического применения наноалмазов с люминесцентными центрами, например визуализация процессов, связанных с клеточным метаболизмом.

Список использованных источников:

[1] D. G. Pasternak [и др.] Nanomater. 14 (22) (2024) 1843.
[2] A. G. Kruglov[и др.] Molecular Sciences. 24(23) (2023) 16955.
[3] A. X. Romshin[и др.] Scientific Reports. 13 (2023) 8546.
[4] Jin-Xu Qin[и др.] Materials and Design. 210 (2021) 11091.

Бор в решетке графита и алмаза: эксперимент и расчеты

Г.Д. Рыбалов[1]*, В.П. Филоненко[1], З.Н. Волкова[2], Р.Х. Баграмов[1],
Н.М. Щелкачев[1], и И.П. Зибров[1]
*[1]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Калужское шоссе, 14, 142190 г. Троицк, г. Москва, Россия, *e-mail: tybalovgd@hppi.troitsk.ru*
[2]Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, 620108 г. Екатеринбург, Россия

В работе представлены результаты исследования структуры микропорошков графита и алмаза с содержанием бора ~ 1 и ~ 2.5%, синтезированных в условиях высоких давлений и высоких температур без использования металлов-катализаторов. При исследовании материалов использовались методы рентгенографии, электронной микроскопии, Рамановской спектроскопии, ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Полученные экспериментальные результаты, подтвержденные расчетами (Рис. 1а), показали, что атомы бора в графеновом слое стремятся расположиться равноудаленно и не образуют димеров или сегрегаций.

Прямая трансформация решетки борированного графита в алмазную происходит при давлениях от 7,5 ГПа, что почти в два раза ниже в сравнении с чистым графитом. Одной из причин такого значимого снижения параметров может быть расположение отдельных атомов бора между графеновыми слоями, что приводит к появлению больших сдвиговых напряжений в графите.

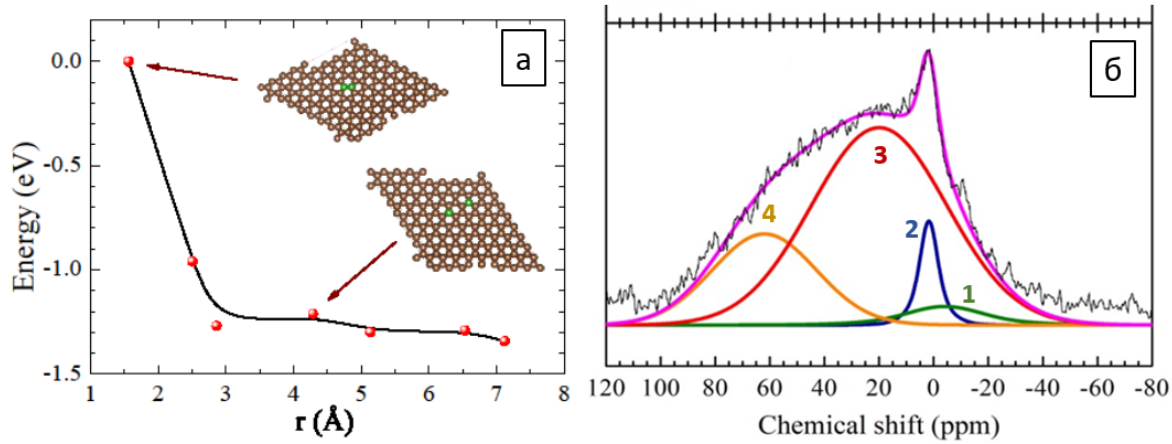


Рисунок 1. (а) - энергия кластера графена как функция расстояния между атомами бора;
(б) - ЯМР ^{11}B спектр борированного алмаза (записан при вращении с частотой 20 кГц)

ЯМР ^{11}B спектроскопия использована для сравнительного анализа борированного алмаза и борированного графита. Характерный суммарный спектр микропорошков борированного алмаза включает четыре сигнала (Рис. 1б), два из которых относятся к бору в примесных фазах (1 – B_4C, 2 – cBN). Основная компонента бора в алмазной решетке (линия 3) складывается из перекрывающихся сигналов от одиночных атомов бора с тетрагональным и тригональным окружением углеродом, а дополнительный сигнал с химическим сдвигом более 60 ppm может быть обусловлен атомами бора с менее симметричным окружением в зонах скоплений дислокаций, субграниц и других дефектных областях. С помощью ЯМР ^{13}C спектроскопии показано, что в кристаллической решетке алмазов с высоким содержанием бора присутствует значимое количество углерода с sp^2 связями.

