

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»  
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова  
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»



**Сборник тезисов докладов**  
**Молодежная Школа**  
**по физике конденсированного состояния**  
**(Школа ФКС-2024)**

11 - 15 марта 2024 года, пос. Лосево, Ленинградская область

Гатчина, 2024

В данном выпуске представлены тезисы докладов Молодежной Школы по физике конденсированного состояния (Школа ФКС-2024), 11 - 15 марта 2024 года, Гатчина.

Сборник подготовили: Губанова Н.Н., Васильев А.И., Васильева В.Н.

**Организатор:** НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

**Программный комитет:**

Воронин Владимир Владимирович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ) - председатель программного комитета;

Аристов Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ) - сопредседатель программного комитета.

Авдеев Михаил Васильевич, д.ф.-м.н. (ОИЯИ);

Волков Владимир Владимирович, д.х.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - институт кристаллографии и фотоники);

Григорьев Сергей Валентинович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Демишев Сергей Васильевич, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН);

Дмитриенко Владимир Евгеньевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - институт кристаллографии и фотоники);

Зобкало Игорь Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Кравцов Евгений Алексеевич, д. ф.-м. н. (ИФМ УрО РАН);

Кулевой Тимур Вячеславович, д.т.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ККТЭФ)

Курбаков Александр Иванович, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Марченков Никита Владимирович, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»);

Мушников Николай Варфоломеевич, д.ф.-м.н., акад. РАН (ИФМ УрО РАН);

Ниязов Рамиль Асхатович, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Рогожкин Сергей Васильевич, д.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»);

Савицкая Наталья Евгеньевна, д.ф.-м.н. НИЦ («Курчатовский институт» - ПИЯФ);

Смирнов Александр Иванович, д.ф.-м.н., член-кор. РАН (ИФП РАН);

Стишов Сергей Михайлович, д.ф.-м.н., акад. РАН (ИОФ РАН);

Чубова Надежда Михайловна, к.ф.-м.н. (НИЦ «Курчатовский институт»).

**Организационный комитет:**

Васильева Виктория Николаевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), председатель оргкомитета;

Васильев Андрей Иванович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Губанова Надежда Николаевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Дьячков Максим Вадимович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Куга Наталья Алексеевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), финансовые вопросы;

Матвеев Василий Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Никитина Наталия Владимировна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), визовая поддержка;

Пшеничный Кирилл Александрович (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), информационное обеспечение;

Сазонова Яна Дмитриевна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), техническое обеспечение;

Галактионова Татьяна Викторовна (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), экономические вопросы.

**Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.**

© НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2024

## Структурные особенности и магнитные свойства в твердом растворе $\text{SrFe}_{12-x}\text{Ni}_x\text{O}_{19}$ ( $x=0 - 0.3$ )

А.С. Абиев<sup>1</sup>, А.В. Труханов<sup>2,3</sup>, С.В. Труханов<sup>2,3</sup>, М. Чебела<sup>4</sup>, С.В. Сумников<sup>1</sup>, В.А. Турченко<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>ГНПО «Научно-практический центр материаловедения НАН Беларуси», Минск

<sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

<sup>4</sup>Институт ядерных наук Винча, Белград

УДК: 538.9, 537.9

$\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$  представляет собой магнитожесткий материал с высокой коэрцитивной силой, который обладает высокой магнитокристаллической анизотропией и осью легкого намагничивания вдоль оси  $c$ . Данный материал может применяться в носителях магнитной записи информации и в компонентах микроволновых, высокочастотных и магнитооптических устройств [1].

Керамические образцы твердого раствора гексаферритов  $\text{SrFe}_{12-x}\text{Ni}_x\text{O}_{19}$  ( $x= 0-0.3$ ), полученные методом соосаждения, были исследованы на нейтронном дифрактометре ФДВР при комнатной температуре, что позволило изучить особенности кристаллической и магнитной структуры данного ферромагнитного материала в зависимости от степени замещения магнитоактивных ионов. Уточнение нейтронных дифрактограмм было выполнено методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

Частичное замещение магнитоактивных ионов Fe ионами Ni приводит к монотонному уменьшению объема элементарной ячейки от  $692.97(2) \text{ \AA}^3$  до  $692.07(2) \text{ \AA}^3$ . Снижение величины магнитного момента, рассчитанного по данным нейтронных спектров, подтверждается уменьшением температуры Кюри от 659 К ( $x= 0.1$ ) до 655 К ( $x= 0.3$ ) с ростом  $x$ . Подобное поведение материала может быть обусловлено нарушением сверхобменных взаимодействий между атомами Fe, аналогично [2].

*Авторы выражают благодарность Д. Линнику (ДонФТИ) за изготовление образцов.*

1. Zi Z.F. et al. Structural and magnetic properties of  $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$  hexaferrite synthesized by a modified chemical co-precipitation method // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2008. V.320. С. 2746 – 2751.
2. Turchenko V.A et al. Features of structure, magnetic state and electrodynamic performance of  $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$ . // Scientific Reports. 2021. V.11. С. 18342.

## Дисперсия спиновых волн в аморфных ферромагнетиках

Л.А. Азарова<sup>1,2</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>, К.А. Пиеничный<sup>1</sup>, О.И. Утесов<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт Петербург

<sup>3</sup>Center for Theoretical Physics of Complex Systems, Institute for Basic Science, Daejeon

УДК: 538.913, 538.955

Аморфные магнитные материалы представляют значительный интерес, как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Наличие структурного, а также магнитного беспорядка играет важную роль в аморфных системах и приводит к тому, что их структурные и магнитные свойства могут быть довольно сложными. Магнитные характеристики аморфных и нанокристаллических магнитомягких материалов хорошо описываются в терминах модели неоднородного на наномасштабе магнетика со случайной анизотропией. Однако, несмотря на успех в описании статических свойств магнитомягких аморфных магнетиков, их динамические особенности и, в частности, особенности дисперсии магнонов не были детально исследованы, поэтому задача прямого измерения спектра спиновых волн методами рассеяния нейтронов оказывается актуальной. В работе показана необходимость учета сложной, обусловленной случайной анизотропией, модификации квадратичного закона дисперсии спиновых волн в аморфных ферромагнетиках:  $\epsilon(q) = Aq^2 + g\mu_B H + \delta\omega(q)$  где  $\delta\omega(q)$  - линейная по  $|q|$  добавка, связанная со случайной анизотропией [1-3]. Продемонстрирована возможность учета этой модификации в виде линейной добавки в спектре спиновых волн, которая в экспериментах по нейтронному рассеянию может быть учтена как «эффективная энергетическая щель». Использован уникальный, «гатчинский» метод малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов с наклонной геометрией поля. Теоретически и экспериментально показано, что с помощью этого метода можно измерять не только жесткость спиновых волн, но и энергетическую щель в спектре спиновых волн аморфных ферромагнетиков порядка 0.010 мэВ с точностью до 0.001 мэВ. В экспериментах обнаружена внутренняя, связанная со случайной анизотропией, «эффективная энергетическая щель» в спектре спиновых волн сплава Fe<sub>48</sub>Ni<sub>34</sub>P<sub>18</sub>, в широком диапазоне температур и магнитных полей. Величина «щели», равная 0.015 мэВ, измерена с точностью 0.002 мэВ, что является рекордным, по своей точности, достижением. Экспериментально показано наличие линейной добавки в спектре спиновых волн, что подтверждает справедливость «теории случайной анизотропии» для аморфных ферромагнетиков.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No.075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г). Вклад в работу Утесова О.И. выполнен при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-00028).*

1. Игнатченко В. А., Исаков Р. С. Спиновые волны в случайно-неоднородной анизотропной среде // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 1977. Т.72.
2. Исаков Р. С. и др. Размерность системы Обменно-связанных зерен и магнитные свойства нанокристаллических и аморфных ферромагнетиков // Письма в ЖЭТФ. 2000. Т.72. №. 6. С. 440-444.
3. С. В. Григорьев и др. Дисперсионное соотношение в аморфных ферромагнетиках // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2023. Т.164. вып. 4 (10). С. 538–549.

## Влияние дефектов на температуру магнитного фазового перехода в новых магнитных топологических изоляторах $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$

Х.В. Алигулиева<sup>1</sup>, В.Н. Зверев<sup>2</sup>, Н.А. Абдуллаев<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан

<sup>2</sup>Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>Институт физики МНО Азербайджана, Баку

<sup>2</sup>Бакинский Государственный Университет, Баку

УДК: 538.9, 537.9

В настоящей работе представлены данные электрических и гальваномагнитных (эффект Холла и магнитосопротивление) исследований монокристаллов  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ . В отличие от изоструктурного антиферромагнитного соединения  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  соединение  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  является ферромагнетиком, о чём свидетельствуют наши данные измерений аномального эффекта Холла, а также магнитолевой зависимости намагниченности и температурной зависимости магнитной восприимчивости [1,2]. Такое различие обусловлено присутствием значительного количества антисайтных дефектов вследствие перемены мест атомами Mn и Sb [1,2]. Влияние дефектов сказывается не только на магнитных свойствах, но и проявляется в электрических измерениях. Нами были исследованы температурные зависимости удельного сопротивления  $\rho(T)$  в широкой области температур 1.4-300К. Зависимости  $\rho(T)$  имеют «металлический» вид с особенностями при температурах 20-40 К, обусловленных магнитным фазовым переходом парамагнетик-ферромагнетик. В изученных шести образцах наблюдаются различные температуры Кюри:  $T_c=22\text{К}$ ; 26К; 27К; 30К; 39К и 40К. В наиболее дефектном образце самая низкая температура Кюри  $T_c=22\text{К}$ , а при низких температурах наблюдается слабая локализация вследствие разупорядочения структуры. В образце с низким  $T_c=26\text{К}$  также наблюдается склонность к слабой локализации.

Наши исследования комбинационного рассеяния света подтверждают обоснованность предположения о дефектности структуры соединения  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ . Одним из вопросов требующих ответа является следующий: почему спектры комбинационного рассеяния света кристаллов  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  очень схожи с таковыми для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [3], а спектры комбинационного рассеяния света кристаллов  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  [4] сильно отличаются от таковых для  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ? Согласно теоретическим расчётам, атомы Mn неподвижны в смещениях КР-активных мод и потому становится ясным сходство спектров комбинационного рассеяния света кристаллов  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Исследования комбинационного рассеяния света  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  выявили, что в дефектных областях двух различных образцов  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  спектры практически совпадают со спектрами комбинационного рассеяния света кристаллов  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ , с той лишь разницей, что дополнительно наблюдается низкочастотная мода  $69\text{ см}^{-1}$ , характерная для межслоевых смещений в  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ . Поэтому логично предположить дефектность структуры соединения  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ .

1. Wimmer S., Chulkov E.V., Rader O., et al. Mn-Rich  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ : A Topological Insulator with Magnetic Gap Closing at High Curie Temperatures of 45–50 K // *Advanced Materials*. 2021. V. 33. No. 42. P. 2102935 (11p.).
2. Murakami T., Nambu Y., Kageyama H., et al. Realization of interlayer ferromagnetic interaction in  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  toward the magnetic Weyl semimetal state // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 100. No. 19. P. 195103 (6p.).
3. Абдуллаев Н.А., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В. и др. Динамика решетки  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и колебательные моды в топологических изоляторах  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ - $n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$  // *Письма в ЖЭТФ*. 2022. Т. 115. № 12. С. 801-808.
4. Максимов А.А., Тартаковский И.И., Абдуллаев Н.А., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В. и др. Температурные исследования спектров комбинационного рассеяния света в магнитных топологических изоляторах  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  // *Письма в ЖЭТФ*. 2023. Т. 118. № 5. С. 361-366.

## Волчок Томпсона как механическая модель ядерного магнитного резонанса

*А.И. Андреев*

*ФГБОУ ВО Астраханский государственный технический университет, Астрахань*

УДК: 538.9, 539.143.4

Движение атома с полным угловым моментом и соответствующем ему магнитным моментом можно представить, как классический гиромагнитный волчок. В ходе ядерного магнитного резонанса (ЯМР) происходит переориентация магнитного момента ядра, в классической механике это можно сравнить с отклонением гироскопа при постоянном воздействии внешней силы [1].

Рассматривая движение магнитного момента во вращающейся системе координат с заданной угловой скоростью, можно увидеть, что в лабораторной системе при условии, что магнитное поле заменяется на эффективное поле, направление магнитного момента будет прецессировать вокруг вектора этого поля.

Если в начальный момент вектор был направлен по полю, то включение даже небольшого по величине магнитного поля приведет к периодическому опрокидыванию магнитного момента на  $180^\circ$  [2].

Если сравнивать ларморовскую прецессию частицы с ненулевым спином с прецессией вращающегося неоднородного шара (что является простейшей моделью волчка Томпсона), то механическим аналогом действия магнитного поля на частицу можно представить воздействие поверхности на вращающееся тело.

Особенностью прецессии китайского волчка является то, что полная механическая энергия убывает на движение без проскальзывания значительно медленнее, чем на движениях с проскальзыванием. Для ЯМР также должен существовать эффект снижения скорости изменения направления вектора магнитного момента ядра, при существовании поперечного поля. Также, влияние температуры и увеличение атомной массы элемента должно существенно повышать частоты ЯМР.

В общем плане поведение при прецессии волчка Томпсона позволяет просчитывать модель ЯМР и существенно упростить первоначальный расчёт для различных ядер, регулируя в механической модели массу и начальную скорость прецессии волчка, задавая в качестве внешней силы - силу трения.

1. Воронов В.К. Ядерный магнитный резонанс // Соросовский образовательный журнал. 1996. Т. 2. №. 9. С. 70-75.
2. Гуденко С.В. Введение в физику магнитного резонанса // Учебно-методическое пособие по курсу Общая физика. М.: МФТИ. 2013. 36 с.

# Origin of high pressure phase transition in the $\text{Ln}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Pr}$ ) Carpy- Galy phases

A.G. Asadov<sup>1,2,3</sup>, D.P. Kozlenko<sup>1</sup>, A.I. Mammadov<sup>2</sup>, R.Z. Mehdiyeva<sup>2</sup>, S.E. Kichanov<sup>1</sup>, E.V. Lukin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

<sup>2</sup>Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Sciences, Baku

<sup>3</sup>Khazar University, Baku

УДК: 538.9

The investigation of the layered perovskite-like compound  $\text{Ln}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Pr}$ ) involved a comprehensive examination of its structural and vibrational characteristics employing X-ray diffraction and Raman spectroscopy under pressures reaching 30 GPa. The findings suggest the occurrence of a gradual structural phase transition from the initial ferroelectric monoclinic  $\text{P}2_1$  phase to the paraelectric monoclinic  $\text{P}2_1/\text{m}$  phase at approximately  $P_{\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7}=19.0$  Gpa,  $P_{\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7}=16.7$  Gpa and  $P_{\text{Pr}_2\text{Ti}_2\text{O}_7}=13.8$  GPa. This pressure-induced transition manifested anomalies in unit cell compression and alterations in the pressure-dependent behavior of vibrational modes [1]. The monoclinic crystal structure of  $\text{P}2_1$  symmetry, as predicted by group theory, presented 132 Raman-active modes. A discernible increase in observed mode wavenumbers was noted at pressures below the phase transition pressure, with anomalies in the pressure behavior of specific vibrational modes near the transition pressure being linked to changes in pressure coefficients [2]. Noteworthy alterations were observed in certain vibrational modes, such as the disappearance of some and the appearance of new modes post-transition, signifying a distortion in the  $\text{TiO}_6$  octahedra [3]. These anomalies, occurring in proximity to specific pressures, indicate the continuous nature of the phase transition. Furthermore, anomalies in the pressure behavior of lattice parameters were observed at approximately around 14.0 GPa -19.0 GPa, signifying a structural phase transformation. The anisotropic nature of lattice compression was evident, with the c-axis in the monoclinic phases displaying the highest compressibility. The average compressibility of the "c" parameter was approximately three times greater than that of the "a" and "b" parameters. Even post-structural phase transition, a pronounced compression anisotropy persisted. Additionally, a marked increase in the monoclinic angle " $\beta$ " in the vicinity of the transition pressure was documented.

1. M. Nanot, F. Queyroux, J.C. Gilles, A. Carpy, J. Galy. Phases multiples dans les systèmes  $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ - $\text{NaNbO}_3$  et  $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ - $\text{CaTiO}_3$ : Les séries homologues de formule  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$  // J. Solid State Chem. 1974. V.11. P. 272–284.
2. A.G. Asadov, D.P. Kozlenko, A. Mammadov, R. Mehdiyeva, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, O.N. Lis, A.V. Rutkauskas. A structural phase transition in  $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  at high pressure // Physica B: Condensed Matter. 2023. V.655. P. 414753.
3. R.J. Angel, J. Zhao, N.L. Ross. General rules for predicting phase transitions in perovskites due to octahedral tilting // Phys. Rev. Lett. 2005. V.95.

# Применение нового алгоритма реконструкции данных нейтронной томографии для исследования артефактов из некрополя Волна 1

Б.А. Бакиров<sup>1,2</sup>, И.А. Сапрыкина<sup>1,2</sup>, С.Е. Кичанов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Институт археологии Российской академии наук, Москва

УДК: 538.97+904

Городской некрополь Волна 1, расположенный на Таманском полуострове Краснодарского края, является одним из важнейших археологических памятников, характеризующих взаимодействие варварского и греческого населения Северного Причерноморья в VI–V вв. до нашей эры. Материалы некрополя, полученные в ходе раскопок, представлены разнообразными керамическими предметами, стеклом, оружием, украшениями, монетами и другим похоронным инвентарем как греческого, так и варварского и смешанного происхождения [1, 2]. Обширный материал некрополя требует комплексного подхода к исследованию с привлечением неразрушающих естественнонаучных методов.

Одним из таких неразрушающих методов является нейтронная томография. Благодаря большой глубине проникновения, чувствительности к легким элементам и хорошему контрасту для элементов с близкими атомными номерами нейтронная томография дает возможность получать информацию о внутренней структуре массивных археологических образцов без предварительной пробоподготовки. В свою очередь данная информация позволяет реконструировать древние технологии производства, определять степень сохранности артефактов и много другое [1, 2].

Однако существенным недостатком метода нейтронной томографии является большая длительность проведения измерений. В текущих условиях на станции нейтронной радиографии и томографии на 14 канале импульсного реактора ИБР-2 время на проведение одного эксперимента (набор 360 радиографических проекций) составляет около 6 часов. Это накладывает существенные ограничения на исследования больших серий образцов. Таким образом существует необходимость развития новых алгоритмов реконструкции трехмерных данных нейтронной томографии из неполного набора радиографических проекций. Наиболее перспективными в данной области являются алгоритмы на основе искусственных нейронных сетей [3]. В данной работе был разработан и обучен ряд сверточных нейронных сетей для реконструкции трехмерных моделей из 9, 18, 36, 72, 144 и 216 радиографических проекций. Это позволило оценить минимально необходимое количество проекций для качественной реконструкции с применением нового алгоритма. Также были получены качественные и количественные показатели эффективности нового алгоритма на примере некоторых металлических артефактов из некрополя Волна 1.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-18-00196.*

1. Сапрыкина И. А. и др. Исследования бронзовых зеркал к. VI – к. V вв. до н. э. из грунтового могильника Волна 1 на Азиатском Боспоре // МАИЭТ. 2023. №. 28. С.44–69.
2. Bakirov B. et al. Phase composition and its spatial distribution in antique copper coins: Neutron tomography and diffraction studies // Journal of Imaging. 2021. Vol. 7. No. 8. P. 129.
3. Micieli D. et al. Accelerating neutron tomography experiments through artificial neural network based reconstruction // Scientific Reports. 2019. Vol. 9. No. 1. P. 2450.



## Динамика слияния капель в двухфазной области жидкий кристалл – изотропная жидкость

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

ФГБУН Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка

УДК:538.9, 532.5.032, 532.612.4, 532.5.011.12

Слияние капель – сложный динамический процесс, представляющий существенный интерес с научной точки зрения и важный для различных практических приложений. Изучению процессов слияния изотропных капель в воздухе или в другой изотропной жидкости посвящены многочисленные экспериментальные и теоретические работы. Значительно меньше исследован случай, когда материал капель или среда, в которой они находятся, обладает анизотропией. В докладе представлены результаты экспериментальных исследований слияния капель изотропной жидкости в окружении жидкого кристалла и капель жидкого кристалла в окружении изотропной жидкости.