Проблемы синтеза и консолидации наноразмерных частиц алмазоподобного нитрида бора

А.Н. Шипков [1]*, В.П. Филоненко [1], И.П. Зибров [1], Р.Х. Баграмов [1],
А.С. Анохин [1,2], И.В. Бондарь [1], В.В. Ткаченко [3]
[1]*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Калужское ш., 14, 142190, г. Троицк, г. Москва, Россия, shipkov@hppi.troitsk.ru*
[2]*Институт металлургии и материаловедения РАН им. А.А. Байкова, Ленинский пр. 49, 119334 г. Москва, Россия*
[3]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 г. Минск, Беларусь*

В работе представлены результаты синтеза наноразмерных порошков алмазоподобного нитрида бра с кубической решеткой (cBN) и их консолидации в условиях высоких давлений и температур. Синтез и спекание проводили в камерах с профилированными твердосплавными наковальнями типа «тороид» при давлениях 6-8 ГПа. Показано, что при использовании в качестве исходного материала высокодисперсных порошков гексагональной модификации (hBN) можно синтезировать нанопорошки cBN с узким распределением по размерам в интервале от 10 до 50 нм, что подтверждено результатами рентгеновского анализа и просвечивающей электронной микроскопии (рисунок 1). Подобраны режимы спекания под давлением экспериментальных порошков cBN, позволяющие сохранить размеры частиц в компактах в нанодиапазоне.

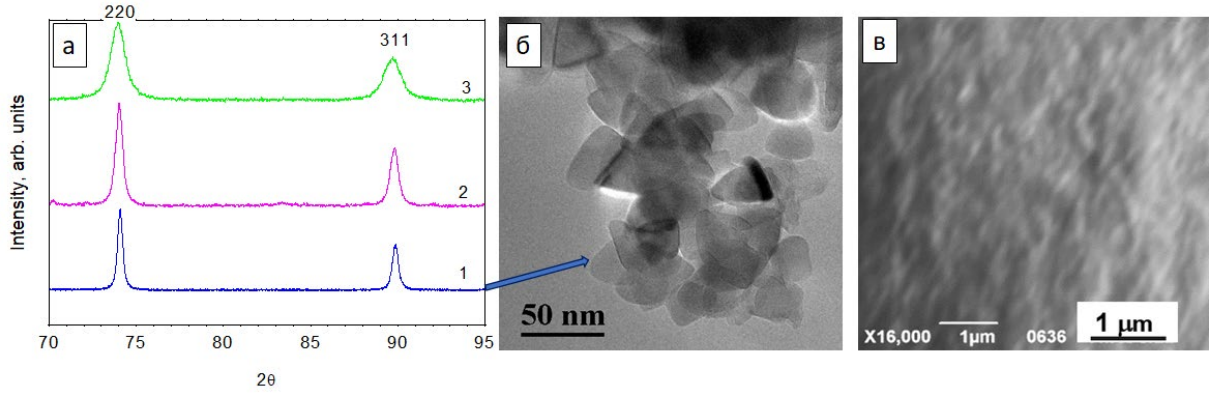


Рисунок 1. (а) – Дифрактограммы нанопорошков cBN со средними размерами ≈ 30нм (1), ≈ 20нм (2), ≈ 10нм (3); (б) - электронная микроскопия наночастиц cBN;
(в) - электронная микроскопия компакта из алмазоподобного нитрида бора

Для получения наноструктурированных свехтвердых компактов из нитрида бора без связки использовали также вюрцитную модификацию нитрида бора (wBN) динамического синтеза и ее смесь с высокодисперсными порошками cBN. Проведен сравнительный анализ микроструктуры и физико-механических свойств этих компактов. Изучены закономерности фазовых переходов wBN-hBN и wBN-cBN при различных термобарических условиях. Установлены оптимальные режимы спекания в камерах «тороид» и ячейках кубического аппарата НР-700, при которых подавлялся обратный фазовый переход в гексагональную форму и обеспечивалось частичное сохранение в структуре вюрцитной модификации, что увеличивает стойкость материала в инструменте к ударным нагрузкам.

Workshop «Functional materials for Energy Storage»

Семинар «Функциональные Материалы для Накопителей Энергии»

Effect of drying on the polyaniline-coated Prussian white cathode material for sodium-ion batteries

N. Samoylova, R. Vasin, S. Sumnikov, O. Ponomareva, M. Donets*, E. Korneeva, and E. Andreev

Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie St., 141980 Dubna, Russia,
**e-mail: mdonets@jinr.ru*

In recent years, sodium-ion batteries (SIBs) have attracted great attention due to the high demand of resources for large-scale applications [1, 2]. Sodium is one of the most abundant elements in the Earth's crust and is close to lithium in terms of its properties.

Prussian blue (PB) and its analogues, such as Prussian white (PW), are of intense interest as cathode material for SIBS [3-5]. Sodium iron hexacyanoferrate Prussian white (PW) is a commercially available cathode material for sodium-ion batteries. However, the structure of the hexacyanoferrate contains water, and the electrochemical performance of the PW strongly depends on the dehydration level of the material. Moreover, PW electrodes show a rapid capacity decrease, which is argued to be related with interfacial chemical reactions. A protective coating may be applied to suppress or completely prevent such reactions. In this work, we coated μm-sized PW particles with polyaniline (PANI) shell and investigated the effect of drying at increased temperature on PW@PANI material. The PW@PANI material exhibits a discharge capacity of 89.1 mAh g^{-1} at 85 mA g^{-1} with a capacity retention of 78.4% over 500 cycles. PW@PANI electrode dried at 140°C demonstrates a stable capacity of up to ≈ 97 mAh g^{-1} during first 200 cycles at 85 mA g^{-1}, however, its capacity retention over 500 cycles is lower compared to the non-dried PW@PANI electrode. Drying PW@PANI electrodes at 180°C leads to a rapid capacity decrease. For the first time, a comparative study of the PW powder soaked with HCl acid solution used in the synthesis of PW@PANI has been performed and its stable long-term electrochemical performance has been observed.

References

[1] T. Liu [et al.] Environ. Sci. 12 (2019) 1512-1533.
[2] H. Zhang [et al.] Adv. Energy Mater. 13 (2023) 2300149.
[3] X.-Y. Fu [et al.] Rare Met. 44(1) (2024) 34-59.
[4] Y. Bai [et al.] Eur. J. Inorg. Chem. 26 (2023) e202300246.
[5] W.-J. Li [et al.] Small 15 (2019) 1900470.

Aqueous zinc-ion battery based on ferrocyanide-graphene cathode

I. Sidorov, U. Novikau, and I. Razanau*
[1]*SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus", 19 P. Brovka Str., 220072 Minsk, Belarus, *e-mail: razanau@physics.by*

Zinc-ion aqueous batteries (ZIBs) have emerged as a promising energy storage technology due to their high safety, low cost, and environmental friendliness, leveraging the abundance of zinc and the non-flammability of aqueous electrolytes [1, 2]. Unlike lead-acid batteries, which suffer from low energy density and toxic lead components, ZIBs offer higher theoretical capacity and sustainability, while avoiding the resource scarcity and safety risks associated with lithium-ion batteries, such as thermal runaway and reliance on costly lithium and cobalt.

This work describes the development of aqueous zinc-ion battery based on ferrocyanide-graphene cathode. Zinc ferrocyanide is a known cathode material for ZIBs, but it is characterized by low conductivity and hence, low rate capability. The idea of the study was to improve zinc ferrocyanide based cathode rate capability by adding graphene-like carbon and ensuring good mechanical and electric contact between two components.

Zinc ferrocyanide-graphene composite was synthesized through an aqueous reaction of $ZnSO_4$ with $K_4Fe(CN)_6$ in the presence of graphene-like carbon flakes (figure 1). Structure and composition of this cathode material was studied using FTIR, Raman, SEM+EDX, XRD methods. The electrochemical properties were studied in a half-cell with aqueous 4M $Zn(ClO_4)_2$ electrolyte and metallic Zn reference electrode by charge-discharge cycling and cyclic voltammetry. The composite cathode material demonstrates significant improvement of the rate capability (up to 13C) owing to the inclusion of graphene-like carbon of high structural perfection acting as an efficient conductive additive.

A full cell was assembled with a metallic Zn anode and developed composite cathode. The full cell with 1.75 V operation voltage and 2 mAh initial capacity demonstrated the capacity retention of 86% after 1200 cycles at 1C rate. The developed aqueous zinc-ion battery is characterized by low safety risks and low cost of the materials used.

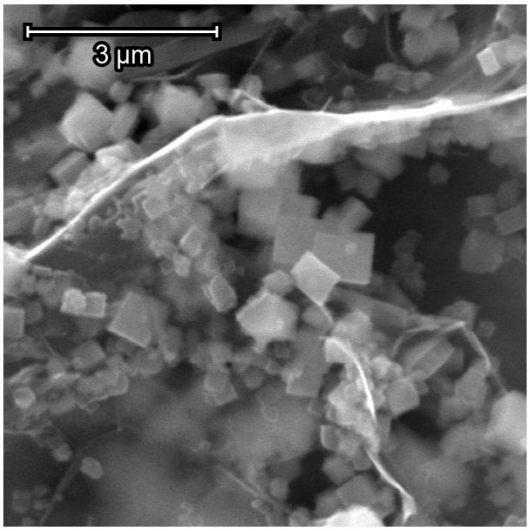


Figure 1. SEM image of zinc ferrocyanide-graphene composite

References

[1] P. Kumari [et al.] ACS Appl. Energy Mater. 7 (2024) 9634–9669.
[2] M. Han [et al.] Small 20 (2024) 2310293.

Sodium-ion battery anode materials based on carbonization products of polyoxadiazole

I. Razanau*, I. Sidorov, V. Lomonosov, P. Vasyutchanka, and U. Novikau
[1]SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus",
*19 P. Brovka Str., 220072 Minsk, Belarus, *e-mail: razanau@physics.by*

Sodium-ion batteries (SIBs) have emerged as a promising post-lithium energy storage technology due to the abundance, low cost, and widespread availability of sodium resources, addressing critical supply chain and sustainability limitations associated with lithium-ion batteries (LIBs) [1]. While SIBs operate on similar intercalation principles as LIBs, unique challenges in developing high-performance electrode materials and electrolytes arise for SIBs.

Hard carbon (HC) is a leading anode material for SIBs due to its disordered, porous structure, which facilitates reversible Na^+ storage through a combination of adsorption, intercalation, and pore-filling mechanisms. The low-voltage plateau region of the voltage profile of HC is associated with Na^+ filling of nanoscale voids and pores (< 2 nm) [2]. Hence, these nanopores are critical for enhancing capacity of the SIBs. On the other hand, the particle morphology of HC is also of high importance as it determines the specific surface area of the anode and hence, its initial Coulombic efficiency (ICE).