Капли получены в плоских оптических ячейках в двухфазной области при переходе жидкий кристалл – изотропная жидкость [1,2]. Размер капель составлял от нескольких микрон до нескольких десятков микрон. Динамика изменения формы капель при слиянии изучалась с помощью высокоразрешающей оптической микроскопии. Применялась высокоскоростная видеорегистрация с разрешением до  $10^3$  кадров в секунду. Детально изучено слияние капель, поперечный размер которых в несколько раз превышает толщину ячейки. Использованная геометрия позволила проследить трансформацию от начала слияния пары капель до конечной стадии с образованием единой капли равновесной формы.

Нами наблюдались три последовательных этапа с отличающейся функциональной зависимостью геометрических параметров капель от времени. На начальном этапе размер перешейка между каплями растет приблизительно линейно со временем. Скорость роста не зависит от диаметра капель и толщины ячейки. На последующем этапе наблюдается более медленная степенная зависимость размера перешейка от времени. На заключительном этапе происходит экспоненциальная релаксация эллипсоидной капли к равновесной круглой форме. Продолжительность первого этапа увеличивается с увеличением толщины ячейки. Длительность второго этапа зависит от соотношения между толщиной ячейки и размером капель. Скорость релаксации уменьшается с увеличением размера капли и увеличивается для капель одного и того же размера с увеличением толщины ячейки.

Определены характерные времена на различных этапах слияния. На начальном этапе характерные времена увеличиваются линейно с увеличением радиуса капель  $R$ . На заключительном этапе характерное время релаксации пропорционально  $R^3$ . Обе зависимости согласуются с теорией. Из скорости роста перешейка на начальном этапе определена капиллярная скорость. Найденная величина капиллярной скорости близка к величине, рассчитанной из данных по материальным параметрам, имеющихся в литературе.

*Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант 23-12-00200.*

1. Dolganov P.V. et al. Quasi-two-dimensional coalescence of nematic and isotropic droplets and Rayleigh-Plateau instability in flat optical cells // *Soft Matter*. 2022. V. 18. No. 1. P. 126–136.
2. Dolganov P.V. et al. Dynamics of viscous droplet coalescence in the confined geometry of optical cells // *Physical Review E*. 2024. V. 109. No. 1. P. 014702.

## Топологический переход в спектре магнонов скирмионного кристалла

***Ю.В. Барамыгина<sup>1</sup>, В.Е. Тимофеев<sup>1,2</sup>, Д.Н. Аристов<sup>1,2</sup>***

*<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

*<sup>2</sup>Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург*

УДК: 538.9

Магнитные скирмионы являются топологически нетривиальными вихрями локальной намагниченности. Впервые теоретическая концепция магнитного скирмиона была описана Белавиным и Поляковым в 1975 году [1]. Авторы рассматривали модель двумерного ферромагнетика Гейзенберга при низкой температуре, в которой скирмионы возникают как неоднородные метастабильные состояния. Впоследствии были предложены способы стабилизации скирмионов, одним из которых является взаимодействие Дзялошинского-Мории. Интерес для изучения представляют не только изолированные скирмионы, но и скирмионы, упакованные в решётку, так называемые скирмионные кристаллы (СкК).

Мы исследуем спектр возбуждений СкК, образующегося в тонких ферромагнитных плёнках со взаимодействием Дзялошинского-Мории в присутствии внешнего магнитного поля. Для анализа используется метод стереографической проекции. В рамках такого подхода компоненты локальной намагниченности выражаются через функцию комплексной переменной. Этот метод позволяет описывать скирмионный кристалл в виде суммы образов одиночных скирмионов, упорядоченных в решётку [2]. Рассматриваются зависящие от времени инфинитезимальные флуктуации статического стереографического образа, исследуются их нормальные моды. Полученные нормальные моды соответствуют различным деформациям скирмионов в решётке.

Ранее был разработан специальный подход для рассмотрения гиротропной моды спектра магнонов СкК [3]. В работе [4] мы обобщаем этот подход для анализа двух зон с более высокой энергией: дыхательной моды ( $B_r$ ) и моды вращения против часовой стрелки ( $CCW$ ). Энергии исследуемых зон близки и совпадают при некоторых значениях внешнего магнитного поля. Мы представляем эффективный лагранжиан для описания этих двух зон. На примере мод  $B_r$  и  $CCW$  мы демонстрируем топологический переход в спектре магнонов СкК. При определённом значении магнитного поля щель между двумя исследуемыми ветками спектра закрывается и открывается вновь при дальнейшем увеличении магнитного поля. Это сопровождается сменой топологического характера рассматриваемых зон. Ниже критического значения магнитного поля зоны имеют нетривиальную топологию, что характеризуется ненулевыми числами Черна, в то время как после точки перехода ситуация становится тривиальной.

Благодаря топологическим свойствам в скирмионных кристаллах реализуется тепловой эффект Холла магнонов. Мы ожидаем, что наличие топологического перехода окажет влияние на свойства аномального теплового транспорта в системе.

1. Belavin A.A., Polyakov A.M. Metastable states of 2-dimensional isotropic ferromagnets // JETP Letters. 1975. V. 22. P. 245.
2. Timofeev V.E., Aristov D.N. Magnon band structure of skyrmion crystals and stereographic projection approach // Physical Review B. 2022. V. 105. No. 2. P. 024422.
3. Тимофеев В.Е., Аристов Д.Н. Голдстоуновская мода скирмионного кристалла // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. №. 6. С. 455-461.
4. Тимофеев В.Е., Барамыгина Ю.В., Аристов Д. Н. Топологический переход в спектре магнонов скирмионного кристалла // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. №. 12. С. 908-914.

## Численное моделирование генерации второй гармоники в оптических нанорезонаторах GaP

Д.А. Барыкин<sup>1,2</sup>, А.С. Фунтикова<sup>1,2</sup>, А.М. Можаров<sup>1,2</sup>, В.В. Федоров<sup>1,2</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>,  
В.А. Шаров<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 535.3

Темпы развития современных электронных микросхем показывают, что предел быстродействия полупроводниковых транзисторов в ближайшее время станет серьезной помехой для их дальнейшего улучшения. Решением такой проблемы будет переход к оптическим интегральным системам, основным принципом которых является передача информации при помощи оптических сигналов. Это позволит получать приборы с высокой пропускной способностью, необходимой в условиях постоянно растущих объемов информации. На данный момент существуют различные направления, связанные с фильтрацией сигналов, их мультиплексированием, использованием в системах радиофотоники, а также иными способами использования оптических интегральных схем. Актуальной темой на данный момент является создание оптических систем суммирования и удвоения частоты, активная часть которых выполняется с использованием нелинейных кристаллов. Материалы, свойства которых позволяют выполнять на их основе подобные приборы, должны иметь высокие значения нелинейной диэлектрической проницаемости и иметь широкий диапазон оптической прозрачности в необходимых областях спектра. Одним из перспективных материалов в этом направлении является фосфид галлия (GaP) в виде нитевидных нанокристаллов (ННК) [1]. Благодаря получаемой в процессе производства форме они могут быть легко внедрены в современные системы интегральной фотоники.

В предложенной работе проводился численный расчет процессов генерации второй гармоники в ННК GaP с целью достижения ее оптимальной направленности для интеграции в оптические системы в виде активного элемента. Полученные результаты свидетельствуют о наличии взаимосвязи геометрических параметров ННК с особенностями распространения второй гармоники.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования (грант государственного задания FSEG-2024-0017).*

1. Kuznetsov A. и др. Elastic Gallium Phosphide Nanowire Optical Waveguides—Versatile Subwavelength Platform for Integrated Photonics // Small. 2023. Т. 19. № 28.

## Перераспределение амплитуд Стоксовой и анти-Стоксовой линий в структуре NiFe/IrMn при пропускании спин-поляризованного тока

*М.В. Бахметьев, Р.Б. Моргунов*

*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка*

УДК: 538.9, 537.6

Асимметрия интенсивности Стоксовой и анти-Стоксовой линий в спектрах спиновых волн связана с нарушением симметрии обращения времени и ее природа в каждом конкретном случае может быть различна [1]. Асимметрия амплитуд пиков Стокса и анти-Стокса зависит от величины приложенного поля, геометрии рассеяния света, характера поляризации излучения подложкой и локализации мод. Имеется два условия асимметрии: 1) динамическая намагниченность магнонов Стокса должна быть комплексно сопряжена с этой величиной для магнонов анти-Стокса, 2) отношение компонент электрического поля световой волны должно быть комплексным, что имеет место только в поглощающей среде.

Подстройка обменного смещения спиновым током на интерфейсе обменно-смещенных гетероструктур способна вызвать значительные изменения в комплексной магнитной проницаемости и изменения комплексных компонент электрического поля световой волны.

Обнаружено влияние электрического тока, проходящего в антиферромагнитном слое IrMn, на спектры мандельштам-бриллюэновского рассеяния света соседнего ферромагнитного слоя NiFe в структурах NiFe/IrMn. Пропускание электрического тока вдоль внешнего магнитного поля приводит к подавлению анти-Стоксовой составляющей спектра Мандельштам-Бриллюэна, а пропускание электрического тока в направлении, противоположном полю, приводит к исчезновению Стоксовой составляющей. Эффект наблюдается только при ориентации внешнего магнитного поля параллельно или антипараллельно полю обменного смещения.

*Работа выполнена в рамках тематической карты ФИЦ ПХФ и МХ РАН FFSG-2024-0009.*

1. Ziveri R., et al. Stokes-anti-Stokes Brillouin intensity asymmetry of spin-wave modes in ferromagnetic films and multilayers // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 165406.

## Влияние структурных параметров никель-цинковых ферритовых порошков на характер протекания магнитного фазового перехода в области точки Кюри

*С. Бобуёк, А.П. Суржииков, Е.В. Николаев, В.А. Власов, Е.Н. Лысенко*

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

УДК 538.9, 537.622.6

Никель-цинковые ферриты – магнитомягкие керамические материалы с общим составом  $Ni_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ . Важной технологической операцией при их получении является контроль температуры Кюри, выше которой происходит разрушение их магнитной доменной структуры.

Целью настоящей работы является анализ влияния структурных параметров на характер протекания магнитного фазового перехода в области точки Кюри ферритового порошка состава  $Ni_{0.7}Zn_{0.3}Fe_2O_4$ .

Феррит синтезирован по керамической технологии с предварительной механической активацией оксидной смеси  $NiO-ZnO-Fe_2O_3$ . Варьирование микроструктурных параметров достигалось измельчением порошка в шаровой мельнице при различных режимах помола. Фазовый и структурный анализ образцов производился методом рентгеновской дифрактометрии с использованием порошкового дифрактометра ARL X'TRA. Синхронный термический анализатор Netzsch STA 449C Jupiter был использован для термомагнитометрического исследования [1] магнитных фазовых переходов типа ферримагнетик  $\rightleftharpoons$  парамагнетик.

Установлено влияние параметра решётки, величины микронапряжений и размера блоков когерентного рассеяния ферритовых порошков на поведение термогравиметрических кривых, полученных при проведении термомагнитометрии. Выявлено, что высокая кристаллическая дефектность порошков повышает температурный диапазон магнитного фазового перехода.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-72-10078-П).*

1. Nikolaev E., Lysenko E., Surzhikov A., Bobuyok S. The Influence of Thermomagneto-metric Measurement Conditions on the Recorded Curie Temperature of Cobalt-Zinc Ferrite // Engineering Materials. 2023. Part F1222. P. 1–10.

## Сравнение анизотропии термической и радиационной деформации кристаллической структуры фосфита глициния

***Н.Е. Богданов<sup>1,2</sup>, Б.А. Захаров<sup>1,2</sup>, Д.Ю. Чернышов, Е.В. Болдырева<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск

<sup>2</sup>Институт Катализа им. Борескова СО РАН, Новосибирск

УДК: 538.9, 548.3

Способность рентгеновского излучения повреждать кристаллические вещества известна давно. Это явление впервые изучалось применительно к кристаллам белков, поскольку для их исследования, обычно, применяют высокоинтенсивные источники синхротронного излучения, и впоследствии распространилось на прочие соединения. Основной задачей при этом является поиск стратегии сбора данных, позволяющей свести к минимуму радиационные эффекты [1]. При этом внимание уделяется не столько влиянию излучения на ухудшение дифракционных данных, сколько анализу радиационно-вызванных структурных деформаций во взаимосвязи с межмолекулярными взаимодействиями и исследованию влияния радиации на сегнетоэлектрические фазовые переходы [2].

В данной работе анизотропия термической и радиационной деформации сопоставлена для сегнетоэлектрика фосфита глициния ( $\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{PO}_3$ ). Предложено рассматривать восприимчивость к излучению как физическое свойство, количественной мерой которого является тензор деформации структуры, а индуцированные облучением статические добавки к параметрам атомных смещений трактовать как локальные структурные меры отклика на радиационное повреждение [3]. Такой подход дополняет микроскопические модели структурных повреждений (формирование свободных радикалов и др.). Его применимость была недавно показана при сравнении анизотропии термической и радиационной деформации трёх кристаллических структур органических соединений [4] и показано, что эти два вида деформаций могут существенно различаться.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (Программа «Приоритет-2030» НГУ), на оборудовании кафедры ХТТ ФЕН НГУ, часть данных получена в ESRF (Гренобль, Франция).*

1. Garman E.F. Radiation damage in macromolecular crystallography: what is it and why should we care? // Acta Crystallographica Section D Biological Crystallography. 2010. Vol. 66. № 4. P. 339–351.
2. Bogdanov N.E., Zakharov B.A., Chernyshov D., Pattison P., Boldyreva E. V. Phase transition in an organic ferroelectric: glycinium phosphite, with and without X-ray radiation damage // Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2021. Vol. 77. № 3. P. 365–370.
3. Boldyreva E.V. Radiation damage as a source of information // Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2024. Vol. 80. № 1. P. 1–3.
4. McMonagle C.J., Fuller C.A., Hupf E., Malaspina L.A., Grabowsky S., et al. Lattice response to the radiation damage of molecular crystals: radiation-induced versus thermal expansivity // Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2024. Vol. 80. № 1. P. 13–18.

## Исследование биоуглерода полученного из травы

Г.С. Боголюбова<sup>1</sup>, М.В. Солоникина<sup>1,2</sup>, Д.В. Логинов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

<sup>2</sup>Карельский научный центр РАН, Петрозаводск

УДК: 538.9, 537.9

Биоуглероды – это продукт переработки биомассы, который получают при помощи её углерододизации, включающей в себя этапы подготовки сырья, процесса карбонизации, активации, а также очистки и упаковки [1]. В результате получается материал, который обладает улучшенными свойствами и готов для использования в различных отраслях промышленности. Их применяют в триботехнике, как смазочные материалы, поскольку обладают высокой тепло- и окислительной стабильностью, низким коэффициентом трения и износостойкостью [2]. В процессе сжигания биомассы выделяется тепло для производства пара, который используется для генерации электроэнергии или отопления, незаменимое в теплоэнергетике [3]. Помимо этого, актуально применение остатков биомассы в качестве основных компонентов для производства угольных электродов из-за низкой стоимости переработки.

В работе представлены данные о рентгеноструктурном анализе биоуглерода, полученного из травы. Объект исследования был получен путем пиролиза травы в бескислородной среде при температуре 800 °С. Рентгеноструктурный анализ проводился с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-4 в МоК $\alpha$ -излучении, в интервале углов от 2° до 145°. Съёмки проводились в геометрии на просвет.

В ходе рентгенографического исследования была получена рентгенограмма образца, имеющая наряду с узкими максимумами выраженную аморфную составляющую. Аморфная составляющая может быть обусловлена частицами нанометрового размера, входящими в структуру образца, наличие которых подтверждает сканирующая электронная микроскопия.

Для биоуглерода, полученного из травы, были рассчитаны парные функции  $D(r)$ , где несоответствие экспериментальной кривой с подбираемой составило 2,7%. Из кривых распределения парных функций  $D(r)$  для образца были рассчитаны радиусы координационных сфер  $r_{ij}$  и их размытия  $\sigma_{ij}$ , а также координационные числа  $N_{ij}$ . Для сравнения в первом приближении были приняты значения радиусов, их размытий и координационные числа для гексагонального графита.

По результатам расчета ближнего порядка значения радиусов первых трёх координационных сфер биоуглерода, полученного из травы, практически совпадают с таковыми значениями для гексагонального графита в пределах погрешности, которые отвечают за расстояния между атомами в углеродном кольце. У биографита, полученного из травы, наблюдается радиус координационной сферы, равный 1.57 Å, который отсутствует у гексагонального графита, указывающий на наличие примеси в образце. Стоит отметить, что координационные числа биоуглерода, полученного из травы выше, чем у гексагонального графита на всех сферах, что, возможно, обусловлено его аморфной структурой и расположением атомов и их агломератов внутри образца.

1. Sohi S.P. et al. A review of biochar and its use and function in soil // *Advances in agronomy*. 2010. Т. 105. С. 47-82.
2. Гвоздев А.А. и др. Исследование триботехнических характеристик перспективных смазочных материалов с углеродными наночастицами // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2018. Т. 18. №. 1. С. 66-72.
3. Кузнецов Г.В. и др. Повышение энергоэффективности термической конверсии древесной биомассы // *Известия Томского политехнического университета*. 2012. Т.320. С. 22-25.

## Формирование функциональных устройств методом темплатного синтеза с использованием мембран на основе наноструктурированного пористого анодного оксида алюминия

*А.А. Бондарук, А.А. Роткович, С.А. Герман, Е.С. Дашкевич, Д.И. Тишкевич*

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

УДК: 538.9, 620.22

Гексаферрит бария как ферромагнитный материал нашёл своё применение не только в катушках индуктивности, сердечниках и антеннах, но и в радиоэлектронике, элементах памяти, поглотителях электромагнитных волн и в нанотехнологиях. Его магнитные свойства обусловлены взаимодействием между металлическими частицами, занимающими определенные позиции, и ионами кислорода в его гексагональной кристаллической структуре и является одним из самых перспективных магнитных материалов. Гексаферрит бария применяют в качестве постоянного магнита [1], в том числе для нужд электроники [2], а также в микроэлектронике, в том числе при создании толстых и тонких плёнок [3].

Экспериментальные образцы формировались из алюминиевой фольги (99,99 %) толщиной 100 мкм и имели геометрические размеры  $75 \times 50$  мм<sup>2</sup>. Подготовку поверхности подложек осуществляли методом химической отмычки, затем травления, далее проводилась химическая полировка. Пленки ПАОА получали методом двухстадийного анодирования. В качестве темплатного способа внедрения гексаферрита бария в поры использовалось два метода: центрифугирование и воздействие ультразвуком. При центрифугировании образец помещался в центр центрифуги, затем сверху наносилось с помощью дозатора несколько капель приготовленного раствора и запускался при 1500 об/мин. В другом случае образцы находились под действием ультразвука на протяжении 10 мин. После того, как матрицы были получены, они отправлялись на отжиг в муфельную печь на 4 часа при 800°C.

В результате СЭМ-анализа видно, что на поверхности центрифугированного образца присутствует лишь некоторая часть гексаферрита бария, в отличие от результатов энергодисперсионного анализа изображения СЭМ, где отмечено, что пленка  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  покрывает всю поверхность мембраны из-за чего поры практически незаметны. Результаты СЭМ со стороны барьерного слоя центрифугированного образца показали, что большее количество нанопроволок из гексаферрита бария встроено в каналы пор шаблонов. Длина и диаметр нанопроволок соответствуют размеру пор шаблонов. На изображении барьерного слоя образца, обработанного ультразвуком присутствует лишь некоторая часть кристаллов магнитного материала.

Метод золь-гель-синтеза и темплатного получения наноматериалов были использованы для нового способа получения наночастиц  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  в матрицах на основе пористого анодного оксида алюминия. Результаты исследования микроструктуры композитного материала ПАОА- $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  показали, что поры однородны и высокоупорядочены, размер которых составляет 80-90 нм, что позволяет получать магнитные нанопроволоки и пленки на основе гексаферрита бария, которые потенциально могут быть использованы для создания высокоплотной магнитной памяти одноэлектронных устройств, биосенсоров и нанозлектродов.

1. Salemizadeh S. et.al. Magnetic Properties of Nanocrystalline Barium Hexaferrite Thin Films Prepared by Sol-Gel Method // IEEE Trans. Magn. 2009. V. 45. No. 6. P. 2538 – 2540.
2. Mozaffari M. et.al. Preparation of barium hexaferrite nanopowders by the sol-gel method, using goethite // J. Magn. Mater. 2009. V. 321. No. 9. P. 1285-1289.
3. Junliang L. et.al. One-step synthesis of barium hexaferrite nano-powders via microwave-assisted sol-gel auto-combustion // J. Eur. Ceram. Soc. 2010. V. 30. No. 4. P. 993-997.



## Гибридные магнитоактивные эластомеры на основе сегментированных полиуретанов и наночастиц магнетита

А.Н. Бугров<sup>1,2</sup>, М.Н. Кудряш<sup>2</sup>, Е.Н. Попова<sup>1</sup>, Е.М. Иванькова<sup>1</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,  
Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 544.16, 544.032.53

Магнитоактивные эластомеры представляют собой «интеллектуальные» материалы, которые способны обратимо изменять свои механические свойства и геометрические размеры под действием внешнего магнитного поля. Такие материалы на сегодняшний день востребованы в мягкой робототехнике, аэрокосмической промышленности и медицине в качестве актюаторов, манипуляторов, микропинцетов, шовных нитей и т.д. В данной работе методом поликонденсации были синтезированы сегментированные полиуретаны с термоиндуцируемым эффектом памяти формы, включающие в свой состав гибкие и жесткие блоки разной длины и химической структуры. Для формирования жестких блоков использовали комбинации ароматических диизоцианатов (2,4-толуилendiизоцианат, 4,4'-метиленидифенилдиизоцианат) с диаминами (фенилендиамин, 4,4'-диаминодифенил), а в качестве гибких сегментов выступали алифатические диолы. Было показано, что свойства памяти формы мультиблочных полиуретанов сильно зависят от степени деформации образцов при проведении их термоциклических испытаний в статическом и динамическом режимах. С целью индукционного разогрева полимерных матриц за счет магнитного наполнителя были синтезированы в гидротермальных условиях наночастицы магнетита разной морфологии. Чтобы обеспечить изотропное распределение наночастиц в полиуретанах при высоких степенях наполнения проводилась функционализация их поверхности  $\gamma$ -аминопропилтриэтоксисиланом. В результате взаимодействия макродиизоцианатов и диаминов в присутствии поверхностно функционализированных  $\text{NH}_2$  группами наночастиц магнетита были получены гибридные магнитоактивные эластомеры с возможностью их нагрева в переменном магнитном поле (168 кГц, 180 В, 7.5 А). Разогрев таких материалов выше температур релаксационных и фазовых переходов в мультиблочном полиуретане происходил менее чем за 10 секунд при условии, что концентрация магнитных наночастиц в полимере достигала порога перколяции.

## Методы фотоэлектронной спектроскопии для анализа состава и электронной структуры материалов

*Р.Г. Валеев*

*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск*

УДК: 538.971

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) - полуколичественный спектроскопический метод исследования элементного состава, химического и электронного состояния атомов, на поверхности изучаемого материала. Он основан на явлении внешнего фотоэффекта, открытого Генри Герцем в 1887 году и позже теоретически описанном Альбертом Эйнштейном в 1905 году. Спектры РФЭС получают облучением материала пучком рентгеновских лучей с регистрацией зависимости количества испускаемых электронов от их энергии связи. Исследуемые электроны эмитируются по всей глубине проникновения используемого мягкого рентгеновского излучения в исследуемый образец (обычно порядка 1 мкм, что очень много по сравнению с размерами атомов и молекул). Однако выбитые рентгеновскими квантами электроны сильно поглощаются исследуемым веществом настолько, что эмитированные на глубине около 100 Å они уже не могут достичь поверхности, испуститься в вакуум и, соответственно, быть детектированными прибором. Именно поэтому методом РФЭС можно собрать информацию о самых верхних (около 10-30) атомных слоях образца без информации об его объеме. Таким образом, РФЭС незаменим как метод анализа и контроля в ряде отраслей таких, как полупроводниковая индустрия, гетерогенный катализ, и т.д.

Исследования методом РФЭС проводятся в Удмуртском ФИЦ на протяжении более 30 лет, накоплен большой опыт как в теоретическом описании метода, так и практическом приложении для исследования различных материалов. Имеющиеся в ФИЦ спектрометры Specs (Германия) и ЭС-2401 (Россия) входят в центр коллективного пользования научным оборудованием и широко востребованы научными группами Российских исследовательских и образовательных организаций, таких как МГУ им. М.В. Ломоносова, ФИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и многих других.

В качестве примера проведенных исследований можно привести результаты анализа степени окисленности графена, выявление долей химических связей в оксидах металлов с различной степенью окисления (Ti, Fe, V, Zr и т.п.) и многие другие результаты.

## Несоизмеримая магнитная структура и фаза спинового проскальзывания Ho<sub>3</sub>Co

А.А. Ваулин<sup>1</sup>, А.Ф. Прекул<sup>1</sup>, А.Ф. Губкин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Института физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург

УДК 538.91, 538.955

Бинарные редкоземельные интерметаллические соединения  $R_3T$  ( $R$  – редкоземельный металл,  $T$  – переходный металл) кристаллизуется в орторомбическую структуру типа  $Fe_3C$  с пространственной группой  $Pnma$ . Конкуренция РККИ обменных взаимодействий и действие низкосимметричного кристаллического поля приводят к возникновению сложных низкотемпературных несоизмеримых магнитных фаз и различных аномалий в поведении физических свойств  $R_3T$ . В частности, соединение Ho<sub>3</sub>Co демонстрирует сложную магнитную фазовую диаграмму с двумя последовательными магнитными фазовыми переходами при температуре Нееля  $T_N = 22$  К и  $T_t = 9$  К [1]. В области температур ниже  $T_t = 9$  К в Ho<sub>3</sub>Co наблюдается слабая спонтанная намагниченность. Тем не менее, данные порошковой дифракции нейтронов, опубликованные ранее для Ho<sub>3</sub>Co [2], показали, что низкотемпературное магнитное состояние является несоизмеримым антиферромагнетиком с волновыми векторами  $k_{IC} = (0.15 \ 0 \ 0)$  и  $k_C = (0 \ 0 \ 0)$ . В настоящей работе проведено полное количественное описание сложной несоизмеримой магнитной структуры при помощи формализма магнитных суперпространственных групп и установлен механизм возникновения слабой спонтанной намагниченности в антиферромагнетике Ho<sub>3</sub>Co в области низких температур.

Из данных нейтронной дифракции на порошковом образце Ho<sub>3</sub>Co были построены магнитные фазовые диаграммы. В частности, при охлаждении ниже температуры Нееля  $T_N = 22$  К в Ho<sub>3</sub>Co реализуется двухкомпонентная магнитная структура, описываемая комбинацией двух волновых векторов: соизмеримая компонента с волновым вектором  $k_C = 0$  и несоизмеримая компонента с волновым вектором  $k_{IC} = \mu b_1$  ( $\mu = 0.133$ ,  $b_1 = 2\pi/a$ ). Уточнение магнитной структуры из данных нейтронной дифракции при температуре  $T = 15$  К, проведенное по методу Ритвельда с использованием формализма магнитных суперпространственных групп, позволило получить полное количественное описание данной магнитной структуры. Установлено, что при  $T = 15$  К амплитудно-модулированная несоизмеримая магнитная структура определяется суперпозицией двух физически неприводимых представлений  $[k_C]m\Gamma_4$  и  $[k_{IC}]m\Sigma_4$  и описывается магнитной суперпространственной группой  $Pm'cn(00g)000$ . Данная магнитная структура представляет собой набор скошенных поперечных спиновых волн, распространяющихся вдоль направления несоизмеримого волнового вектора  $k_{IC}$ . Установлено, что дальнейшее охлаждение ниже  $T \sim 11$  К приводит к перераспределению вкладов от соизмеримой и несоизмеримой компонент, эволюции к равномоментной амплитудно-модулированной несоизмеримой магнитной структуре и реализации магнитной фазы «спинового проскальзывания», для которой характерно наличие слабой спонтанной намагниченности вследствие раскомпенсации антиферромагнитной подрешетки.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-32-90047 и госзадания Минобрнауки (тема «Поток», № 122021000031-8).*

1. Baranov N.V., Goto T., Hilscher G., Markin P.E., Michor H., Mushnikov N.V., Park J.-G., Yermakov A.A. Irreversible field-induced magnetic phase transitions and properties of Ho<sub>3</sub>Co // Journal of Physics: Condensed Matter. 2005. V. 17. №. 21. P. 3445.
2. Podlesnyak A., Daoud-Aladine A., Zaharko O., Markin P., Baranov N. Magnetic structures and magnetic phase transitions in Ho<sub>3</sub>Co // Journal of magnetism and magnetic materials. 2004. V. 272. С. 565-567.

## Газовый сенсор на основе нитевидных нанокристаллов арсенида индия с газопроницаемым электродом из одностенных углеродных нанотрубок

***А.А. Воробьев<sup>1,2</sup>, Д.М. Митин<sup>1</sup>, А.В. Павлов<sup>1,2</sup>, А.М. Можаров<sup>1,2</sup>, Ф.С. Федоров<sup>3</sup>, В.В. Федоров<sup>1</sup>, А.Г. Насибулин<sup>3</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>*Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург*

<sup>3</sup>*Сколковский институт науки и технологий, Москва*

УДК: 538.9

Датчики газа широко применяются в различных областях науки и техники [1], таких как мониторинг окружающей среды, промышленное производство и безопасность, медицинская диагностика, военная промышленность и авиакосмическая промышленность, сельское хозяйство, автомобилестроение, мониторинг качества воздуха в помещениях и мониторинг окружающей среды [2].

Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы (ННК) и углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой перспективные материалы для высокопроизводительных нанoeлектронных систем. Кроме того, электронные устройства на основе ННК и УНТ чувствительны к адсорбции молекул газа или связыванию биомолекул в жидкости, что позволяет их использовать в качестве газовых и биосенсоров. Имея большое отношение поверхности к объему, сенсоры на основе с quasi-1D наноматериалов, такими как ННК и УНТ, демонстрируют высокую чувствительность в биологических применениях, вплоть до уровня одной молекулы.

Был предложен новый подход к созданию гибридного газового сенсора на основе вертикально-ориентированных массивов ННК InAs, синтезированных на Si-подложке, и газопроницаемого электрода из ОУНТ. Впервые предложено использование тонких слоев ОУНТ с оптической прозрачностью слоя 95% (при длине волны 550 нм) в качестве газопроницаемого электрода к вертикально-ориентированному массиву ННК InAs. InAs ННК за счет развитой боковой поверхности и наличия большого количества поверхностных состояний обладают n-типом проводимости. Таким образом, при контакте этих двух материалов возникает область пространственного заряда с положением уровня Ферми, отличным от исходных. Данный эффект может быть использован для создания в рамках одной структуры различных областей, по-разному реагирующих на внешнее воздействие. Созданный газовый сенсор может быть использован в качестве распределенного мультисенсора.

*Синтез наноструктур выполнен при поддержке министерства образования и науки в рамках гранта FSRM-2023-0007.*

1. Varghese S. S. et al. Recent advances in graphene based gas sensors // Sensors and Actuators B: Chemical. 2015. Т. 218. С. 160-183.
2. Liu H. et al. Microhotplates for metal oxide semiconductor gas sensor applications—Towards the CMOS-MEMS monolithic approach // Micromachines. 2018. Т. 9. №. 11. С. 557.

## Исследование элементного состава элемента Пельтье

*М.К. Воронкова, Д.В. Логинов, В.А. Поздеев*

*Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск*

УДК: 538.9, 539.26

Серверные центры содержат множество серверов и другого оборудования, которое генерирует большое количество тепла в процессе работы с последующим выделением его в атмосферу. Ведущие лаборатории разрабатывают системы, позволяющие использовать выделяемое тепло посредством его генерации в электричество. Процесс регенерации не может идти без потерь, но тем не менее на окружающую среду будет оказываться меньшее воздействие.

Одним из вариантов усовершенствования таких систем может являться использование в регулирующих устройствах термоэлектрических элементов – термоэдс. Этот феномен нашёл широкое применение в таких термоэлектрических преобразователях, как термопары, которые используются для измерения температуры.

В исследованиях конструкционных материалов различных структурных классов было выделено три группы с положительными, отрицательными и меняющими свой знак значениями термоэдс. К первой группе относятся стали с повышенным содержанием хрома. В них максимум термоэдс достигается при температуре 600-800°C, после чего начинает убывать. Ко второй группе отнесли стали, в которых легирующими элементами являются хром (14-21%) и никель (9-25%). В них термоэдс линейно зависит от температуры, причем значения температуры убывают до 1000°C, затем наблюдается незначительное возрастание термоэдс. В сталях третьей группы зависимость термоэдс от температуры убывает до 600°C, далее термоэдс незначительно возрастает до максимума в области температур, близкой к 900°C [1].

Целью исследовательской работы является изучение структуры, фазового и элементного состава образцов.

С помощью метода сканирующей электронной микроскопии был проведен элементный анализ сплавов, входящих в состав элемента Пельтье, представляющих из себя полупроводники р-типа и n-типа. В ходе исследования в общей сумме было произведено 6 съёмок. На основании полученных результатов можно говорить о том, что исследуемый образец преимущественно состоит из олова, теллура и висмута. Пять съёмок из шести также указали на наличие небольшого количества никеля и алюминия в образце.

Такой элементный состав не свойственен самым распространённым спайкам для использования в элементах термоэдс. Однако в совокупности компоненты, входящие в элементный состав модуля Пельтье, проявляют термоэлектрические свойства, что стало причиной для более детального изучения фазового состава.

Рентгенография проводилась порошковым методом на установке ДРОН-6 в  $\text{CuK}\alpha$ -излучении. Параметры съёмки: начальный угол – 2°; конечный угол – 100°; шаг съёмки – 0.05°.

Для обработки рентгенографических данных использовался программный комплекс PDWin. Качественный анализ проводился в пакете Qual.

В ходе качественного анализа при сравнении дифракционных спектров было установлено, что химические элементы Ni, Bi и Te, входящие в состав исследуемого образца, содержатся в фазах 3-1043 Ni, 10-54 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, 22-117 (Bi, Te) Te.

1. Исследование температурных зависимостей термоэдс конструкционных материалов различных структурных классов / А. Л. Гончаров, А. В. Чулкова, Р. В. Родякина [и др.] // Сварка в России – 2019: Современное состояние и перспективы: тезисы докладов международной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения Б. Е. Патона (3-7 сентября 2019 г., г. Томск). Томск, 2019. С. 93.

## Влияние неизовалентного замещения на кристаллическую и магнитную структуру твердых растворов $\text{SrFe}_{12-x}(\text{CoSn})_x\text{O}_{19}$ ( $x=0-0.5$ )

К.М. Гасанов<sup>1,2</sup>, А.В. Труханов<sup>3,4</sup>, С.В. Труханов<sup>3,4</sup>, С.В. Сумников<sup>1</sup>, М. Чебела<sup>5</sup>,  
В.А. Турченко<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup>Институт радиационных проблем, Баку

<sup>3</sup>ГНПО «Научно-практический центр материаловедения НАН Беларуси», Минск

<sup>4</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

<sup>5</sup>Институт ядерных наук Винча, Белград

УДК: 538.9, 537.9

Такие уникальные свойства стронциевых гексаферритов как высокая магнитная анизотропия и коэрцитивная сила позволили данным материалам получить широкое практическое применение в постоянных магнитах, в микроволновых устройствах и в носителях магнитной информации [1-3].

Особенности кристаллической и магнитной структуры ферромагнитного материала в зависимости от степени замещения ионами Co и Sn были исследованы методом нейтронной дифракции на нейтронном дифрактометре ФДВР при комнатной температуре. Уточнение спектров было выполнено методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

Замещение магнитоактивных ионов Fe ионами Co и Sn в твердом растворе  $\text{SrFe}_{12-x}(\text{CoSn})_x\text{O}_{19}$  приводит к немонотонному увеличению объема элементарной ячейки от  $691 \text{ \AA}^3$  ( $x=0$ ) до  $692 \text{ \AA}^3$  ( $x=0.5$ ), что объясняется большими значениями ионных радиусов ионов Co и Sn ( $r=0.885 \text{ \AA}$ ,  $r=0.83 \text{ \AA}$ ), в сравнении с Fe ( $r=0.785 \text{ \AA}$ ).

Наблюдаемое уменьшение температуры Кюри от 674 К ( $x=0.1$ ) до 660 К ( $x=0.6$ ) с ростом  $x$  указывает на нарушение сверхобменных взаимодействий между атомами Fe, образующими кристаллическую решетку. Сравнение результатов нейтронной дифракции показывает, что концентрационная зависимость величины полного магнитного момента зависит от типа кристаллографических позиций, в которых ионы Co и Sn замещают ионы Fe вследствие различного искажения отдельных структурных фрагментов. Уменьшение полного магнитного момента, определенного методом нейтронной дифракции, наблюдается в случае размещения ионов Co и Sn в кристаллографических позициях  $4f_{II}$  и  $2b$  (с ростом  $x$  от 0 до 0.2) и в позициях  $4f_{II}$  (с ростом  $x$  от 0.3 до 0.5).

*Авторы выражают благодарность Д.Линнику (ДонФТИ) за изготовление образцов.*

1. V. Kostishyn et al. Synthesis and multiferroic properties of M-type  $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$  hexaferrite ceramics // JALCOM. 2015. V.645. P. 297-300.
2. M. Ashiq et al. Structural, magnetic and dielectric properties of Zr–Cd substituted strontium hexaferrite ( $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ ) nanoparticles // JALCOM. 2009. V.487. P. 341-345.
3. M. Iqbal et al. Magnetic, physical and electrical properties of Zr–Ni-substituted co-precipitated strontium hexaferrite nanoparticles // Scripta Materialia. 2007. V.57. P. 1093–1096.

## Синтез радиационных экранов на основе W-ГПУ методом горячего изостатического прессования

С.А. Герман, И.В. Рязанов, В.П. Новиков, Д.И. Тишкевич, А.Л. Желудкевич, В.Д. Живулько,  
А.А. Роткович, А.А. Бондарук

Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск

УДК: 538.9, 669.227

Свойства вольфрама делают его перспективным материалом в области радиационной защиты микроэлектронной аппаратуры, однако из-за его тугоплавкости изготовление вольфрамовых радиационных экранов является тяжелой задачей, в связи с чем требуется новый подход к обработке вольфрама [1].

Цель работы – исследование свойств W-графеноподобный углерод (ГПУ), полученного методом горячего изостатического прессования (ГИП).

Метод ГИП основан на одновременном термобарическом воздействии на образец. Малое сопротивление контейнера, в который помещается синтезируемый образец, обуславливается его составом, в связи с чем набор высоких температур путем пропускания электрического тока происходит с высокой скоростью [2].

Метод ГИП является высокоскоростным методом синтеза, так как воздействие на замкнутый объем осуществляется сверхвысоким давлением. Отметим, что воздействие высоким давлением на образец увеличивает площадь протекания реакции, что также стимулирует скорость процесса.

Этим методом были получены 4 образца W-ГПУ в разных соотношениях, плотность которых была рассчитана с помощью метода гидростатического взвешивания и известных справочных данных о плотностях отдельных компонентов образцов композиционного материала. Результаты исследования представлены в таблице.

Видно, что с увеличением концентрации ГПУ в образцах композита плотность образцов снижается (таблица 1).