The aim of this work was the development of HC anodes for SIBs with tailored structure and morphology. For the first time, HCs for SIB anodes were synthesized by pyrolysis of polyoxadiazole (POD), commercially available mass produced synthetic polymer material known to carbonize with closed nanopore structure formation [3].

A range of HC anode materials was synthesized by pyrolysis of POD microfibers/ paper at temperature ranging from 900 to 1600 °C in inert atmosphere. Morphology, structure, and composition of the synthesized HC materials were studied using XRD, Raman and FTIR spectroscopy, optical microscopy and SEM with EDX element analysis. Electrochemical properties of the materials were studied in half cells with metallic Na reference and counter electrodes and 1M NaPF6 EC-DEC (+5% FEC) electrolyte. The synthesized materials demonstrate the ICE of up to 80% and specific capacity of up to 200 mA·h/g. The application perspectives of the developed HC material are discussed.

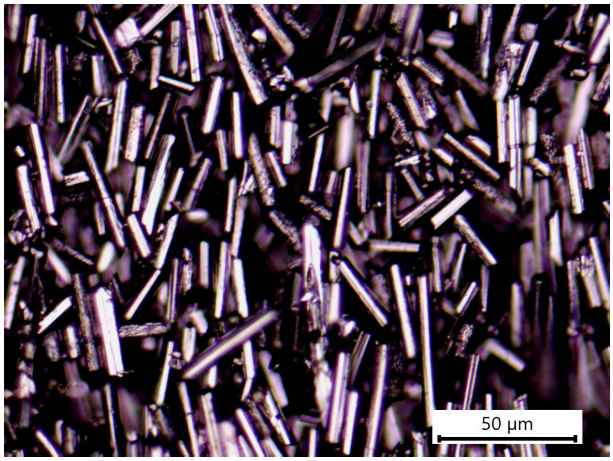


Figure 1. Microscopy image of the HC electrode prepared using POD fiber precursor

References

[1] X. Zhen [et al.] Adv. Ener. Mater. 12 (2022) 2201692–2201692.
[2] A. Vaseleiadis [et al.] Appl. Ener. Mater. 6 (2023) 127–140.
[3] M. Shioya [et al.] J. Mater. Sci. 34 (1999) 6015–6025.

Unlocking Solid-State Battery Performance via Electrolyte and Interface Design

Y. Wang[1]*, X. Xu[1], and L. Lu[1,2]*
[1] *College of Aerospace Engineering, Chongqing University, 400044 Chongqing, P. R. China, *e-mail: yumei.wang@nusricq.cn*
[2] *Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, 9 Engineering Drive 1, 117575 Singapore*

As a crucial component, solid-state electrolytes offer significantly enhanced safety compared to their liquid counterparts, particularly in addressing issues such as leakage, volatility, and flammability. Among the various types of solid-state electrolytes, ceramic/polymer composite electrolytes are especially promising due to their excellent mechanical strength and flexibility, which enable intimate contact with solid electrodes. Despite notable advancements in ionic conductivity, challenges such as poor electrolyte–electrode compatibility and high interfacial impedance continue to hinder the performance of solid-state batteries. To overcome these issues and improve ion transport across electrolyte–electrode interfaces, we propose a carefully engineered electrolyte design along with an innovative strategy that incorporates thin ferroelectric layers at the interfaces. The resulting solid-state electrolyte demonstrates exceptional cycling stability, highlighting its potential as a strong candidate for next-generation solid-state batteries.

Electrochemical fixation of carbon dioxide to carbon nanotube in molten salt

W. Xiao*
*College of Chemistry and Molecular Sciences, Wuhan University, 430072 Wuhan, P. R. China, *e-mail: 00030042@whu.edu.cn*

Utilization of CO_2-containing metallurgical flue gas to achieve an overall carbon-neutral metallurgy is an imperative and urgent task. Molten salt electrochemistry is a classic topic of industrial extraction of active metals. Inspired by the great success of molten salt electrochemistry in industrial metallurgy, the applicant has engaged in the elaborations of dissolution-coupling procedures in molten salt electrochemistry to establish the scientific basis and electrolytic technology for an overall carbon-neutral electrochemical conversion of carbon dioxide in molten salts [1–5].

The main contents include:

(1) Implemented a new research paradigm covering the whole chain of "electrolytic conversion-energy application-life cycle assessment".

(2) Unveiled new principles of preparing advanced carbon materials by the synergetic transformation of complex components in metallurgical flue gas.

(3) Established a new route towards inert anodes in molten salt electrolyzers based on in-situ conversion of carbon dioxide and methane oxidation.

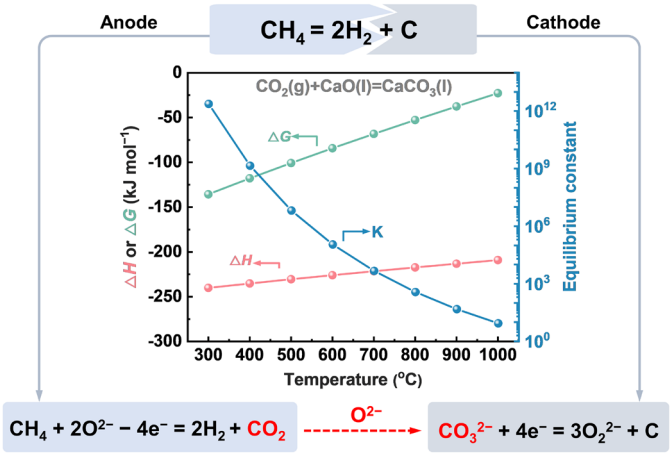


Figure 1. Schematic illustration on the electrochemical conversion of CO_2 and CH_4 in molten salt

References

[1] J. Cao [et al.] Angew. Chem. Int. Ed. 62 (2023) e202306877.
[2] SX Jing [et al.] Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202216315.
[3] W. Weng [et al.] Angew. Chem. Int. Ed. 60 (2021) 24905.
[4] Z.Y. Fan [et al.] Angew. Chem. Int. Ed. 60 (2021) 7664.
[5] W. Weng [et al.] Sci. Adv. 6 (2020) eaay9278.

Dynamical properties of the potassium *nido*-borates: ^{1}H, ^{11}B, and ^{39}K NMR studies

O.A. Babanova[1,2*], R.V. Skoryunov[1], A.V. Soloninin[1], and A.V. Skripov[1]
[1]*M.N. Miheev Institute of Metal Physics UB RAS, S. Kovalevskaya St., 18, 620108 Ekaterinburg, Russian Federation, *e-mail: babanova@imp.uran.ru*
[2]*Ural Federal University, Mira St., 19, 620075 Ekaterinburg, Russian Federation*

Polyhydroborate salts, described by the general formula $M_x[B_mH_n]_y$, are the ionic compounds consisting of metal cations M and complex anions $[B_mH_n]$, such as $[B_{10}H_{10}]^{2-}$, $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ or $[B_{11}H_{14}]^{-}$. The characteristic feature of the salts is the occurrence of order-disorder phase transitions accompanied by an abrupt acceleration of both the reorientational motion of anions and the diffusive motion of the metal cations. Polyhydroborates are considered to be an important class of energy materials attracting significant attention [1]. The main area of potential applications is related to their electrical conduction properties, i.e. disordered phases of *closo*-borates $M_2B_{12}H_{12}$ and $M_2B_{10}H_{10}$ (M = Na, Li) have an extremely high ionic conductivity [2,3]. In addition, these materials are very stable, so they are considered as promising solid electrolytes for lithium- and sodium-ion batteries [4,5]. Recently, investigations of the basic properties of hydroborate salts have been extended to include *nido*-borates consisting of metal cations and anions $[B_{11}H_{14}]^{-}$ [6]. It has been found that many properties of sodium *nido*-borates and carbon-substituted *nido*-borates resemble those of the *closo*-type counterparts [7]. In the recent research [8], potassium *nido*-(carba)borates have been studied, and it was found that the high-temperature polymorphs could be considered as superionic conductors with ionic conductivity of $5.6\cdot10^{-4} – 1.7\cdot10^{-2}$ S cm^{-1}.

In the present work, we investigate the anion and cation dynamics in *nido*-borates $KB_{11}H_{14}$, K-7-$CB_{10}H_{13}$, K-7,8-$C_2B_9H_{12}$, and K-7,9-$C_2B_9H_{12}$ using ^{1}H, ^{11}B and ^{39}K nuclear magnetic resonance measurements of the spectra and spin-lattice relaxation rates.

The measured temperature dependences of the proton spin-lattice relaxation rates are consistent with thermally-activated reorientations of the anions. The behavior of temperature dependence of the proton spin-lattice relaxation rates indicates that the transition from the low-T ordered phase to the high-T disordered phase leads to the abrupt acceleration of the anion reorientations. The corresponding activation energies for the ordered and disordered phases of $KB_{11}H_{14}$, K-7-$CB_{10}H_{13}$, K-7,8-$C_2B_9H_{12}$, and K-7,9-$C_2B_9H_{12}$ are derived from the experimental data and discussed in relation with the structural features of these compounds. The measured ^{39}K spin-lattice relaxation rates are governed by fluctuations of the quadrupolar interaction due to diffusive jumps of K^+ ions. For these compounds, near the phase transition point, the ^{39}K spin-lattice relaxation exhibits a ‘folding’ accompanied by the change of the sign of its temperature dependence. Such a behavior indicates that the transition from the ordered to the disordered phase leads to the abrupt acceleration of the diffusive K^+ jumps. The ^{39}K NMR line for $KB_{11}H_{14}$, K-7-$CB_{10}H_{13}$, K-7,8-$C_2B_9H_{12}$, and K-7,9-$C_2B_9H_{12}$ becomes extremely narrow (about 0.2 kHz) in the disordered phase. This indicates that K^+ ions participate in the long-range diffusion, and thus contribute to the ionic conductivity.

Acknowledgement. The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Function” No. 122021000035-6).