Таблица 1. Значения плотностей полученных образцов

Образец	Плотность, г/см <sup>3</sup>
W <sub>99,0</sub> C <sub>1,0</sub>	17,48
W <sub>99,5</sub> C <sub>0,5</sub>	18,36
W <sub>99,7</sub> C <sub>0,3</sub>	17,55
W <sub>99,9</sub> C <sub>0,1</sub>	17,62

С помощью метода ГПИ были получены четыре образца системы W-ГПУ с различным содержанием ГПУ. Высокая концентрация добавки способствует снижению плотности композита, вследствие чего механические свойства композита также могут снижаться. Малая концентрация ГПУ не оказывает сильного влияния на плотность целого композита и позволяет получить образец с более однородным распределением графеноподобной фазы по композиту. Данный композиционный материал является перспективным в области радиационной защиты.

1. Беспалов В. И. Лекции по радиационной защите: учеб. пособие // В. И. Беспалов. 5-е изд., расшир. Томск: Изд-во Том. политехн. ун-та. 2017. 695 с.
2. Физические основы дозиметрии. Радиационная безопасность: учеб. пособие // Е. Н. Дулов [и др.]; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики. Казань. 2017. 24 с.

# Исследование процессов структурообразования в эпоксидно-титанатных золях методом SAXS

*И.Б. Глебова, О.А. Шилова*

*НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова,  
Санкт-Петербург*

УДК:538.9, 620.3:539.264

Эпоксидно-титанатные (ЭТ) наноструктурированные материалы относятся к классу органо-неорганических нанокомпозитов. Это определяет как их высокие физико-механические свойства, так и достаточно высокую термостойкость. Покрытия из такого материала, получаемые по золь-гель технологии, также обладают подобными свойствами, в результате чего их можно успешно использовать в качестве атмосферостойких покрытий, в т.ч. стойких к постоянному контакту с водной средой и для ингибирования процессов биодеструкции. Достоинством этих покрытий является то, что они не требуют термической обработки. Биоактивность ЭТ покрытий усиливается при введении в нанокомпозиты биоцидных добавок, в частности детонационного наноалмаза (ДНА) [1]. Однако физико-химические процессы формирования органо-неорганических композитов сложны, поэтому представляет интерес рассмотреть изменение структуры нанокомпозита в процессе протекания золь-гель синтеза. Работа посвящена исследованию *in situ* процессов структурирования ЭТ золь при равном соотношении прекурсоров пленкообразования – эпоксидной смолы EPONEX 1510 и тетрабутоксититана (ТБТ), как без добавок ДНА, так и в его присутствии (от 0.025 до 0.2 масс. %). Структура золь и гелей на их основе исследовалась методом рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами (SAXS).

При исследовании золь-гель процессов в ЭТ золь-гель системах было обнаружено, что на начальной стадии формирования структуры ЭТ золя (вплоть до 28 ч) рассеяние рентгеновских лучей обусловлено образовавшимися в золе наночастицами  $\text{TiO}_2$ . При этом интенсивность SAXS в этом промежутке времени возрастает. Первоначальный размер рассеивающих частиц  $\sim 5\text{-}6 \text{ \AA}$ , который постепенно увеличивается. После выдержки золя в течение 28 ч и вплоть до 174 ч интенсивность SAXS, наоборот начинает уменьшаться. Возможно этот эффект связан с отверждением эпоксидной смолы и гелеобразованием. После 174 ч созревания было зафиксировано образование фрактальной структуры ЭТ нанокомпозита. К 343 ч созревания геля фрактальная размерность агрегатов составляла 1.6. При дальнейшей выдержке в течение 439 ч сформировались фрактально-массовые агрегаты с размерностью 1.5, с размерами, превышающими границу зоны информации используемой рентгеновской камеры, т.е. более 70 нм. Затем к 680 ч наблюдалось исчезновение фрактальной структуры. По-видимому, это связано с уплотнением гибридной эпоксидно-титанатной сетки. В отсутствие эпоксидной смолы на первоначальном этапе образования золя также наблюдается сохранение гомогенной среды, а через 23 часа – начало образования периодической структуры, о чем свидетельствует появившийся размытый интерференционный пик. Введение в эпоксидно-титанатные золи ДНА (от 0.025 до 0.2 масс. %) приводит к увеличению фрактальной размерности, т.е. к уплотнению и упрочнению формируемой структуры нанокомпозитов за счет образования массово-фрактальных кластеров, которые с увеличением концентрации ДНА становятся еще более плотными. Таким образом, ДНА является структурирующим агентом. Эпоксидно-титанатные покрытия успешно прошли натурные испытания в качестве фунгицидных для защиты мраморных памятников культуры и покрытий, защищающих оптические стекла от морского обрастания.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке госзадания НИЦ КИ - ИХС РАН 1023033000122-7-1.4.3.*

1. O.A. Shilova, et al. Chapter 33. In: Processes and Phenomena on the Boundary between Biogenic and Abiogenic Nature (Eds. D.Y. Vlasov, O.V. Frank-Kamenetskaya, E.G. Panova, S.N. Lessovaia). 2019. Springer, Cham. Series: Lecture Notes in Earth System Sciences. P. 619-638.



## **Разработка и исследование фотопреобразователей в ИК диапазоне на основе одиночных нитевидных нанокристаллов арсенида индия, синтезированных на кремниевой подложке**

***А.С. Голтаев<sup>1</sup>, А.А. Воробьев<sup>1,2</sup>, В.В. Федоров<sup>1,2</sup>, А.М. Можаров<sup>1,2</sup>***

*<sup>1</sup>Академический университет им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург*

*<sup>2</sup>ФГАОУ ВО СПбПУ, Санкт-Петербург*

УДК 538.9, 621.383.52

Одним из современных направлений исследований в области физики полупроводников является разработка фотодетекторных приборов на основе нитевидных нанокристаллов (ННК) [1]. Указанная проблема обрела особую актуальность в связи с явными преимуществами ННК перед тонкопленочными структурами того же состава.

Для исследования свойств фотодетекторов на основе одиночных InAs ННК были синтезированы массивы InAs ННК на кремниевой подложке. Далее методами пост-ростовой обработки были сформированы контакты к одиночным ННК, включая этапы отделения ННК от ростовой подложки в водную суспензию, перенос ННК из суспензии на вспомогательную подложку, проведение процесса литографии фоторезистивной маски к одиночным ННК, напыления контактов и удаления фоторезистивной маски с излишками металла.

В рамках выполнения работы было проведено измерение проводимости ННК при облучении лампой белого света с интегральной интенсивностью 100 мВт/см<sup>2</sup>. Установлено, что величина проводимости не меняется под действием облучения с точностью работы измерительного оборудования, что свидетельствует о малом времени жизни фотоиндуцированных носителей заряда для комнатной температуры.

*Синтез наноструктур выполнен при поддержке министерства образования и науки в рамках гранта FSRM-2023-0007.*

1. Leandro L., Gunnarsson C. P., Reznik R., Jöns K. D., Shtrom I., Khrebtov A., Kasama T., Zwiller V., Cirilin G., Akopian N. Nanowire quantum dots tuned to atomic resonances // Nano Letters. 2018. Vol. 18. No. 11. Pp. 7217–7221.

## Устройство и электростатический механизм разборки белковых сверхструктур циповирусов

*И.Ю. Голушко<sup>1</sup>, О.В. Коневцова<sup>1</sup>, Р. Подгорник<sup>2</sup>, С.Б. Рошаль<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, Физический факультет, Ростов-на-Дону

<sup>2</sup>Университет китайской академии наук, Пекин

УДК: 538.9, 537, 578.3, 578.2

Циповирусы – это вирусы, поражающие насекомых и использующие уникальный способ доставки и защиты своего генетического материала. Геном циповирусов защищен не только икосаэдрической белковой оболочкой (капсидом), но и внешней матрицей из белка полиэдрина. Попадая в клетку, помимо экспрессии белков капсида вирус вызывает сверхэкспрессию полиэдрина, который и формирует молекулярные кристаллы, защищающие встроенные в них капсиды. При попадании в сильнощелочную среду кишечника насекомого эти кристаллы, или вирусные полиэдры, разрушаются, высвобождая заключенные в них вирусы [1].

Несмотря на то, что за последние 20 лет удалось получить структуры капсидов и полиэдринов нескольких типов циповирусов в высоком разрешении, до настоящего момента то, как именно капсид встраивается во внешний кристалл полиэдрина, оставалась загадкой. В работе [2], используя теорию симметрии, нам удалось предложить подход, предсказывающий детальную структуру интерфейса в вирусных полиэдрах.

Используя построенную структурную модель, мы предложили механизм, управляющий разборкой вирусных полиэдров. Разработанная электростатическая модель показывает, что высокой рН внутри кишечника насекомых приводит к увеличению суммарного отрицательного заряда молекул полиэдрина, что, во-первых, вызывает резкий рост электростатической энергии кристаллов полиэдрина, приводя к их разборке, а во-вторых – ослабляет связь между белками кристалла и вируса.

Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых средств адресной доставки лекарств. Так, различные не нативные для циповирусов белки могут быть встроены в вирусные полиэдры, а используя мутантные полиэдрины, можно изменять условия, приводящие к разборке таких наноконтейнеров. Предложенные нами методы могут пролить свет на принципы структурной организации существующих наноконтейнеров, открыть новые способы включения в них грузов и рационализировать процессы их самосборки и разборки.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-12-00105.*

1. Coulibaly F. Polyhedra, spindles, phage nucleus and pyramids: Structural biology of viral superstructures // *Advanced Virus Research*. 2019. V.105. P. 275-335.

2. Konevtsova O.V. et al. Integration of Cypoviruses into polyhedrin matrix // *Nanoscale Advances*. 2023. V. 5. No. 16. P. 4140-4148.

## Анализ процессов олигомеризации белков HU и IHF по данным синхротронного малоуглового рассеяния

А.М. Гордиенко<sup>1</sup>, М.В. Петухов<sup>1,2,3</sup>, Л.А. Дадинова<sup>1</sup>, Э.В. Штыкова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии РАН им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва

<sup>3</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва

УДК: 538.9, 539.26

Нуклеоид-ассоциированные белки (NAP) играют важную роль в защите и формировании структуры бактериального нуклеоида и определяют его функции на разных стадиях жизненного цикла бактерий. В поздней стационарной фазе роста происходит интенсивная экспрессия одного из NAP - белка Dps, что приводит к образованию ДНК-белковых кристаллов, превращающих нуклеоид в статическую структуру, эффективно защищенную от внешних воздействий, в том числе и от антибиотиков [1]. NAP белки HU и IHF также накапливаются в клетке на поздней стационарной стадии роста, предшествующей началу формирования защитного ДНК-Dps кристаллического комплекса. Они подготавливают бактериальную клетку к защитному анабиозу, и поэтому изучение их структуры и процессов, связанных с кристаллизацией генома, представляется весьма актуальным. Нами проведен структурный анализ этих белков с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) в качестве основного структурного метода, а также динамического рассеяния света (ДРС) в качестве дополнительного. Было показано, что белки HU и IHF в растворе образуют вытянутые, упорядоченные, образующие цепочки олигомеры, что характерно для предкристаллического состояния. Анализ данных МУРР позволил предположить, что олигомеризация IHF играет ключевую роль в подготовке образования защитных ДНК-Dps кристаллов [2]. Предположительно, этот же белок при изменении внешних условий возвращает бактериальные клетки к функциональному состоянию, заменяя собой Dps в кристаллических структурах при возможном участии в этом процессе белка HU. Полученные результаты важны для поиска новых подходов к преодолению устойчивости бактерий к лекарственным препаратам.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 18-74-10071), в рамках выполнения работ государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».*

1. Dadinova L.A. et al. Protective Dps-DNA co-crystallization in stressed cells: an in vitro structural study by small-angle X-ray scattering and cryo-electron tomography // FEBS Lett. 2019. V. 12. P. 1360-1371.
2. Дадинова Л.А. и др. Нуклеоид-ассоциированные белки HU и IHF: Олигомеризация и гидродинамические свойства // Биохимия. 2023. Т. 88, №. 5. С. 785 – 802.

## Исследование структуры и магнитных свойств наночастиц FeCo@C и FeNi@C, капсулированных в углерод

Н.А. Григорьева<sup>1</sup>, А.Е. Ермаков<sup>1</sup>, Е.А. Кравцов<sup>1,2</sup>, М.А. Уймин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург

УДК: 538.9, 537.9

Интерес к магнитным наноматериалам на основе 3d-металлов, капсулированных в углерод, возрос в связи с их широким применением в медицине и биологии в качестве терапевтических и диагностических средств [1]. Бинарные наноконпозиты (Fe-Co)@C (Co = 17 - 57 ат.%) и (Fe-Ni)@C (Ni = 2 - 50 ат.%) со структурой ядро-углеродная оболочка были синтезированы методом газоконденсатного синтеза [2]. Средний размер наночастиц без углерода составляет 30 – 40 нм. толщина оболочки частиц составляет 3 – 5 нм. Метод газоконденсатного синтеза обеспечивает не только защитное покрытие наночастиц, но и позволяет управлять их магнитными свойствами через вариации отношений 3d-металлов.

Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что добавки никеля приводят к стабилизации ГЦК-фазы на основе железа с параметром элементарной ячейки 3.563 Å. Анализ данных для системы (Fe-Co)@C при всех концентрациях Co показывает стабилизацию ОЦК-фазы на основе железа с параметром элементарной ячейки 2.835 Å и присутствие дополнительной ГЦК-фазы CoO с параметром элементарной ячейки 4.33 Å. Метод ядерного гамма-резонанса подтверждает сосуществование в (Fe-Co)@C двух фаз - ферромагнитной и парамагнитной. Мессбауэровские спектры, полученные при T = 295 К, показали наличие как парамагнитной, так и ферромагнитной фаз для двух систем (Fe-Co)@C и (Fe-Ni)@C.

Согласно данным малоуглового рентгеновского рассеяния исследуемые образцы состоят из наночастиц железокобальта или железоникеля компактной формы с характерной зависимостью малоуглового рентгеновского рассеяния для частиц с формой ядро-оболочка. В уравнении интенсивности рассеяния рентгеновского излучения показатель степени у переданных импульсов Q больше -4, что соответствует частице с твердым ядром и более рыхлой оболочкой. Оболочка наночастиц до напыления углерода сильно окислена. Сама частица объемно фрактальная, размером порядка 40 нм. Напыление углерода делает поверхность частицы идеально гладкой, степень Q становится равной 4, при этом размер частицы увеличился для (Fe-Co)@C и не меняется для (Fe-Ni)@C.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 21-72-00007) и в рамках Федеральной научно-технической программы «Развитие синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на период до 2030 года и на последующую перспективу» договор № 075-15-2022-830 (Продление договора № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г.).*

1. Khramtsov P., et al. Conjugation of carbon coated-iron nanoparticles with biomolecules for NMR-based assay // Colloids Surf. B. 2019. V.176. P. 256.
2. Erokhin A., et al. Phenylacetylene hydrogenation on Fe@C and Ni@C core-shell nanoparticles: About intrinsic activity of graphene-like carbon layer in H<sub>2</sub> activation // Carbon. 2014. V.74. P. 291.

## Численное моделирование времяпролетного нейтронного рефлектометра для компактного источника нейтронов DARIA методом Монте-Карло

Н.А. Григорьева<sup>1</sup>, Н.А. Коваленко<sup>2</sup>, С.В. Григорьев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.9, 537.9

Нейтронная рефлектометрия становится все более распространенным неразрушающим методом исследования одиночных слоев, многослойных систем, поверхностей и межслойных границ в широком спектре задач на стыке различных дисциплин (химия поверхности полимеров, физика тонких пленок и многослойных структур и т.д.) [1]. Строительство рефлектометров на источниках нейтронов малой и средней мощности на базе импульсных ионных или электронных ускорителей имеет свои особенности, и следует ответственно подходить к выбору и проектированию компонент рефлектометрической станции из-за малых потоков нейтронов. Компактный источник нейтронов изначально уступает несколько порядков нейтронного потока большому источнику ускорительного типа, однако значительная часть этих потерь может быть скомпенсирована увеличением апертуры захвата и глубокой оптимизацией экспериментальной установки, включая адаптацию параметров ускорителя, мишени и замедлителя к потребностям каждого нейтронного инструмента.

Компактный источник нейтронов DARIA, разрабатываемый в нескольких подразделениях НИЦ «Курчатовский институт» совместно с Институтом физики металлов УрО РАН, Институтом прикладной физики РАН и Балтийским федеральным университетом имеет пиковую плотность потока нейтронов на поверхности мезитиленового замедлителя для диапазона длин волн от 1 до 12 Å порядка  $5 \cdot 10^{12}$  н/см<sup>2</sup>/с с длительностью нейтронного импульса 100 мкс и частотой следования нейтронных импульсов 80 Гц. Моделирование нейтронного рефлектометра проводилось методом Монте-Карло в программном пакете McStas [2]. Параметры оптимизированного нейтронного рефлектометра приведены в Таблице.

Элемент	Характеристики	Средний поток, н·с <sup>-1</sup> ·см <sup>-2</sup>
мишенная сборка с холодным замедлителем (мезитилен)	13 МэВ мишень Ве: $50 \times 50 \times 1.1$ мм <sup>3</sup> Ф в импульсе до $5 \cdot 10^{12}$ н·с <sup>-1</sup> ·см <sup>-2</sup> . частота = 80.0 Гц, длина импульса = 100.0 мкс; $\lambda = 0.5 - 12$ Å	на входе в изогнутый нейтроновод ( $10 \times 50$ мм <sup>2</sup> ) $8.8 \cdot 10^6$
изогнутый нейтроновод	$10 \times 50 \times 5100$ мм <sup>3</sup> , $m = 2$	на выходе $2.8 \cdot 10^5$
2-дисковый прерыватель	$L = 14$ м, частота 40.0 Гц, $\lambda = 1 - 7$ Å	на выходе $1.1 \cdot 10^5$
нейтроновод	$5 \times 50 \times 3000$ мм <sup>3</sup> , $m = 2$	на выходе $7.6 \cdot 10^4$
2 диафрагмы	$1 \times 50$ мм <sup>2</sup>	на образце $2 \cdot 10^4$

*Работа выполнена в рамках Федеральной научно-технической программы «Развитие синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на период до 2030 года и на последующую перспективу» договор № 075-15-2022-830 (Продление договора № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г.).*

1. Боднарчук В.И., и др. // Кристаллография. 2022. Т. 67. №1. С. 57.
2. Lefmann K., Nielsen N.K. // Neutron news. 1999. V. 10. No. 3. P. 20.

## Пределы фазообразования и структурные особенности смешанных фторидов лантана и стронция

*В.М. Гридчина, О.Н. Хрыкина, Д.Н. Каримов*

*НИИЦ «Курчатовский институт», Москва*

УДК: 538.9, 539, 548, 54.022

Усложнение химического состава кристаллов является важным методом, применяемым при поиске новых материалов с необходимыми и контролируемыми свойствами. Гетеровалентные изоморфные замещения в кристаллах фторидов щелочноземельных элементов ( $MF_2$ ) со структурой типа флюорита вызывают наиболее радикальные изменения свойств, в общем случае нелинейно зависящих от состава. Поэтому изучение твердых растворов в бинарной системе  $MF_2-RF_3$  ( $R$  – редкоземельные элементы) позволит существенно расширить круг фторидных кристаллических материалов с отличными от исходных матриц  $MF_2$ . Возможности практического применения кристаллов с общей формулой  $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ , особенно твердых растворов, соответствующих границам существования фаз, для разных областей физики и химии твердого тела практически не изучены.

Объектом исследования в работе выбраны кристаллы  $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ ,  $x = 0.50$  и  $0.55$ , выращенные из расплава методом вертикальной направленной кристаллизации.