References

[1] R. Mohtadi [et al.] Nat. Rev. Mater. 2 (2016) 6091.
[2] T. Udovic [et al.] Adv. Mater. 26 (2014) 7622-7626.
[3] W.S. Tang [et al.] Adv. Energy Mater. 6 (2016) 1502237.
[4] S. Kim [et al.] Nat. Commun. 10 (2019) 1081.
[5] L. Duchêne [et al.] Energy Storage Mater. 25 (2020) 782-794.
[6] W.S. Tang [et al.] Chem. Mater. 29 (2017) 10496-10509.
[7] D.H.P. Souza [et al.] J. Mater. Chem. A, 9 (2021) 15027-15037.
[8] M.B. Amdisen [et al.] to be published (arXiv:2503.02430).

Моделирование транспорта заряда Li^+ через границу раздела металлический литий/твердотельный электролит с помощью неравновесной молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов

А. С. Буров*, А. М. Абакумов, и Д. А. Аксёнов
Сколковский институт науки и технологий, Территория Инновационного Центра «Сколково», Большой бульвар д. 30, стр. 1, 121205 г. Москва, Россия.
**e-mail: arseniy.burov@skoltech.ru*

Индустриальное применение твердотельных электролитов может стать ключевой технологией будущего, которая позволит повысить удельную плотность энергии и безопасность металл-ионных аккумуляторов, что крайне важно для портативной электроники и автомобилестроения [1]. Однако одним из основных ограничивающих факторов коммерциализации твердотельных электролитов является проблема создания границ раздела электрод/электролит с низким сопротивлением и высокой стабильностью при циклировании. Изучение данных границ раздела экспериментально затруднено в связи с малыми размерами интерфейсов (~10 Å), на которых проявляется эффект. В связи с этим требуется проведение компьютерного моделирования для более детального исследования феномена переноса заряда через интерфейс.

В данной работе мы исследовали транспорт Li^+ в системе с границей раздела между металлическим Li и перспективным твердотельным электролитом $Li_7La_3Zr_2O_{12}$ (LLZO) со структурой типа граната. Чтобы учесть влияние температуры, динамики решетки, кооперативных эффектов, а также обеспечить качественное статистическое усреднение, в работе был использован метод молекулярно-динамического моделирования (МД) с использованием машинно-обучаемых межатомных потенциалов на основе моментов инерции (moment tensor potentials, MTP) [2]. Данный подход позволяет быстро находить энергии вакансий и механические свойства с точностью квантово-химических расчетов.

Кроме того, наши результаты показывают, что MTP потенциалы успешно воспроизводят кооперативную миграцию Li^+, демонстрируя хорошее согласие с экспериментом. Исследование переноса Li^+ через границу Li/LLZO с помощью МД-MTP моделирования также показало отличное согласие с нашими предыдущими расчетами с использованием метода упругой ленты (nudged elastic band, NEB): ТФП-NEB расчетами [3]. Полученные результаты составят основу для целенаправленного дизайна стабильных границ раздела Li/LLZO.

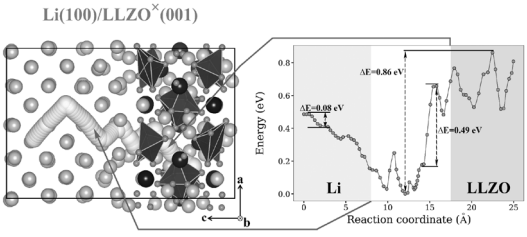


Рисунок 1. Транспорт ионов Li+ через границу раздела Li/LLZO

Благодарность (финансирование)
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 27-73-30003.

Список использованных источников:
[1] Q. Liu [*et al.*] J. Power Sources 389 (2018) 120–134.
[2] E. Podryabinkin [*et al.*] Comput. Mater. Sci. 140 (2017) 171–180.
[3] A. Burov [*et al.*] Phys. Rev. B. 109(4) (2024) 045305.

Структурные особенности ионного обмена в слоистых катодных материалах металл-ионных аккумулятров

А. А. Голубничий*, А. М. Абакумов
*Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар , д. 30, стр. 1, 121205 г. Москва, Российская Федерация, *e-mail: alexander.golubnichiy@skoltech.ru*

Смешанные оксиды металлов (AMO_2) со слоистой структурой, в которой слои переходных металлов чередуются со слоями щелочного металла, являются одними из самых широко применяемых в коммерции катодных материалов металл-ионных аккумуляторов [1]. В качестве наиболее распространенного метода получения таких соединений используется высокотемпературный отжиг, при котором предварительно полученный смешанный гидроксид переходных металлов реагирует с источником щелочного металла. Получение слоистой структуры с помощью такого метода синтеза может быть осложнено склонностью некоторых соединений к образованию дефектов катионного разупорядочения, а также термодинамической нестабильностью целевых фаз. Для преодоления вышеуказанных ограничений может быть использован метод ионного обмена, заключающийся в замене А-катионов посредством выдержки слоистого соединения в растворе или расплаве солей щелочного металла.

В данной работе продемонстрированы примеры применения ионного обмена для получения метастабильной фазы P2-типа $K_{1/3}Co_{1/3}Mn_{2/3}O_2$ и бездефектной фазы O3-типа $LiNi_{0.5}Mn_{0.5}O_2$ из натриевых структурных аналогов. Методами рентгено-фазового анализа и просвечивающей электронной микроскопии были изучены промежуточные фазы, образующиеся в ходе ионного обмена. В случае фазы P2-типа $K_{1/3}Co_{1/3}Mn_{2/3}O_2$ показано возникновение упорядочения натрия и калия между слоями А-катионов в промежуточной фазе (рис.1), а также внутрислоевое упорядочение ионов калия и вакансий в конечной фазе [2].

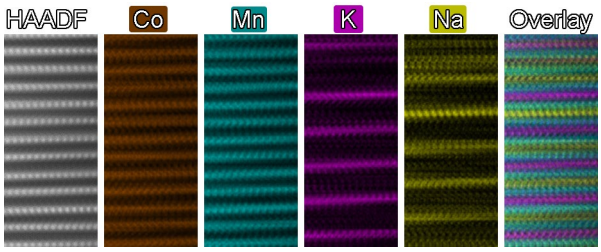


Рисунок 1. Изображение атомной структуры, полученное методом сканирующей просвечивающей микроскопии и соответствующие элементные карты

Для фазы O3-типа $LiNi_{0.5}Mn_{0.5}O_2$ продемонстрировано отсутствие упорядочения катионов натрия и лития в промежуточной фазе. Исследование структурных превращений в процессе электрохимического циклирования промежуточной фазы показало образование локальных включений натриевой слоистой фазы при высоких степенях делитирования. Полученные результаты ставят вопрос о положительной роли натрия как допирующего агента в слоистых литиевых соединений.

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 23-73-30003).

Список литературы:

[1] B. Huang [и др.] Small 18 (2022) 2107697.
[2] P. K. Jha [и др.] Adv. Funct. Mater. 34 (2024) 2410665.

The rivet effect: a new insight into improving structural stability in Mg-doped Ni-rich single-crystal NMC layered oxides

I. Moiseev*, A. Golubnichiy, and A. Abakumov
*Skolkovo Institute of Science and Technology, 30 Bolshoy Boulevard, bld. 1, 121205 Moscow, Russia, *e-mail: ivan.moiseev@skoltech.ru*

Layered transition metal oxides (TM) $LiNi^{2/3+}_xMn^{4+}_yCo^{3+}_zO_2$ with a high nickel content ($x \geq 0.6$, so-called Ni-rich NMC), are considered promising cathode materials for high-energy density Li-ion batteries (LIBs). However, the rapid specific capacity degradation during prolonged electrochemical cycling limits their practical application. This obstacle is a consequence of the accumulation of structural stresses in Ni-rich NMCs during (de)lithiation, which leads to deterioration of the mechanical integrity of the cathode due to cracking of secondary particles, while the penetration of the electrolyte into the particles through microcracks accelerates the process of degradation of the material. A promising approach to suppress irreversible structural changes is the chemical modification of the cation sublattice. Elements that can occupy both Li and TM positions are selected for doping into the cationic sublattice, however, the majority of published data on the cationic substitution of Ni-rich NMC is purely empirical in nature, without clarifying the role of doping additives.

As part of this work, Mg-substituted $Li(Ni_{0.6}Mn_{0.2}Co_{0.2})_{1-x}Mg_xO_2$ ($x=0.05, 0.1$) were synthesized via flux-growth technique in the form of single crystal particles in order to suppress the formation of microcracks during galvanostatic cycling, as well as to clarify the mechanism of stabilization and suppression of crack formation process. The joint Rietveld refinement of X-ray and neutron diffraction showed that Mg^{2+} cations in the layered oxide structure occupy simultaneously the octahedral positions of lithium (3*a*) and TM (3*b*). detailed comparative crystallographic study with synchrotron X-ray and neutron powder diffraction combined with support from ab initio calculations and atomic-resolution scanning transmission electron microscopy compositional mapping revealed that Mg^{2+} resides at the TM site up to ~3% saturation level, and then populates the Li site. The Mg cations at the Li site suppress gliding of the close-packed layers, the associated O3-to-O1 transition, accompanying tensile strain and crack initiation thus acting as clamps for the TM layers - the “rivet” effect [1]. Electrochemical impedance spectroscopy, galvanostatic cycling and galvanostatic intermittent titration indicate hindered Li-ion diffusion by Mg population of the Li site that deteriorates the electrochemical capacity with increasing the Mg content. These findings call for the strategy of combining the Mg doping with shortening the Li^+ diffusion pathways. The report will show that Mg in Ni-rich NMCs plays the role of a "stabilizer" of the structure and suppresses the formation of microcracks, as well as their spread.

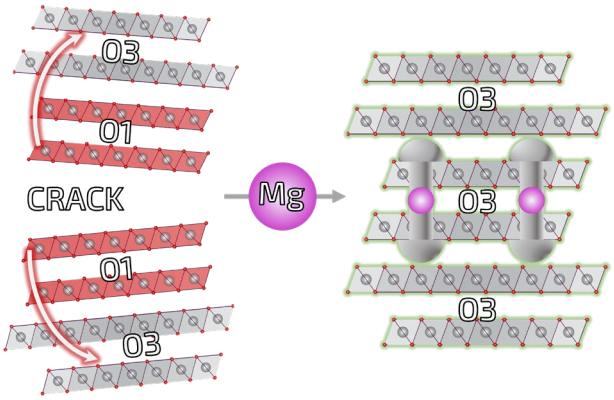


Figure 1. Schematic illustration of close-packed layers, gliding suppression by Mg^{2+}, preventing tensile strain accumulation and crack initiation

Acknowledgement. Research was funded by Russian Science Foundation (RSF) (Grant № 23-73-30003).