Согласно рентгенофазовому анализу, кристаллы, полученные при соотношении  $SrF_2$  к  $LaF_3$  1:1, однофазные и являются предельно насыщенным твердым раствором  $Sr_{0.50}La_{0.50}F_{2.5}$ . С отобраным образцом этого состава были проведены полные рентгенодифракционные эксперименты при 293 К. Выявлено, что монокристаллы  $Sr_{0.50}La_{0.50}F_{2.5}$  имеют кубическую флюоритоподобную решетку с периодом  $a = 5.86984(4)$  Å (пр. гр.  $Fm-3m$ ). Уточнение структуры показало сходство атомного строения этих кристаллов с другими, полученными в ряду  $M_{1-x}R_xF_{2+x}$  и относящимися к этому же структурному типу. Проанализированные межатомные расстояния и остаточная электронная плотность позволили сделать вывод о соответствии уточненного по результатам рентгеноструктурного анализа состава кристалла заложенному при росте.

В образцах, полученных при соотношении 45%  $SrF_2$  + 55 %  $LaF_3$ , согласно рентгенофазовому анализу, сосуществуют две кристаллические фазы: структурного типа флюорита ( $SrF_2$ ) и тисонита ( $LaF_3$ ) в процентном соотношении 0.885(3) : 0.115(2). Дальнейший анализ проведен методом Ритвельда для выявления соотношения стронция и лантана в обнаруженных фазах. Положениям и интенсивностям экспериментально полученных дифракционных отражений наилучшим образом удовлетворяют предельная флюоритовая фаза предельно насыщенного твердого раствора  $Sr_{0.50}La_{0.50}F_{2.5}$  и тисонитовая фаза состава  $La_{0.85}Sr_{0.15}F_{2.85}$  (пр. гр.  $P6_3/mmc$ ), также являющаяся предельно насыщенным твердым раствором.

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

## Исследование структуры и состава тонких кремнеземных пленок, допированных наночастицами платины и/или палладия

Н.Н. Губанова<sup>1,2</sup>, В.А. Матвеев<sup>1</sup>, О.А. Шилова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург

УДК: 538.91

Кремнеземные пленки, полученные методом spin-coating (нанесение на вращающуюся подложку), допированные различными элементами (Ag, Pt, Pd, Nb и др.) находят применение в микроэлектронике и фотонике, например, в качестве источников диффузатов в полупроводниковых устройствах. При этом легирующие добавки (допанты), как правило, распределяются в матрице SiO<sub>2</sub> в виде микро- или наноразмерных взаимопроникающих фаз или наночастиц. Размер, морфология, фазовый состав этих наночастиц, их распределение в пленке оказывает существенное влияние на целевые оптические, каталитические и др. свойства таких пленок. Малая толщина пленок (10-100 нм) налагает дополнительные трудности на исследование их структуры и состава, и требует использования целого комплекса методов исследования. В данной работе было проведено исследование особенностей кристаллизации и распределения в SiO<sub>2</sub>-пленках наночастиц Pt, Pd и Pt/Pd в зависимости от изменения в широких пределах концентрации допантов в кремнезолях.

Пленки формировали из кремнезелей, содержащих соединения платины и/или палладия от 10 до 80 мол. % Pt, Pd или PtPd на 100 мол. % Si. Был использован комплекс методов исследования: рентгеновская дифракция при скользящем падении пучка (GiXRD), рентгеновская рефлектометрия (XRR) и просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения (TEM).

Было установлено, что кристаллические наночастицы Pt, Pd и PtPd размером 4-8 нм начинают образовываться в SiO<sub>2</sub>-пленках при содержании допантов в кремнезолях не менее 10 моль Pt и/или Pd на 100 моль Si. Наночастицы, полученные из зелей с меньшим содержанием металлов, характеризуются аморфной структурой. Методом рентгеновской рефлектометрии определена толщина пленок, которая составила от 21 до 47 нм, было выявлено наличие градиента распределения допантов по толщине [1]. Была установлена зависимость толщины пленок от скорости вращения центрифуги в процессе нанесения и температуры отжига (термофиксации пленок). Проанализированы физико-химические процессы, обуславливающие влияние совокупности указанных факторов (концентрации допантов, скорости вращения центрифуги и температуры термообработки) на толщину получаемых пленок.

1. Gubanova N., Matveev V., Grebenschikova E., Kirilenko D., Sazonova Y., Shilova O. Pt and Pd Nanoparticle Crystallization in the Sol-Gel-Derived Thin SiO<sub>2</sub> Films // Physchem. 2023. V. 3. P. 259–269.

## Влияние стехиометрии на оптические и магнитные свойства CrSBr

Д.Л. Гусенков<sup>1,2</sup>, Е.И. Куницына<sup>1</sup>, Р.Б. Моргунов<sup>1,2,3</sup>, А.И. Чернов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,  
Черноголовка

<sup>2</sup>Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова  
(Сеченовский университет), Москва

<sup>3</sup>Российский квантовый центр, Сколково, Москва

УДК: 538.9, 537.622.5, 539.264

В ходе изучения магнитных свойств образца CrSBr была получена зависимость «магнитный момент – температура». Данная зависимость не совпадала с исследованиями, полученными в статье [1]. При этом наблюдалось уменьшение температуры перехода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние. Подобные эффекты наблюдались в статье [2], посвященной частичному замещению брома на хлор, а также влиянию внешнего давления.

Для подтверждения химического состава образца были проведены рамановская спектроскопия, рентген флуоресцентный анализ и рентгеноструктурный анализ. Рамановская спектроскопия выявила смещение характеристических пиков относительно чистого образца CrSBr. Так же было обнаружено сходство исследуемого образца с CrSBr с частичным замещением брома на хлор. РФА и РСА указали на снижение процентного содержания брома в образце. Однако наличие хлора в образце пока выявлено не было. Таким образом, можно говорить о деформации кристаллической решетки CrSBr, приведшее к изменению магнитных свойств.

Более точная идентификация вещества, а также изучение влияния внешнего давления на образец могут быть использованы для создания двумерного полупроводника с заданными магнитными свойствами.

1. Long F, Ghorbani-Asl M, Mosina K, Li Y, Lin K, Ganss F, Hübner R, Sofer Z, Dirnberger F, Kamra A, Krashennnikov AV, Prucnal S, Helm M, Zhou S. Ferromagnetic Interlayer Coupling in CrSBr Crystals Irradiated by Ions // Nano Lett. 2023 Sep 27;23(18):8468-8473.

2. Telford E.J, Daniel G.C, Xie K., Manganaro N.S., Huang C.-Y., Cox J., Dismukes A.H., Zhu X., Walsh J.P.S., et al. Designing Magnetic Properties in CrSBr through Hydrostatic Pressure and Ligand Substitution // Advanced Physics Research. 2023. 5 Nov.



## Влияние фрактальности на магнитные свойства наносети Ni, полученной методом лазерной абляции в среде сверхтекучего гелия

***Е.В. Дворецкая, Р.Б. Моргунов***

*ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка*

УДК: 538.9, 537.6

Магнитные наноструктуры, такие как нанопровода, наночастицы, нано-шары [1], широко применяются в разработке устройств магнитной логики и магнитной памяти [2], а также в биофизике и медицине [3].

В работе исследованы магнитные свойства наносети Ni на разных стадиях ее формирования, происходящего в среде сверхтекучего He под действием лазерной абляции. Установлено, что на ранних стадиях абляции наносеть состоит в основном из нанопроводов и имеет прямоугольную петлю магнитного гистерезиса. На поздних стадиях абляции растет концентрация наносфер и их диаметр, а форма петли гистерезиса отклоняется от прямоугольной.

Наносеть Ni представляет собой фрактальную структуру, формирующуюся в несколько стадий с постепенным увеличением показателя фрактальности при увеличении Ni в наносети. Установлена связь магнитных свойств и фрактальной размерности наносети Ni, которая варьируется от 1 на ранних стадиях абляции, когда имеют место отдельные нанопровода, до 2, когда наносеть становится столь плотной, что представляет собой сплошную пленку. Путем изменения времени абляции можно контролировать и создавать самоподобные структуры требуемой формы с заданными магнитными свойствами.

*Работа выполнена в рамках тематической карты ФИЦ ПХФ и МХ РАН FFSG-2024-0009.*

1. Stoner E.C. et al. A mechanism of magnetic hysteresis in hetero-geneous alloys. Philosophical Transactions of the Royal Society of London: London, United Kingdom. 1948. P. 599-642.
2. Karmakar S. et al. Nanoelectronics and spintronics with nanoparticles // J. Phys. Conf. Ser. 2011. No. 292. P. 012002.
3. Akbarzadeh A. et al. Magnetic nanoparticles: preparation, physical properties, and applications in biomedicine // Nanoscale Res. Lett. 2012. V. 7. P. 144.

## Модификация микроструктуры катодного материала Prussian White и ее влияние на электрохимические характеристики натрий-ионных аккумуляторов

*М.Е. Донец<sup>1</sup>, Р.Н. Васин<sup>1</sup>, С.В. Сумников<sup>1</sup>, Е.А. Корнеева<sup>2</sup>, Н.Ю. Самойлова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория нейтронной физики  
им. И.М. Франка, Дубна*

<sup>2</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ядерных реакций  
им. Г.Н. Флерова, Дубна*

УДК: 538.9, 54

Электрохимические характеристики, такие как емкость, мощность, скорость заряда/разряда, сильно зависят от структуры и микроструктуры катодного материала. Теоретически эти значения можно увеличить за счет уменьшения размера частиц материала, которое приводит к более коротким путям диффузии ионов и большей площади поверхности активного материала, контактирующей с проводящими добавками и электролитом [1]. Известно, что уменьшение размера частиц хорошо коррелирует с улучшением электрохимических свойств материалов литий-ионных аккумуляторов [2-4].

В данной работе было исследовано влияние механического перемолота на электрохимические свойства коммерческого гексацианоферрата натрия (Prussian White, PW), катодного материала для натрий-ионных аккумуляторов. Чистый порошок состоит из частиц кубической формы с линейными размерами 5-20 мкм.

По мере увеличения времени перемолота исходного порошка с добавлением ацетона в шаровой мельнице кубические частицы разрушаются до фрагментов кубической морфологии размером 5 мкм, 2 мкм и менее 1 мкм для порошков, подвергавшихся перемолу в течение 1, 3 и 6 часов, соответственно. Рентгеноструктурный анализ порошков после их сушки при 120°C позволил выявить сосуществование двух кубических фаз (пр. гр. Fm-3m) и дегидратированной ромбоэдрической фазы (пр. гр. R-3). Длительное время помола, бч, приводит к увеличению доли ромбоэдрической фазы, что является следствием лучшего дегидратирования перемолотого порошка по сравнению с образцами с более крупными кубическими частицами (в исходных порошках PW) или их фрагментами (порошки, перемолотые в течение 1ч и 3ч). Электрохимическое циклирование ячеек, собранных с электродами на основе перемолотых образцов в качестве активного материала и натриевым анодом, показали меньшее падение емкости при высоких скоростях заряда/разряда и более стабильную работу при проведении экспериментов по длительному циклированию.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00261).*

1. A. Yamada, S. C. Chung, and K. Hinokuma. Optimized LiFePO<sub>4</sub> for Lithium Battery Cathodes // J. Electrochem. Soc. 2001. V.148, A224.
2. I. A. Bobrikov et al. Structural evolution in LiFePO<sub>4</sub>-based battery materials: In-situ and ex-situ time-of-flight neutron diffraction study // J. Power Sources 2014. V. 258, P. 356-364.
3. J. Ni, Y. Kawabe, et al. Improved electrochemical activity of LiMnPO<sub>4</sub> by high-energy ball-milling // J. Power. Sources 2011. V. 196, P. 8104-8109.
4. H. Zhang, Y. Xu, and D. Liu A Simple Method for Industrialization to Enhance Tap Density of LiNi<sub>0.5</sub>Co<sub>0.2</sub>Mn<sub>0.3</sub>O<sub>2</sub> Cathode Material for High-Specific Volumetric Energy Lithium-ion Batteries// RSC. Adv. 2015. V. 5, P. 11091-11100.

## Тензометрическая чувствительность многокомпонентных сплавов на основе 4d и 5d-металлов

*И.В. Евдокимов<sup>1</sup>, Е.В. Стерхов<sup>1</sup>, С.А. Упоров<sup>1</sup>, В.А. Быков<sup>1</sup>, В.А. Сидоров<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Институт металлургии Уральского отделения РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк

УДК: 538.9, 669.017.15

Высокоэнтропийный сплав (ВЭС) TiZrHfNb является слабым магнетиком с малым температурным коэффициентом сопротивления, что позволяет рассматривать сплавы на основе 4d и 5d-металлов в качестве перспективных материалов для тензорезисторов [1]. В данной работе представлены результаты исследования, термического коэффициента расширения, электропроводности, магнитных свойств и тензочувствительности сплавов TiHfZrTa, TiHfNbZrTa, TiHfNbTa и TiHfNbZr. Полученные слитки имеют псевдокубическую кристаллическую структуру с пространственной группой  $Im\bar{3}m$  (229). На дифрактограммах наблюдается уширение дифракционных линий. Оно обусловлено внутризерновой дендритной ликвацией, которая подтверждается результатами сканирующей электронной микроскопии.

Исследуемые ВЭС являются парамагнетиками с высоким удельным сопротивлением и низким температурным коэффициентом сопротивления. Сплавы демонстрируют довольно сильную барическую зависимость сопротивления в диапазоне давлений 0-6 ГПа. Предложена модель, которая адекватно описывает изменение удельного сопротивления с внешним давлением. Для определения тензометрической чувствительности исходные слитки прокатывали на вальцах до толщины 150-260 мкм. Измерения тензометрической чувствительности проводили на собранной коллективом ИМЕТ УрО РАН установке оригинальной конструкции. По сравнению с коммерческими сплавами полученные образцы обладают высокой тензочувствительностью, и линейной зависимостью этого коэффициента от приложенной нагрузки (вплоть до 972 МПа).

*Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 23-13-00162 с использованием оборудования ЦКП “Урал-М”.*

1. Uporov S.A., Ryltsev R.E., Sidorov V.A., Estemirova S.Kh., Sterkhov E.V., Balyakin I.A., Chtchelkatchev N.M. Pressure effects on electronic structure and electrical conductivity of TiZrHfNb high-entropy alloy // *Intermetallics*. 2022. V. 140. P. 107394.

## Коллоидные наночастицы гексаферрита как зонды для измерения вязкости с микрометровым разрешением

Ар.А. Елисеев<sup>1</sup>, В.В. Королев<sup>1,2</sup>, Е.О. Анохин<sup>1</sup>, Л.А. Трусов<sup>1</sup>, П.Е. Казин<sup>1</sup>, Ан.А. Елисеев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
химический факультет, Москва

<sup>2</sup>Лаборатория функциональных квантовых материалов, НИТУ МИСИС, Москва, Россия

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
факультет наук о материалах, Москва

УДК: 538.955, 538.958

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. В последнее время значительно возрос интерес к наночастицам гексаферрита, что вызвано несколькими уникальными свойствами: анизотропная пластинчатая форма и значительный остаточный магнитный момент вдоль оси *c*. Подобный набор свойств обеспечивает ряд перспективных применений материала: устройства записи высокой плотности, наноструктуры и композиты, использование в медицинских целях. В частности, сочетание анизотропной формы и постоянного магнитного момента обеспечивает возникновение зависимости оптической плотности коллоидных растворов наночастиц гексаферрита от напряженности и ориентации внешнего магнитного поля. Данный эффект позволяет использовать феррожидкости на основе гексаферрита в качестве сенсорного материала,

Синтез коллоидных растворов осуществлялся в соответствии с ранее разработанной методикой растворения боратной стеклокерамики [1]. В предыдущей работе динамика частиц дисперсной фазы была исследована на основании магнитооптического отклика системы, данных малоуглового рентгеновского рассеяния и магнитометрии в переменном магнитном поле [2]. Было показано, что динамические характеристики частиц значительно зависят от вязкости растворителя. Соответственно, изменяется как магнитный, так и магнитооптический отклик системы при воздействии переменного магнитного поля.

В настоящей работе исследовалась возможность использования наночастиц гексаферрита в качестве сенсоров вязкости растворителя. Поскольку методика синтеза предполагает формирование водного коллоидного раствора, для замены растворителя использовалась методика внесения малого количества концентрированной фазы [3] в необходимый полярный сольвент. Динамические характеристики частиц определялись на основании магнитооптического отклика системы в переменном магнитном поле. Было показано, что тангенс сдвига фазы магнитооптического отклика относительно внешнего магнитного поля линейно коррелирует с вязкостью растворителя (были протестированы растворители с вязкостью 1-1000 мПа\*с) в широком диапазоне частот и напряженностей. Использование чувствительных оптических сенсоров и лазерного источника излучения в сочетании с конфокальной микроскопией позволило достичь пространственного разрешения не менее 20 мкм. Для демонстрации высокой разрешающей способности разработанного метода было проведено картирование процесса смешения потоков двух жидкостей (воды и этиленгликоля), содержащих наночастицы гексаферрита в качестве зонда) в т-образном микроканале (ширина 300 мкм, толщина 100 мкм). Более того, за счет высокой скорости отклика системы (при вязкости 1000 мПа\*с время регистрации не превышает 10 с) оказывается возможным и *in-situ* измерение вязкости.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 23-73-10045.*

1. Trusov L.A. et al. Stable colloidal solutions of strontium hexaferrite hard magnetic nanoparticles // Chem. Commun. United Kingdom: United Kingdom. 2014. Vol. 50, № 93. P. 14581–14584.
2. Eliseev A.A. et al. Rotational dynamics of colloidal hexaferrite nanoplates // Appl. Phys. Lett. 2018. Vol. 113. № 11. P. 113106.
3. Eliseev A.A. et al. Tunable order in colloids of hard magnetic hexaferrite nanoplatelets // Nano Res. 2022. Vol. 15. № 2. P. 898–906.

## 2D-мембраны для выделения и очистки воды

Ан.А. Елисеев<sup>1</sup>, К.Е. Гурьянов<sup>1</sup>, Ар.А. Елисеев<sup>1</sup>, Д.И. Петухов<sup>1</sup>, А.А. Поярков<sup>1</sup>, Р.Г. Валеев<sup>2</sup>,  
А.П. Чумаков<sup>3</sup>.

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Москва

<sup>2</sup>УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

<sup>3</sup>ESRF – The European Synchrotron, Grenoble

УДК: 538.9, 546.05

Представлены результаты теоретического и практического исследования процессов массопереноса через мембраны, образованные из слоев квазидвумерных соединений, обладающих гидрофильной (оксид графена, слоистые карбиды титана, дисульфид молибдена) и гидрофобной поверхностью (графен, наноллисты CdTe в оболочке олеиновой кислоты). Изучены механизмы транспорта в данных системах и показана возможность реализации процессов разделения компонентов по механизмам конфигурационной диффузии, транспорта с переносчиками и капиллярной конденсации в межслоевом пространстве в зависимости от межплоскостного расстояния и химического состава поверхности наноллистов. С использованием данных классов мембран показана возможность эффективного разделения в парах  $\text{H}_2\text{O}/\text{N}_2$ ,  $\text{H}^+/\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2/\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3/\text{H}_2$ ,  $\text{C}_4\text{H}_{10}/\text{CH}_4$  и др. В ходе работ достигнуты рекордные показатели проницаемости и селективности тонких (50-200 нм) селективных слоев модифицированного оксида графена по парам воды ( $P(\text{H}_2\text{O}) \sim 100 \text{ м}^3/(\text{м}^2 \cdot \text{бар} \cdot \text{ч})$ ;  $S(\text{H}_2\text{O}/\text{N}_2) > 5 \cdot 10^4$ ), а также продемонстрирована высокая производительность мембран в процессах осушения газов (более  $30 \text{ м}^3/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$  по сырьевому газу) и первапорационного опреснения (до  $10 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$  при  $60 \text{ }^\circ\text{C}$ ) [1].

Для установления особенностей транспорта воды в нанощелях использованы методы *in situ* и *in operando* мониторинга межслоевого расстояния с применением синхротронного излучения. Обнаружено, что механизм транспорта изменяется по мере сорбции пенетранта и увеличения межплоскостного расстояния, что связано с изменением энтропийного фактора и активационного барьера диффузии [2]. На величину активационного барьера также значительно влияет плотность функциональных групп на поверхности наноллистов. Показано, что транспорт молекул воды через сильно окисленный оксид графена ( $\text{C}/\text{O} \approx 1.8$ ) проходит значительно легче, чем через восстановленную форму ( $\text{C}/\text{O} \approx 2.1$ ) и существенно затрудняется при интеркаляции ионов в межслоевое пространство. Энергии активации транспорта экспериментально определены на основе температурных зависимостей проницаемости и ширины нанощели в процессах транспорта паров и первапорации подтверждены теоретически с помощью полуэмпирических моделей. Показано, что контролируемое изменение межплоскостного расстояния с помощью молекул-спейсеров или фиксация размеров щели между наноллистами с помощью интеркалированных ионов или молекул, а также изменения химического состава оксида графена позволяет создавать мембранные материалы с заданными транспортными характеристиками. Кроме того, изменение межслоевого расстояния с помощью внешних воздействий (с помощью температурно-контролируемой адсорбции или конфигурации спейсеров) позволяет регулировать производительность таких мембран непосредственно в процессе эксплуатации, что открывает путь к созданию новых классов “умных” мембранных материалов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-13-00195.*

1. Gurianov K.E. et al. Pervaporation desalination with graphene oxide membranes: The influence of cation type and loading // Desalination. 2023. V. 547. N. 116238.
2. Eliseev A.A. et al. Temperature controlled swelling of graphene oxide for switchable dehumidification membranes // Journal of Membrane Science. 2024. V. 690 P. 122213.

## Структуры и фазовые переходы в тройных сплавах на основе Fe

Б. Ержанов

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна  
Казанский федеральный университет, Казань*

УДК: 538.911

Открытие увеличения магнитострикции  $\alpha$ -Fe при частичном замещении железа на галлий [1] вызвало появление большого числа исследований, в которых аналогичный эффект искался в разнообразных бинарных (Fe-Al, Fe-Ge, Fe-Si и др.) и тройных (Fe-Ga-Al, Fe-Ga-Ge и др.) сплавах на основе железа. В настоящее время имеется немалое число исследований структуры и свойств сплавов Fe-Ga (повышенная магнитострикция) и сплавов Fe-Al (улучшенные механические свойства) [2]. Однако структурные работы по тройным сплавам Fe-Ga-Al (перспективные по сочетанию механических и магнитных свойств) практически отсутствуют. Еще одной интересной структурной темой являются исследования влияния легирования редкоземельными элементами (RE), такими как Tb, Dy, Ce, Y, Er, Pr, Sm, La, на характеристики сплавов Fe-Ga. Физические и технические свойства этих функциональных материалов во многом зависят от их специфической атомной структуры, объемного содержания различных структурных фаз и их микроструктурного состояния.

Результаты получены в нейтронных дифракционных экспериментах, проведенных в двух режимах: с высоким разрешением по межплоскостному расстоянию и с высокой светосилой в ходе непрерывного сканирования по температуре при нагреве до  $\sim 900^\circ\text{C}$  и последующем охлаждении. Информация о микроструктурном состоянии сплавов получена с использованием методов Вильямсона-Холла и Пелашека, позволяющих оценить характерные размеры и распределение по размерам областей когерентного рассеяния путем анализа профилей дифракционных пиков [3, 4].

В работе проведены исследования эволюции структурных фаз и микроструктуры литого состояния составов  $\text{Fe}_{100-(x+y)}\text{Ga}_x\text{Al}_y$  в диапазоне  $17 \leq (x + y) \leq 39$  ат.% [5] и  $\text{Fe}_{100-(x+y)}\text{Ga}_x\text{RE}_y$ , (с  $x \approx 19, 27$  ат.%), где в качестве редкоземельных металлов использовались элементы Er ( $y = 0.5$  и  $0.2$  ат.%), Yb ( $y = 0.5$  и  $0.24$  ат.%) и Dy, Tb ( $y \approx 0.1$  ат.%). Установлено, что в литых тройных сплавах в изученном диапазоне содержания Ga и Al наблюдаются преимущественно кубические фазы (A2, B2 и D0<sub>3</sub>). Большая часть  $\text{Fe}_{100-(x+y)}\text{Ga}_x\text{Al}_y$  сплавов в исходном (литом) состоянии характеризуются двухфазным состоянием частично упорядоченных матрицы с фазой B2 и кластеров с фазой D0<sub>3</sub>. В составах  $\text{Fe}_{100-(x+y)}\text{Ga}_x\text{RE}_y$  были обнаружены как кубические фазы A2, B2, D0<sub>3</sub>, A1, L1<sub>2</sub>, так и гексагональные фазы A3 и D0<sub>19</sub>. Легирование Fe-Ga сплавов редкоземельными элементами в количестве 0.5 ат.% привело к частичной или полной стабилизации кубических структур на основе ОЦК-ячейки. В исходном состоянии микроструктура сплавов  $\text{Fe}_{100-(x+y)}\text{Ga}_x\text{RE}_y$  с  $y = 0.5$  ат.%, представляет собой структурно неупорядоченную матрицу фазы A2 с дисперсно встроенными в нее кластерами упорядоченной фазы D0<sub>3</sub>.

*Исследование выполнено в рамках проекта № 22-42-04404 РФФ.*

1. Clark A.E. et al. Magnetostrictive properties of body-centered cubic Fe-Ga and Fe-Ga-Al alloys // IEEE Trans. Magn. 2000. V. 36(5). P. 3238–3240.
2. Головин И.С. и др. Структура и свойства Fe-Ga сплавов - перспективных материалов для электроники // Физика металлов и металловедение. 2020. Т. 121. С. 937–980.
3. Pielaszek R. FW1/5/4/5M method for determination of the grain size distribution from powder diffraction line profile // J. Alloys Compd. 2004. V. 382. P. 128–132.
4. Ержанов Б., Бобриков И.А., Балагуров А.М. Оценка размера областей когерентного рассеяния по нейтронным дифракционным данным // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед. 2024. Принята в печать.
5. Балагуров А.М. и др. Структуры и фазовые переходы в Fe-Ga-Al сплавах // Физика твердого тела. 2022. Т. 64. С. 1873–1881.

## Модификация топологических поверхностных состояний в системах $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ ( $A=Si, Ge, Sn, Pb$ )

*Т.П. Естюнина, А.В. Тарасов, А.В. Ерыженков, Д.А. Естюнин, А.М. Шикин*

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург*

УДК:538.9

Магнитные топологические изоляторы (ТИ) – материалы, в которых благодаря уникальному взаимодействию топологии и магнетизма возможна реализация квантового аномального эффекта Холла [1]. В топологических поверхностных состояниях (ТПС) магнитных ТИ образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака вследствие нарушения симметрии относительно обращения времени [2,3]. Возможность управления величиной ЭЗЗ имеет решающее значение для развития устройств на основе ТИ. Наиболее перспективный магнитный ТИ - собственный антиферромагнитный ТИ  $MnBi_2Te_4$ , который состоит из семислойных блоков (СБ), каждый из которых имеет вид  $Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te$ . Заменяя атомы Mn на немагнитные атомы, можно управлять магнитными свойствами и электронной структурой материала, в частности, влиять на величину ЭЗЗ в точке Дирака и объемной ЭЗЗ. В работе [4] теоретически и экспериментально была показана возможность модуляции электронной структуры для системы  $Mn_{1-x}Pb_xBi_2Te_4$  во всем объеме кристалла. Однако наряду с изменением величины ЭЗЗ в точке Дирака по мере увеличения концентрации закрывалась объемная ЭЗЗ и, как следствие, происходил топологический фазовый переход, т.е. исчезали ТПС и менялась топологическая фаза материала. Таким образом, в настоящее время актуальной задачей является поиск способа модификации электронной структуры ТИ без изменения его топологического инварианта.

Данная работа была проведена с использованием метода теории функционала плотности и посвящена детальному анализу модификации электронной структуры и величины ЭЗЗ в точке Дирака при замещении Mn на элементы IV группы  $A = Si, Ge, Sn, Pb$  в гетероструктуре  $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ , где  $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ , и замещение производится только в поверхностном СБ. Было показано, что изменение зонной структуры зависит в большей степени от концентрации замещающего элемента, чем от выбора типа атома. Однако на величину ЭЗЗ в точке Дирака значительно влияет выбор замещающего атома. Так, для Si и Ge наблюдалось монотонное уменьшение величины ЭЗЗ от 58 мэВ при  $x = 0$  до нулевых значений при  $x = 1$ . При замещении Mn на Sn и Pb минимум ЭЗЗ в точке Дирака достигался при  $x = 0.75$ , но при дальнейшем увеличении концентрации до  $x = 1$  происходило увеличение ЭЗЗ. В данной работе была подтверждена связь величины ЭЗЗ и локализации ТПС. В случае замещения Mn на Si, Ge при  $x=1$  локализация ТПС оказывается поверхностной: 80% плотности ТПС находятся в 1 СБ, в котором отсутствуют атомы Mn. В случае замещения Mn на Sn или Pb ТПС перераспределяются в более глубоко лежащие СБ. В результате для данных гетероструктур ЭЗЗ в точке Дирака не закрывается. Важно отметить, что при любых уровнях замещения Mn на Si, Ge, Sn, Pb гетероструктуры остаются в топологически нетривиальной фазе и ТПС сохраняются. Изменение величины ЭЗЗ путем замены поверхностных магнитных атомов Mn на немагнитные может быть использовано для создания синтетических слоистых топологических структур с целенаправленно измененной электронной структурой и величиной ЭЗЗ в точке Дирака.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 23-12-00016.*

1. Bernevig B. A., Felser C., Beidenkopf H. Progress and prospects in magnetic topological materials // Nature. 2022. Т. 603. №. 7899. С. 41-51.
2. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators // Reviews of modern physics. 2010. Т. 82. №. 4. С. 3045.
3. Qi X. L., Hughes T. L., Zhang S. C. Topological field theory of time-reversal invariant insulators // Physical Review B. 2008. Т. 78. №. 19. С. 195424.
4. Qian T. et al. Magnetic dilution effect and topological phase transitions in  $(Mn_{1-x}Pb_x)Bi_2Te_4$  // Physical Review B. 2022. Т. 106. №. 4. С. 045121.

## Исследование влияния изменения давления и температуры на систему водородных связей и конформацию молекул в парацетамоле и его аналогах

***Г.И. Жданкин<sup>1,2</sup>, Н.Е. Богданов<sup>1</sup>, Б.А. Захаров<sup>1,2</sup>, Е.В. Болдырева<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск

<sup>2</sup>ЦКП «СКИФ», Институт Катализа им. Борескова СО РАН, Кольцово

УДК: 538.9, 548.33

Исследования кристаллов при переменных давлении и температуре важны для понимания строения и свойств упорядоченных структур и факторов, определяющих их формирование, устойчивость и изменчивость. Особое внимание уделяется молекулярным кристаллам. В исследовании таких систем ключевую роль играет анализ межмолекулярных водородных связей, Ван-дер-Ваальсовых и  $\pi$ - $\pi$  взаимодействий в различных полиморфных модификациях и соединениях со сходными молекулярными структурами [1] [1]. Отдельный интерес представляет изучение соединений, входящих в состав фармацевтических препаратов. Сравнение таких структур позволяет лучше понять взаимосвязь «структура-свойство». В частности, различные полиморфные модификации одного и того же соединения могут демонстрировать различную растворимость, температуру плавления и таблетруемость.

N-(4-гидроксибензил)ацетамид, или парацетамол, является хорошей модельной системой для исследования полиморфизма молекулярных кристаллов благодаря наличию нескольких типов межмолекулярных водородных связей и Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий и конформационной гибкости молекул. Это первое лекарственное вещество, которое было исследовано в условиях гидростатического сжатия [2,3] [2,3]. Наибольший интерес представляют две полиморфные модификации парацетамола: стабильная моноклинная форма I ( $P2_1/n$ ) и метастабильная ромбическая форма II ( $Pbca$ ). В то время как влияние давления на форму I изучалось методами монокристаллической и порошковой рентгеновской дифракции, форма II исследовалась только последним методом, поэтому известны только изменения параметров элементарной ячейки, но не координат атомов. Также почти не проводились исследования того, как варьирование заместителей в парацетамоле, изменяя возможность образования водородных связей и упаковки молекул, может повлиять на формирование кристаллической структуры и ее отклик на внешние воздействия. Поэтому в качестве дополнительных объектов для исследования были взяты N-(4-гидроксибензил)-2,2-диметилпропанамид (метильная группа парацетамола заменена на третбутильную) и N-(*p*-толил)-2,2-диметилпропанамид (дополнительно проведена замена гидроксильной группы на метильную).

Исследования монокристаллов методами рентгеновской дифракции и КР-спектроскопии при повышении давления до ~6 ГПа, а также в диапазоне температур 100 – 300 К позволили сравнить изменения межмолекулярных взаимодействий в условиях варьирования внешних параметров в разных кристаллических структурах.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации: программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» в Новосибирском государственном университете и проекта Государственного задания для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042). Эксперименты были выполнены на оборудовании кафедры ХТТ ФЕН в лаборатории ЛабМДЭБТ «НОЦИНХИТ НГУ-ИК СО РАН».*

1. Boldyreva E. V. Understanding Intermolecular Interactions in the Solid State // Understanding Intermolecular Interactions in the Solid State: Approaches and Techniques / ed. Chopra D. Cambridge: Royal Society of Chemistry. 2018. P. 32–97.
2. Boldyreva, E. V. et al. Anisotropic crystal structure distortion of the monoclinic polymorph of acetaminophen at high hydrostatic pressures. Acta Cryst.B. 2000. V. 56(2). P. 299-309.
3. Boldyreva, E. V. et al. Effect of high pressure on the polymorphs of paracetamol, J.Therm. Analys.Calorim. 2002. V. 68. P.437-452.



## **О влиянии выбора параметризации мпа потенциалов на структурные характеристики бинарных и тернарных металлических наночастиц, воспроизводимых в молекулярно-динамических экспериментах**

**Д.В. Жигунов, В.М. Самсонов, И.В. Талызин, А.А. Романов, Н.Ю. Сдобняков, Н.И. Непша**

*Тверской государственный университет, Тверь*

УДК: 538.9, 539.2, 536.9

При переходе от атомистического моделирования однокомпонентных металлических наночастиц к бинарным и многокомпонентным возникает вопрос о том, в какой степени выбор параметризаций потенциалов межатомного взаимодействия влияет на структурные характеристики моделируемых наносплавов. В [1] были предложены параметризации потенциалов метода погруженного атома (МПА) для 12 металлов и алгоритм, позволяющий находить «перекрестные» параметризации, характеризующие взаимодействие атомов разных сортов. Однако в [2] мы обнаружили, что параметризации [1] неадекватно предсказывают для Pd более высокую температуру плавления, чем для Pt. Вместе с тем, оказалось, что в наших молекулярно-динамических экспериментах, отвечающих последовательным процессам закалки (равномерное снижение температуры от температуры плавления наночастиц до некоторой конечной температуры) и отжига (релаксации при фиксированной конечной температуре) бинарных наночастиц Pt-Pd с исходным однородным распределением компонентов параметризации [1] и [2] предсказывают практически совпадающие структурные характеристики. Однако при переходе к тернарному наносплаву Pt<sub>500</sub>-Pd<sub>500</sub>-Ni<sub>500</sub> ситуация меняется. Использование наших параметризаций [2] приводит к тому, что после закалки и последующего отжига при температуре 1100 К формируются двухоболочечные наноструктуры PtPdNi@Ni@Pd, тогда как параметризации [1] предсказывают формирование наноструктур PtPdNi@Pt@Pd. В обоих случаях наружный монослой представлен атомами Pd, но промежуточная оболочка – атомами Ni и Pt, соответственно. Таким образом, на примере тернарного наносплава PtPdNi мы показали, что структурные характеристики тернарных наносплавов более чувствительны к выбору МПА параметризаций. В методологическом плане можно сделать вывод, что атомистическому моделированию многокомпонентных наносплавов должна предшествовать тщательная апробация используемых потенциалов и их параметризаций, включающая атомистическое моделирование наночастиц тех же металлов, но содержащих меньшее число компонентов.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственной программы в области научно-исследовательской деятельности (0817-2023-0006).*

1. Samsonov V.M., Romanov A.A., Kartoshkin A.Yu., Talyzin I.V., Puytov V.V. Embedding functions for Pt and Pd: recalculation and verification on properties of bulk phases, Pt, Pd, and Pt–Pd nanoparticles // Applied Physics A. 2022. V. 128. N. 826. P. 14.
2. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B. 2004. V. 69. I. 14113114.
3. Samsonov V., Romanov A., Talyzin I., Lutsay A., Zhigunov D., Puytov V. Puzzles of Surface Segregation in Binary Pt–Pd Nanoparticles: Molecular Dynamics and Thermodynamic Simulations // Metals. 2023. V. 13. I. 7. Art. № 1269. P.20.

## Растущая гидридная Земля и пятое измерение

И.Л. Жогин

ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

УДК: 551.1, 53.01, 53.03, 538.9

Сходство береговых линий континентов породило идею (Р. Монтовани, 1889), что первоначально суша покрывала почти всю поверхность Земли, которая была вдвое меньше по размеру, чем в наше время. Автор «The Expanding Earth» (1976) С.У. Кэри связывал загадочные процессы, увеличивающие массу небесных тел, с космологическими явлениями (как и другие авторы: И.О. Янковский, В.Ф. Блинов, ...). Измерения (магнитные) возраста дна океанов показали, что океаны начали раскрываться около 200 млн. лет назад, и их площадь растёт экспоненциально. Сходимость материков на малых глобусах строится по картам возрастов дна океанов, и это точная процедура (см. также: [earthk.com](http://earthk.com)). Однако, подобный рост массы Земли (и барионного числа;  $V'/V \sim 10^{-16} \text{ s}^{-1}$ ) не стыкуется с принятыми теориями.

Следуя идеям Ф. Хойла (автор термина «Big Bang») о формировании протопланетного диска (частичная ионизация), В.Н. Ларин разработал теорию происхождения и развития гидридной Земли [1]. Рост Земли объясняется разложением очень плотных гидридов металлов (внутреннее ядро Земли – до  $25 \text{ г/см}^3$ !?) с выделением тепла и водорода, выходящего из внешнего жидко-металлического ядра (водород внесен в реестр полезных ископаемых, 2023 г.) и с увеличением объема. Подтвердились также другие предсказания В.Н. Ларина: поперечные разломы (и продольный рост) срединно-океанических хребтов [1, с.87], сверхпластичность наводороженных металлов при высоком давлении (и рапид-синтез алмазов из чугуна), и др. Однако, малый оставшийся объем внутреннего ядра (по Ларину  $\sim 1\%$ ) не вполне согласуется с сохраняющимся экспоненциальным ростом Земли; возможно, и в рамках этой теории будет востребован некий «космологический механизм» генерации новой массы, новых частиц.

Другой круг загадочных явлений это LENR-эффекты (Low Energy Nuclear Reactions) – например, эксперименты по электровзрыву вольфрамовых проволочек [2], с образованием гелия. Общее для LENR – большая плотность вещества (барионов) в условиях нагрева до нескольких тысяч градусов (плазма, коронный разряд – то есть, плюс много фотонов), что сопровождается низкоэнергетическими ядерными трансформациями и генерацией энергии.

Как отмечал М.А. Булгаков, с пятым измерением некоторые непонятные вещи могут стать очевидными. Попробуем понять загадочный рост массы в рамках пятимерной теории (исключительный вариант телепараллелизма), где нет сингулярностей решений [3]. Нет тут и законов сохранения (ЗС), зато есть ковариантно сохраняющийся тензор энергии-импульса (псевдотензор ЭИ тривиален), а также  $O_4$ -симметричные решения типа волны (продольной), бегущей по радиусу, в которой, как в оптическом волноводе (или *толстой бране*) могут удерживаться волны и *частицы* (конфигурации поля, несущие топологический (квази)заряд).