References

[1] I. Moiseev [et al.] Journal of Materials Chemistry A (2025) DOI: 10.1039/D4TA08998G.

Химическая совместимость между Ga-LLZO твердым электролитом и литий-обогащённым слоистым оксидным в качестве катода для полностью твердотельных аккумуляторов

Н. Б. Тимушева*, А. А. Голубничий, А. В. Морозов, А.С. Буров, Д.А. Аксёнов, А.А.Савина, А.М. Абакумов
Сколковский институт науки и технологий, Территория Инновационного Центра «Сколково», Большой бульвар д. 30, стр. 1, Москва 121205, Россия,
**e-mail: Natalia.Timusheva@skoltech.ru*

Полностью твердотельные аккумуляторы на основе твердых электролитов со структурой граната считаются перспективной альтернативой традиционным аккумуляторам с жидким органическим электролитом ввиду их повышенной безопасности во время работы и возможности совмещения с электродами с высокой плотностью энергии благодаря широкому окну электрохимической стабильности (0,05-5 В отн. Li/Li^+). В данной работе мы провели комплексное исследование высокотемпературной химической совместимости между твердым электролитом $Li_{6.4}Ga_{0.2}La_3Zr_2O_{12}$ (Ga-LLZO) и высокоэнергетическим литий обогащенным слоистым оксидом $Li_{1.2}Ni_{0.2}Mn_{0.6}O_2$ (LNM) в качестве катода. Полученные данные также сравнивались с результатами, полученными для типичного катодного материала со структурой слоистого оксида с высокой плотностью энергии $LiNi_{0.8}Mn_{0.1}Co_{0.1}O_2$ (NMC811).

При высоких температурах спекания, необходимых для обеспечения плотного контакта между материалами твёрдого электролита и катодным слоем, реакция между литий обогащенным катодом и Ga-LLZO происходит при 700-900ºC. Основные продукты реакции совместного спекания LNM/Ga-LLZO при различных температурах сравниваются с таковыми для системы NMC811/Ga-LLZO на рис.1. Было установлено, что LNM литий обогащённый слоистый оксид реагирует с Ga-LLZO гораздо интенсивнее, чем NMC811, образуя главным образом два соединения - $La(Ni, Mn)O_3$ и Li_2ZrO_3. Li_2ZrO_3 это уникальный продукт реакции LNM/Ga-LLZO, обнаруженный впервые, в то время как $La(Ni, Mn)O_3$ ранее встречался в литературе как продукт реакции Ga-LLZO и NMC слоистых оксидов при высоких температурах. В случае использования никель обогащенного NMC811 главным продуктом реакции является $La_4Li(Ni,Mn,CO)O_8$. Результаты реакций подтверждены данными порошковой рентгеновской дифракции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии.

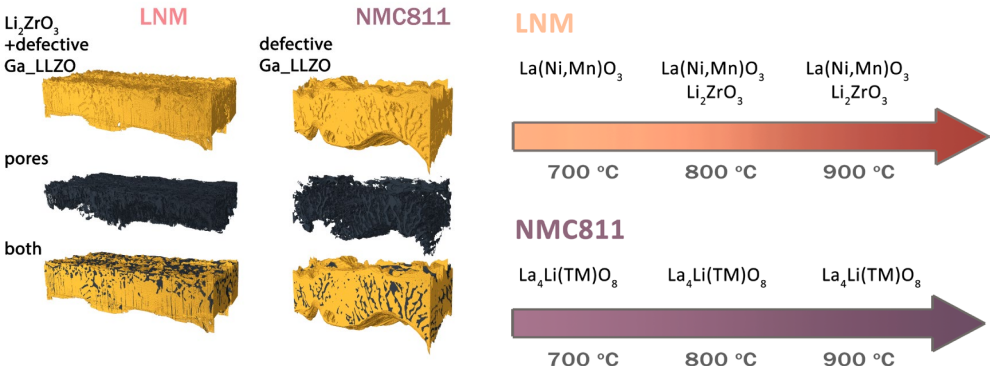


Рисунок 1. Slice&View реконструкция области реакции со стороны электролита и основные продукты реакции (> 5 мас.%) между Ga-LLZO и катодными материалами при различных температурах совместного спекания

Благодарность (финансирование). Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект #23-73-20002)



Государственное научно-
производственное объединение
«Научно-практический центр
Национальной академии наук Беларуси
по материаловедению»

State Scientific and Production
Association «Scientific-Practical
Materials Research Centre of the
National Academy of Sciences of Belarus»

Республика Беларусь, 220072, г. Минск,
ул. Петруся Бровки, д. 19
e-mail: priemnaya@physics.by

Republic of Belarus, 220072, Minsk,
Petrus Brovka str., 19
e-mail: priemnaya@physics.by