Нелинейные возмущения, которые в эпоху генерации частиц (растянутый big bang;  $z \approx 2\Gamma^2 \gg 10^4$ , т.е. до эпохи первичной рекомбинации) вылетели из браны к центру и теперь снова её пересекают, могут вызывать локальные нарушения симметрий (в т.ч. C-, CP-) и ЗС, генерируя и трансформируя частицы ( $\Gamma$  это Лоренц-фактор расширяющейся браны [4] для «абсолютного наблюдателя» в центре сферы; ЗС зависят от симметрий, векторов Киллинга).

1. Ларин В.Н. Наша Земля (происхождение, состав, строение и развитие изначально гидридной Земли). Москва: Агар, 2005.
2. Уруцкоев Л.И., Филиппов Д.В., Бирюков А.О., Войтенко Д.А. и др. Исследование возможности инициирования альфа-распада вольфрама с помощью электровзрыва // Прикладная физика и математика. 2017. №1. С. 3–27.
3. Жогин И.Л. Внегалактические ТэВ-ные фотоны и предел спектра нулевых колебаний // Пространство, время и фундаментальные взаимодействия. 2023. № 3-4. С. 327–332.
4. Жогин И.Л. One more fitting ( $D=5$ ) of Supernovae redshifts // Preprint <https://arxiv.org/abs/0902.4513v3>

## Исследование вибрационных свойств тонких пленок CdSe

Л.Н. Ибрагимова

Институт природных ресурсов, Нахичеван

УДК: 538.91

Изучение атомной динамики полупроводниковых материалов позволяет изучить ряд процессов, происходящих в них. Поэтому проводятся обширные исследования по изучению атомной динамики и колебаний решетки этих материалов. В последнее время исследован ряд материалов в виде тонких пленок. Физические и химические свойства их тонких слоев становятся все более интересными. Объем устройств, изготовленных на основе тонких слоев, меньше. Поэтому эти исследования продолжаются. Производство тонких слоев материалов с металлическими и полупроводниковыми свойствами осуществляется по специальным технологиям. Наблюдение физических свойств этих материалов в тонких слоях увеличивает возможности их применения. Одним из наиболее изученных полупроводниковых материалов является соединение CdSe. Эти кристаллы широко используются в качестве активной среды в полупроводниковых лазерах, дисплеях, детекторах, фоторезисторах и светодиодах [1,2]. Однако атомная динамика этих слоев не изучена. В данной работе методом химического осаждения были получены тонкие пленки CdSe и изучена их атомная динамика.

Тонкие слои CdSe были получены в лабораторных условиях методом химического осаждения. Раствор, используемый для получения тонких слоев, состоит из состава, приготовленного в следующем порядке: 0,5 М CdCl<sub>2</sub> × 2,5H<sub>2</sub>O, 13,4 М (25%) NH<sub>3</sub>OH, 7,4 М C<sub>6</sub>H<sub>15</sub>NO<sub>3</sub>, 0,2 М Na<sub>2</sub>SSeO<sub>3</sub>. Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> получали взаимодействием 6 граммов порошка Se с 10 граммами Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub> в растворе 100 мл дистиллированной воды в течение 7 часов при температуре 90 °С. При использовании селеносульфата натрия в качестве селенового компонента при производстве CdSe наилучшие результаты можно получить при рН. Для измерения рН раствора использовали рН-метр Aquilon рН-410. Тонкие слои CdSe были получены на стеклянных подложках. Для получения тонкого слоя стеклянные подложки погружались в химический раствор. Подложки из аморфного стекла (38×26×1 мм) выдерживали в растворе хрома в течение нескольких часов, промывали дистиллированной водой и сушили на воздухе перед введением в раствор. Стеклянные подставки ставят вертикально в стакан с раствором. Процесс химического осаждения проводился при комнатной температуре и нормальных условиях в течение 48 часов. Определено, что толщина этих слоев составляет  $h = 200, 400$  и  $500$  нм.

Изучена атомная динамика и колебательные свойства тонких слоев CdSe, полученных на стеклянных подложках. Колебательные свойства образцов исследовались методом рамановской спектроскопии. Эксперименты проводились на рамановском спектрометре Nanofinder 30 при комнатной температуре. В качестве источника возбуждения использовался Nd:YAG-лазер с длиной волны  $\lambda = 532$  нм и максимальной мощностью 10 мВт. Спектры комбинационного рассеяния были получены в диапазоне частот  $\nu = 100-800$  см<sup>-1</sup>. В указанном диапазоне частот наблюдались две моды вибрации. Установлено, что эти моды колебаний соответствуют колебаниям ковалентных связей Cd–Se. В результате интерполяции спектров функцией Гаусса установлено, что моды колебаний соответствуют частотам  $\nu_1 = 206$  см<sup>-1</sup> и  $\nu_2 = 415$  см<sup>-1</sup>. Изучен процесс фазообразования в тонких пленках селенида кадмия на основе танцевальных мод и установлено, что именно слои CdSe формируются в слоях толщиной  $h = 400$  нм.

1. Wageh S. Raman and photoluminescence study of CdSe nanoparticles capped with a bifunctional molecule // *Physica E: Low Dimensional Systems and Nanostructures*. 2007. V.39, P.8–14.
2. Potyrai R.A., Leach A.M. Selective gas nanosensors with multisize CdSe nanocrystal/polymer composite films and dynamic pattern recognition // *Applied Physics Letters*. 2006. V.88. P.134110.

## Структурные изменения атомного порядка в композите Cu-NbTi

Н.Н. Ивахненко<sup>1,2</sup>, З.А. Самойленко<sup>1</sup>, Е.И. Пушенко<sup>1</sup>, В.Я. Сычева<sup>1</sup>, М.Ю. Бадекин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк

<sup>2</sup>Российский государственный аграрный университет МСХА им. К.А. Тимирязева, Москва

<sup>3</sup>Донецкий государственный университет, Донецк

УДК: 538.9

Недавние исследования композитов Cu-NbTi основаны на теоретических расчетах и сочетают экспериментальные и теоретические подходы к исследованию, а также позволяют выявить и спрогнозировать параметры обработки, приводящие к появлению различных фаз в микроструктуре композитов различного состава [1]. Учитывая это, целью настоящей работы было исследование особенностей микроструктуры, возникающих в волокнистом композите Cu-NbTi до и после обработки интенсивной пластической деформацией (ИПД).

Для получения многослойных многокомпонентных материалов разработана технология повторяющейся пакетной прокатки гидроэкструзией. В начале каждого цикла собирается многослойный пакет, который подвергается сначала прокатке на вакуумном прокатном стане с предварительным нагревом, после чего пакет сваривается, превращаясь в монолитную заготовку, и затем прокатывается при комнатной температуре до ленты тонкого сечения. В каждом из последующих циклов пакеты собираются из уже многослойных фольг после предыдущего цикла. Таким образом, отдельная фольга претерпевает колоссальную суммарную деформацию. Исследования микроструктуры композитов Cu-NbTi до и после воздействия ИПД были выполнены с помощью фотометода в SrK $\alpha$ -излучении [2,3]. Дифракционные картины, получены от композитов Cu-NbTi, подвергнутых интенсивной пластической деформации при давлении  $P=75\text{atm}$  при комнатной температуре, скорости вращения подвижного Пуассона от 0 до 2 об/мин, с числом полных оборотов вращения от 0 до 6. Основные дифракционные линии в композите при скорости вращения 0 об/мин и числе оборотов 0 принадлежат меди. Структура данного композита крупнокристаллическая с мелкой фракцией ниобия и титана. При увеличении скорости вращения и числа полных оборотов ( $V=0,5$  об/мин,  $n=0,5$  соответственно) формируются две структурные группы в разных углах дифракционной картины, при этом наблюдается взаимопроникновение атомов меди и титана в структурные группы друг друга при сохранении дальнего атомного порядка в плоскостях меди. При дальнейшем увеличении числа оборотов до  $n=1$  при той же скорости вращения в композите происходит формирование аморфизированной фракции, проявляющейся на дифракционной картине в форме диффузного гало. Это свидетельствует об изменениях в мезоскопической наноразмерной структуре. После двух полных оборотов Пуассона  $n=2$ , в композите наблюдается дальний атомный порядок с присутствием упругих напряжений растяжения. После  $n=5$  можно наблюдать - три аморфно-кристаллические структурные группы с аморфизированными прослойками между группами меди, титана, ниобия. При дальнейшем увеличении числа оборотов до шести, состояние атомного порядка в материале релаксированное.

Таким образом, в композитах Cu-NbTi, подвергнутых деформации при давлении  $75\text{atm}$  со скоростью вращения от 0 до 2 об/мин и числом полных оборотов от 0 до 6 проявляется новое структурное состояние в виде периодических флуктуационных максимумов дифракционной картины, характерное для образования новой метастабильной наноразмерной фазы. Полученное структурное состояние композита характеризует его как высокопрочный сверхпроводник.

1. Völker B. at. all. Influence of testing orientation on mechanical properties of Ti<sub>45</sub>Nb deformed by high pressure torsion // Mater. Design. 2017. V. 114. P. 40-46.
2. Самойленко З.А. и др. Разномасштабные структурные изменения атомного порядка в интенсивно деформированном техническом алюминии // ФТТ. 2016. Т. 58. № 2. С. 217-224.
3. Самойленко З.А. и др. Самоорганизация в структуре композита Cu<sub>60</sub>Fe<sub>40</sub> при деформационно-термическом воздействии // ФТТ. 2014. Т. 56. № 6. С. 1186-1190.

## Исследование дефектной структуры кристаллов $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

*Д.А. Калганов, Д.Ю. Панов, В.А. Спиридонов, М.В. Розаева, Д.А. Бауман, А.Е. Романов*

*Университет ИТМО, Санкт-Петербург*

УДК: 538.9, 539.3, 621.315.592

Актуальность поиска новых полупроводниковых материалов стремительно возрастает с увеличением количества электронных устройств, их миниатюризацией и внедрением во многие сферы человеческой деятельности. Создание уникальных научных установок и совершенствование измерительного оборудования, а также развитие вычислительной техники, напрямую связано с решением задачи разработки быстродействующих компонентов устройств, улучшением энергоэффективности и других характеристик. На основе оксида галлия (Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) разработаны прототипы новых устройств, такие как датчики ультрафиолета и рентгеновского излучения [1, 2], выпрямительные диоды Шоттки [3] и газовые датчики [4]. Уникальные свойства этого материала: большая ширина запрещённой зоны и напряжения пробоя ставят его в первый ряд полупроводников, перспективных для использования в силовой электронике, опто- и микроэлектронике [5]. Существование собственной подложки бета-фазы оксида галлия ( $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), должно снизить технологическую сложность производства эпитаксиальных структур и сделать такие изделия в будущем широкодоступными. Работы по изготовлению подложек  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [6] требуют использования методов анализа структурного совершенства, наиболее точно характеризующих изначальный кристалл – не изменяющих дефектную структуру образцов в процессе подготовки к исследованию. Одной из методик, позволяющих провести сравнительный анализ структуры монокристаллических образцов является исследование внутреннего трения при возбуждении упругих колебаний высокой (ультразвуковой) частоты [7].

В работе рассмотрено использование метода составного пьезоэлектрического осциллятора [8] и дополнительных методов исследования для характеристики дефектной структуры образцов  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> полученных при различных технологических параметрах и обработанных для "отжига" кислородных вакансий.

Установлено влияние на внутреннее трение на частоте 100 кГц кислородных вакансий при их взаимодействии с дислокациями в образцах кристаллов  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).*

1. Xu J. et al. Gallium oxide solar-blind ultraviolet photodetectors: A review // Journal of Materials Chemistry C. 2019. V. 7. No. 29. P. 8753-8770.
2. Prasad C. V. et al. Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-based X-ray detector and scintillators: A Review // Materials Today Physics. 2023. P. 101095.
3. Green A.J. et al.  $\beta$ -Gallium oxide power electronics // APL Materials. 2022.V. 10. No. 2. P. 029201.
4. Zhai H. et al. Recent progress of Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-based gas sensors // Ceramics International. 2022. V. 48. No. 17. P. 24213-24233.
5. Tsao J.Y. et al. Ultrawide-bandgap semiconductors: research opportunities and challenges // Advanced Electronic Materials. 2018. V. 4. No. 1. P. 1600501.
6. Bauman D.A. et al. High quality  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bulk crystals, grown by edge-defined film-fed growth method: growth features, structural and thermal properties. // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2023. V. 41. P. 053203.
7. Kimball A.L., Lovell D.E. Internal friction in solids // Physical Review. 1927. V. 30. No. 6. P. 948-959.
8. Каминский В.В. и др. Исследование оксида галлия методом составного пьезоэлектрического осциллятора на частоте 100 кГц // Конденсированные среды и межфазные границы. 2023. V. 25. No. 4. P. 548-556.

# Влияние внешних воздействий на фоточувствительные комплексы $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{XY}$

*П.П. Калинина, Б.А. Захаров*

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

УДК: 544.032, 544, 548, 538.9

На химические превращения в твердом теле влияет, в первую очередь, химический состав, также значительное влияние оказывают межмолекулярные взаимодействия: с помощью воздействия на них можно управлять структурой и реакционной способностью вещества. Межмолекулярные взаимодействия чувствительны к внешним воздействиям на кристалл, например, к охлаждению и давлению, они определяют анизотропию деформации кристалла и наличие фазовых переходов. Информация о влиянии внешних воздействий на структуру позволяет понять, как изменение внешних условий влияет на протекание химической реакции [1, 2].

Одними из удобных объектов для изучения таких твердофазных превращений являются комплексы кобальта состава  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{XY}$ , в которых наблюдается механический отклик кристалла при реакции связевой фотоизомеризации  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{XY} \rightarrow [\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{ONO}]\text{XY}$ . Удобство использования таких комплексов кобальта для изучения взаимосвязи «состав - структура – свойства» заключается в том, что в большинстве из них не происходит разрушения кристалла при реакции фотоизомеризации. Это позволяет устанавливать их структуру и геометрию межмолекулярных взаимодействий методом рентгеноструктурного анализа, и сопоставлять изменения в ходе реакции фотоизомеризации и при внешних воздействиях как для реагентов, так и для продуктов.

В настоящей работе исследовались не изученные ранее комплексы  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{XY}$ ,  $\text{XY} = \text{BrNO}_3, \text{INO}_3, \text{C}_3\text{H}_4\text{O}_4, (\text{NO}_3)_2$  и  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]_2\text{I}_3\text{Cl}$ , для комплекса  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{BrNO}_3$  проводилось сравнение с изоструктурным ему  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{ClNO}_3$ , активно изучавшимся ранее [3, 4]. Целью работы является установление взаимосвязи между протеканием реакции фотоизомеризации, внешнесферным анионом, кристаллической структурой и анизотропией ее деформации при внешних воздействиях. В работе проведено сравнение структурных изменений в ходе реакции фотоизомеризации для исследуемых комплексов, а также выявлены основные структурные факторы, влияющие на протекание реакции фотоизомеризации и наличие фотомеханического отклика.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00293, <https://rscf.ru/project/24-22-00293/>*

1. Naumov P. et al. Mechanically Responsive Molecular Crystals // Chemical Reviews. 2015. V.115. N22. P. 12440-12490.
2. Zakharov B.A., Boldyreva E.V. High Pressure: A Complementary Tool for Probing Solid-State Processes // CrystEngComm. 2019. V.21. P.10-22.
3. Sidelnikov A. A. et al. The effect of thermal expansion on photoisomerisation in the crystals of  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{Cl}(\text{NO}_3)$ : different strain origins—different outcomes // CrystEngComm. 2016. T. 18. №. 38. P. 7276-7283.
4. Ahmed E. et al. Relating Excited States to the Dynamics of Macroscopic Strain in Photoresponsive Crystals // Inorganic Chemistry. 2022. T. 61. №. 8. P. 3573-3585.

## Магнитная релаксация между ферромагнитным и геликоидальным спиновыми состояниями в пленках гольмия

*С.Н. Кашин, Р.Б. Моргунов*

*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка*

УДК: 538.9, 537.63

Множественные неколлинеарные спиновые структуры и переходы между ними, инициированные полем и температурой [1], привлекают внимание благодаря необычному сосуществованию сложных спиновых фаз в Ho. Сложная магнитная структура металлического гольмия является результатом конкуренции между обменными взаимодействиями и взаимодействиями кристаллического поля [2]. Используя измерения восприимчивости в относительно высоком диапазоне частот (~ 100-1500 Hz) и измерения магнитной вязкости на более низкой частоте (~ 0,01 Hz), исследовалась динамика магнитной релаксации в пленках Ho толщиной 400 nm, претерпевающих переходы между ферромагнитным (FM) и спиральным фазовыми состояниями (Helix). Примечательно, что при переходе FM-Helix наблюдаются резкие изменения действительной и мнимой составляющих магнитной восприимчивости, происходящие при температурах 15-30 K как в отсутствие внешнего поля, так и в полях 4 kOe и -6.5 kOe. Выявлены эффекты гистерезиса в компонентах магнитной восприимчивости при циклических изменениях внешнего поля, что указывает на относительно быстрый процесс с длительностью около 10 ms, сопровождающий переход FM-Helix. Обнаружено, что процесс медленной магнитной релаксации также чувствителен к этому переходу. Кроме того, полевая зависимость магнитной вязкости заметно снижается при переходе FM-Helix. Предложенные методологии исследования процессов релаксации в материалах с многофазной спиновой структурой считаются универсально применимыми и позволяют лучше понять переходы между спиновыми состояниями в материалах, проявляющих неколлинеарную спиновую структуру.

*Работа выполнена в рамках тематической карты Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН 124013100858-3.*

1. Zvezdin A.K.. Handbook of Magnetic Materials Ed. by K. H. J. Buschow, Elsevier, Amsterdam, 1995. V. 9. p. 405.
2. Cowley R.A., Gehring P.M., Gibbs D. et al. The magnetic phase transition of a lattice-matched holmium thin film // J. Phys.: Cond. Mat. 1998. V. 10. N. 30. P. 6803.

# Применение метода межмолекулярного обмена для синтеза светоизлучающих электрохимических ячеек на основе CsPbBr<sub>2</sub>I с улучшенными характеристиками

Р. Кенесбай<sup>1</sup>, А.С. Тойкка<sup>1,2</sup>, М.Г. Баева<sup>1</sup>, Д.М. Митин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский Академический Университет им. Ж.И. Алфёрова РАН,

Санкт-Петербург

<sup>2</sup>ИТМО, Санкт-Петербург

УДК: 538.9

Свинцово-галогенидные перовскиты (СП) – полупроводниковые материалы, применяющиеся в качестве активного слоя в солнечных элементах и светоизлучающих устройствах. Среди достоинств СП выделяют простоту синтеза, а получаемые на их основе устройства отличаются высоким коэффициентом полезного действия [1]. Изменение состава галоген-аниона (CsPbBr<sub>3</sub>, CsPbBr<sub>2</sub>I, CsPbBrI<sub>2</sub> и т.п.), позволяет получить перовскиты с заданной шириной запрещенной зоны, и, следовательно, управлять спектром их оптического излучения. Однако перовскиты с галогеном смешанного состава (например, CsPb(Br<sub>x</sub>I<sub>(1-x)</sub>)<sub>3</sub>) обладают меньшим квантовым выходом фотолюминесценции и квантовой эффективностью в сравнении с перовскитами с одним типом галогена в составе, что обусловлено возникновением фазовой сегрегации, то есть образованием областей с повышенным содержанием брома и йода (CsPbBr<sub>3</sub> и CsPbI<sub>3</sub>). Распад на фазы приводит к увеличению плотности дефектных состояний и изменяет ширину запрещенной зоны, лимитируя коэффициент полезного действия структуры или внешнюю квантовую эффективность [2].

Для предотвращения фазовой сегрегации используют следующие подходы: легирование (например, Mn), управление размерами и формой кристаллов, модификация поверхности [3]. В процессе синтеза пленок перовскита из раствора во время зародышеобразования и роста кристалла молекулы типичных растворителей перовскитообразующих солей (диметилсульфоксид (ДМСО), диметилформамид (ДМФ)) образуют комплексные соединения (ДМСО-PbBr<sub>2</sub>), которые создают дефектные состояния и выступают как центры фазовой сегрегации. В данной работе для повышения стабильности и улучшения характеристик структуры на основе перовскита CsPbBr<sub>2</sub>I, легированного Mn, был применен метод межмолекулярного обмена [4]. В процессе формирования перовскитной пленки ее поверхность обрабатывалась раствором CsI-метанол. Метанол вытесняет ДМСО, разрушая комплексное соединение и позволяя образовать связь CsI и PbBr<sub>2</sub>. Таким образом можно получить большее число зародышей нужной фазы с меньшим количеством дефектов.

В исследовании были сравнены структуры на основе CsPbBr<sub>2</sub>I, полученные с использованием метода молекулярного обмена и без. Положение основной линии ФЛ образцов без обработки варьируется в диапазоне 590-630 нм, что может свидетельствовать о фотоиндуцированных фазовых превращениях. Образцы, обработанные раствором CsI-метанол, имеют более высокие значения интенсивности и квантового выхода ФЛ, при этом положение основной линии ФЛ составляет 620-630 нм, что соответствует теоретическому значению для CsPbBr<sub>2</sub>I.

*Работа выполнена при поддержке госзадания FSRM-2023-0007 «Светоизлучающие, фотодетекторные и фотопреобразовательные структуры ближнего ИК и видимого диапазонов на основе полупроводниковых наноструктур».*

1. Guo Z. et al. The high open-circuit voltage of perovskite solar cells: a review // Energy & Environmental Science. 2022.
2. Zhang H., Jin Z. Suppressed light-induced phase transition of CsPbBr<sub>2</sub>I: Strategies, progress and applications in the photovoltaic field // Journal of Semiconductors. 2021. М. 42. №. 7. С. 071901.
3. Zheng L., Hurst T., Li Z. Manganese Doped Perovskite CsPb<sub>0.9</sub>Mn<sub>0.1</sub>Br<sub>2</sub>I Solar Cells with Enhanced Stability and Reduced Toxicity // Georgia Journal of Science. 2022. V. 80. №. 2. P. 1-16.
4. Zhu W. et al. Intermolecular exchange boosts efficiency of air-stable, carbon-based all-inorganic planar CsPbIBr<sub>2</sub> perovskite solar cells to over 9% // Advanced energy materials. 2018. V. 8. №. 30. P. 1802080.



## Диагностика атомного и электронного строения ионно-лучевых пленок Cu-Si методами рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии

Е.С. Керсновский<sup>1</sup>, К.А. Барков<sup>1</sup>, И.В. Польшин<sup>1</sup>, Д.Н. Нестеров<sup>1</sup>, С.А. Ивков<sup>1</sup>, В.А. Терехов<sup>1</sup>,  
А.В. Ситников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж

УДК: 538.915

Система Cu-Si широко применяется во многих областях микроэлектроники [1]. На данный момент она представляет особый интерес в технологии производства анодов литий-ионных аккумуляторов. Кремний является перспективной заменой графита в качестве анодного материала, а встраивание наноточек меди в матрицу кремния улучшает циклические характеристики аккумуляторных батарей [2,3]. Однако получение нанокompозитов Cu-Si подразумевает использование высокоэнергетических методов, таких как ионно-лучевое распыление. При этом в пленках могут формироваться различные метастабильные соединения, поэтому исследование атомного и электронного строения пленок, полученных таким методом важны и актуальны.

В данной работе нанокompозитные пленки Cu-Si (толщиной ~ 300 нм) с различным содержанием Cu (от 15 до 68 вес. %) были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени на подложки Si (100) в вакууме при давлении  $1 \cdot 10^{-5}$  torr. Рентгенофазовый анализ проводился на дифрактометре ДРОН-4-07 ( $\text{CuK}\alpha$   $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$ ). Элементный состав исследовался на РЭМ JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250. Электронное строение валентной зоны пленок Cu-Si анализировалось по ультрамягким рентгеновским эмиссионным Si  $L_{2,3}$ -спектрам на рентгеновском спектрометре-монохроматоре РСМ-500 [4] при энергии первичных электронов 1 и 2 кВ, что соответствует глубинам анализа 10 и 35 нм соответственно.

По данным рентгеновской дифракции в пленке с низким содержанием меди Cu ~ 15 вес. % формируется только фаза низшего силицида  $\text{Cu}_5\text{Si}$ , причем, в нанокристаллическом состоянии со средним размером нанокристаллов ~ 8 нм. С увеличением содержания меди до 36 вес. % и более в пленке формируются две модификации  $\eta\text{-Cu}_3\text{Si}$  и  $\eta'\text{-Cu}_3\text{Si}$ , а также часть меди окисляется, формируя оксид  $\text{Cu}_2\text{O}$ , при этом рефлексы от фазы  $\text{Cu}_5\text{Si}$  исчезают.

Результаты анализа фазового состава плёнок Cu-Si по рентгеновским эмиссионным Si  $L_{2,3}$ -спектрам показывают, что в пленке с низким содержанием меди 15 вес. % формируется фаза аморфного кремния ( $a\text{-Si}$ ). С увеличением содержания меди до 36 вес. % характер спектра меняется, формируется интенсивный максимум в области значений энергий 89,5 эВ, характерный силицидам металлов, а высокая плотность электронных состояний в области 92 эВ свидетельствует о присутствии некоторого количества фазы аморфного кремния в данной плёнке. Далее с ростом содержания меди до 68 вес. % спектр значительно меняется, формируя два высокоинтенсивных максимума при 89,5 и 95 эВ. Подобная форма спектра обуславливается расщеплением  $s$ - или  $p$ -состояний в валентной зоне кремния в результате резонансного взаимодействия с  $d$ -электронами меди.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Gierlotka W., Haque M. A. On the binary (Cu+ Si) system: Thermodynamic modelling of the phase diagram and atomic mobility in face centred cubic phase // The Journal of Chemical Thermodynamics. 2013. V. 57. P. 32-38.
2. H.-J. Ahn et al. Formation and characterization of Cu-Si nanocomposite electrodes for rechargeable Li batteries // Journal of Power Sources. 2006. V.163. P.211-214.
3. Cho J. Porous Si anode materials for lithium rechargeable batteries // J. Mater. Chem. 2010. V.20, P. 4009-4014
4. Зимкина Т.М., Фомичев В.А. Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия (Изд-во Ленинградского университета) 1971. 132 с.

## Исследование люминесценции углеродных наночастиц в широком диапазоне температур

***В.В. Киселёв, В.Б. Пикулев, С.В. Логинова***

*ФГБОУ ВО «Петрозаводский государственный университет», Петрозаводск*

УДК:538.95

Углеродные наночастицы (УНЧ) являются представителями класса наноразмерных материалов, которые находят разнообразное практическое применение как экологичный и дешёвый наноматериал и при этом обладают специфическими физико-химическими свойствами, отличными от свойств фуллеренов и углеродных нанотрубок [1]. Морфология УНЧ отличается разнообразием, атомная структура близка к турбостратной либо аморфной. Характерным свойством УНЧ является их люминесценция в видимой области спектра, природа которой до настоящего времени является предметом дискуссий. Интенсивность и положение пика фотолюминесценции (ФЛ) УНЧ существенно зависит от условий окружающей среды и от энергии возбуждающего излучения [2]. В нашей работе исследуются спектры ФЛ для высаженных на кремниевую подложку УНЧ в температурном диапазоне от 15 до 500 К (в условиях вакуума) и от 300 до 400 К (в атмосфере).

Использованный нами способ приготовления УНЧ состоял в электролизе в течение 4 часов смеси этилового спирта (70 мл), воды (5 мл) и NaOH (0.6 г) при фиксированном значении тока (150 мА) с применением платиновых электродов. После фильтрации смеси и замещении спирта дистиллированной водой получена водная суспензия УНЧ. Из суспензии наночастицы осаждались на полированную кремниевую подложку путём капельного испарения. Чистота образцов контролировалась с помощью ИК-спектрометра ФТ-801. Измерения ФЛ проводились с помощью спектрографа SOL SL100M с охлаждаемым ПЗС-детектором. В качестве источника возбуждения использовался непрерывный 15 мВт He-Cd лазер с длиной волны 325 нм. Для охлаждения образцов применялась гелиевая микрокриогенная система с криостатом замкнутого цикла MСMP-110Н 3.2/20. Для нагрева образцов применён керамический нагревательный элемент с вольфрамовой спиралью. Образцы помещались в вакуумную камеру с двуступенчатой откачкой.

Спектр ФЛ полученных нами образцов при комнатной температуре в условиях атмосферы представлял собой широкий пик с максимумом при 520 нм (2.39 эВ) и с полушириной ~ 180 нм. Вакуумирование почти в три раза уменьшило интенсивность ФЛ, не приводя к сдвигу максимума пика. При охлаждении до ~150 К наблюдалось постепенное увеличение интенсивности свечения в ~ 4 раза, дальнейшее уменьшение температуры до 15 К привело к незначительному уменьшению интенсивности. Пик ФЛ при 150 К сместился к 500 нм, где и оставался вплоть до 15 К, полуширина пика не изменилась. При обратном повышении температуры до комнатной было установлено, что все описанные выше явления имеют обратимый характер. Нагрев УНЧ в условиях вакуума до 500 К приводит к обратимому тушению ФЛ. Нагрев образца в течение 3 мин. при 400 К в атмосфере приводит к полному необратимому исчезновению ФЛ.

Такое поведение ФЛ, на наш взгляд, характерно для внутрицентральной люминесценции, причём эти центры логично считать локализованными на поверхности УНЧ. Изменение поведения ФЛ образца при температурах ниже 150 К можно связать с геттерированием молекул остаточных газов на охлаждённой поверхности УНЧ. Нагрев в условиях атмосферы полностью меняет поверхностную пассивацию УНЧ. Таким образом, нашими экспериментами подтверждается доминирующее влияние состояния поверхности УНЧ на люминесцентные свойства наночастиц.

1. Hong G. et al. Carbon Nanomaterials for Biological Imaging and Nanomedicinal Therapy // Chemical Reviews. 2015. V. 115. No. 19. P. 10816–10906.
2. Su Z. C. et al. Understanding and manipulating luminescence in carbon nanodots // Carbon. 2018. V.126. P. 58–64.

## Гибкий пиксельно-матричный электрод на основе одностенных углеродных нанотрубок для гибкой электроники

Д.Е. Колесина<sup>1,2</sup>, Ф.М. Кочетков<sup>1</sup>, А.А. Воробьев<sup>1</sup>, К.Н. Новикова<sup>1</sup>, А.С. Голтаев<sup>1</sup>,  
В.В. Неплох<sup>1</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>СПбАУ РАН им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

УДК: 538. 911

Одним из современных направлений исследований в области физики полупроводников является разработка и исследование гибкой электроники на основе нитевидных нанокристаллов (ННК) АЗБ5. ННК могут быть инкапсулированы в полимерную матрицу полидиметилсилоксана (ПДМС), образуя мембрану ПДМС/ННК, к которой может быть сформирован растяжимый электрод. В качестве растяжимого электрода наиболее эффективными являются тонкие слои одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), нанесенные на пленки из ПДМС. ОУНТ сохраняют высокие эксплуатационные характеристики при упругой деформации, а также обладают стабильным электрическим контактом к ННК. Для сохранения электропроводности и оптической прозрачности при растяжении наносится рисунок методом оптической литографии [1].

В работе рассматривается технология изготовления растяжимого электрода на основе ПДМС/ОУНТ. Электроды были созданы методом оптической литографии на ОУНТ с использованием жертвенного слоя. Формирование рисунка осуществлялось сухим плазменным травлением. Для создания растяжимого устройства массив АЗБ5 ННК был инкапсулирован в ПДМС методом гравитационной накрутки и отделен от ростовой подложки. С устройством проведены тесты на растяжение и измерены вольтамперные характеристики.

*Работа выполнена при поддержке министерства образования и науки в рамках гранта FSRM-2023-0007.*

1. Mukhangali S. et al. Elastic single-walled carbon nanotubes pixel matrix electrodes for flexible optoelectronics //Applied Physics Letters. 2022. Т. 121. №. 24.

## Магнитокалорический эффект в двухфазных микропроводах PrDyFeCoB

*А.О. Колмаков, Е.В. Дворецкая, Р.Б. Моргунов*

*ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка*

УДК: 537.6

Магнитокалорический эффект (МКЭ) заключается в том, что при помещении образца в магнитное поле в нем может происходить фазовый переход, изменяющий упорядоченность магнитных моментов и соответствующую часть магнитной энтропии, что в перспективе является простым способом достижения экологически чистого энергосберегающего охлаждения [1].

В аморфно-кристаллических микропроводах PrDyFeCoB, полученных сверхбыстрым охлаждением расплава, обнаружен отрицательный МКЭ при 200–250 К (с выделением тепла при включении магнитного поля), а также положительный МКЭ в температурной области 300–340 К (с поглощением тепла при включении магнитного поля). Установлено, что в исследованном температурном диапазоне отсутствуют фазовые переходы первого рода, что свидетельствует о том, что оба обнаруженных эффекта связаны с изменением магнитной части энтропии. Переход при 200–250 К обусловлен наличием метамагнитных состояний, индуцированных магнитным полем в спин-стекольном состоянии аморфной части сплава PrDyFeCoB, и с их переходом в ферримагнитное состояние. Переход при 300–340 К является спин-переориентационным, и он происходит в кристаллических включениях, идентифицированных в аморфной матрице. Близость обнаруженных МКЭ к комнатной температуре и высокая одно-ионная анизотропия редкоземельных ионов в сплаве позволяют надеяться на возможные практические применения обнаруженных эффектов [2].

*Работа выполнена в рамках тематической карты ФИЦ ПХФ и МХ РАН FFSG-2024-0009.*

1. Hai-Ying Ch. et al. Magnetostrictions and Magnetic Properties of Nd-Fe-B and SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>// Chin. Phys. Lett. 2011. V. 28. No. 7. P. 077501.
2. Dvoreckaia E.V. et al. Magnetocaloric effect in amorphous-crystalline microcircuits PrDyFeCoB // Phys. Solid State. 2022. V. 64. No. 8. P. 988–997.

## Влияние импульсного магнитного поля и температуры старения на фазообразование алюминиевого сплава АК9

*А.Д. Комлев, Ю.В. Осинская, С.Г. Магамедова, Д.Р. Нуретдинова*

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева,  
Самара*

УДК: 538.9, 621.785.78:537.636

Из ранее проведенных исследований [1] известно, что наложение импульсного магнитного поля (ИМП) практически всегда приводит к увеличению пластических свойств алюминиевого сплава АК9, наблюдается положительный магнитопластический эффект (МПЭ) [2–4]. Следовательно, целесообразным является дальнейшее исследование влияния ИМП на процесс старения алюминиевого сплава АК9. В связи с этим, целью данной работы является комплексное экспериментальное исследование влияния ИМП амплитудой напряженности 557.2 кА/м на микроструктуру, микротвердость и параметры тонкой структуры состаренного алюминиевого сплава АК9 длительностью 4 ч и температурах старения от 120 до 175 °С.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

- металлографический анализ показал, что наложение ИМП на старение сплава приводит к уменьшению площади участков, соответствующих чистому кремнию в 1,7 раза по сравнению со случаем старения без наложения поля.
- установлено, что наложение ИМП приводит к уменьшению микротвердости до 18 %, при этом пластические свойства сплава возрастают. Наблюдается положительный МПЭ. При температуре отжига 175 °С выявлен максимум микротвердости. Увеличение температуры старения от 175 °С до 350 °С приводит к более быстрому завершению процесса старения и перестариванию, в следствии чего микротвердость уменьшается.
- температурные зависимости параметров тонкой структуры коррелируют с температурными зависимостями измерения микротвёрдости: максимальному значению микротвёрдости сплава, состаренного без наложения ИМП, соответствуют минимальные значения среднего размера блоков когерентного рассеяния и максимальное значение плотности дислокаций и величины относительной микродеформации.
- наложение ИМП на старение при всех исследованных температурах старения приводит к увеличению среднего размера блоков когерентного рассеяния и к уменьшению плотности дислокаций и величины относительной микродеформации по сравнению со старением без наложения поля. Этот результат указывает о том, что структура сплава становится более однородной и менее искажённой

1. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. Влияние частоты импульсного магнитного поля на старение алюминиевого сплава Al–Si–Cu–Fe // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Т. 85. № 7. С. 1025-1030.
2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. Магнитопластический эффект: основные свойства и физические механизмы // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 5. С. 838–867.
3. Головин Ю.И. Магнитопластичность твердых тел // ФТТ. 2004. Т. 46. № 5. С. 769 – 803.
4. Моргунов Р.Б. Спиновая микромеханика в физике пластичности // УФН. 2004. Т. 174. №2. С. 131–153.

## К вопросу о кристаллической и надмолекулярной структуре бактериальной целлюлозы, синтезированной в тяжёлой воде

Г.П. Копица<sup>1,2</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>1,3</sup>, А.А. Кульминская<sup>1</sup>, Е.В. Журишкина<sup>1</sup>, Л.А. Иванова<sup>1</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>4</sup>, Н.В. Цвигун<sup>5</sup>, А.Е. Соколов<sup>2</sup>, А.К. Хрипунов<sup>3</sup>, С.Ю. Котцов<sup>6</sup>, А.Е. Баранчиков<sup>6</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Институт химии силикатов им. Б.П. Гребенникова НИИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург

<sup>3</sup>Институт высокомолекулярных соединений НИИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург

<sup>4</sup>Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ им. И.М. Франка, Дубна

<sup>5</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>6</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

УДК:538.9, 661.728

Целлюлоза является одним из наиболее распространенных природных биополимеров на Земле. Известно, что она может быть получена из разных эволюционных источников: её синтезируют растения, грибы, водоросли, некоторые виды животных, например, принадлежащие подтипу Tunicata, или бактерий (например, *Glucanoacetobacter xylinum*). Причем биосинтез целлюлозы, осуществляемый различными организмами, приводит к морфологическим структурам, существенно отличающимся по надмолекулярной организации, которая, в первую очередь, и определяет физико-химические свойства полученных биополимеров.

Биосинтез и формирование надмолекулярной структуры (НМС) бактериальной целлюлозы (БЦ) происходят в водной среде. НМС возникает в результате самосборки макромолекул целлюлозы за счет сетки водородных связей с участием гидроксильных целлюлозных цепей, собирающихся в микрофибриллы. Из последних образуются наноленты БЦ. Получение информации о путях самосборки полимерных цепей в наноленты, а также формировании кристаллической и аморфной фаз БЦ возможно через исследование доступности гидроксильных групп водородному обмену с молекулами воды.

В настоящей работе кристаллическая и надмолекулярная структура бактериальной целлюлозы, полученной биосинтезом в H<sub>2</sub>O и D<sub>2</sub>O с помощью штамма *Glucanoacetobacter hansenii* ATCC 1082 (Лаборатория биотехнологий, ОМРБ, НИИЦ КИ - ПИЯФ), исследована методами ИК-спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, рентгеновской и нейтронной дифракции, СЭМ, низкотемпературной адсорбции азота, а также малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей.

Комплексный анализ полученных данных показал, что структура БЦ, синтезированной в тяжелой воде, существенно отличается от той, которая получается в обычной воде. Обнаружена не только замена связей О-Н на О-D, но и появление связей С-D. Установлено, что, при сохранении триклинной сингонии (пространственная группа P1), замена среды синтеза приводит к заметному уменьшению ( $\approx 2\%$ ) параметров  $a$  и  $b$  кристаллической решетки БЦ. Также выявлено, что замена H<sub>2</sub>O на D<sub>2</sub>O приводит не только к существенным изменениям характерных размеров нанолент БЦ, но и влияет на пространственную организацию полимерной сети в целом.

## Радиационное воздействие на характеристики эпитаксиальных структур на основе нитрида галлия

Д.Е. Костомаха

Воронежский государственный университет, Воронеж

УДК: 539.16.08, 538.9

Нитрид галлиевые (GaN) структуры давно стали интересовать как исследователей, так и исполнителей полупроводниковых приборов. Гетероструктуры на основе GaN обеспечивают электронным приборам на их основе оптические, мощностные и частотные характеристики, позволяющие применять их в разных областях полупроводниковой электроники. Так же GaN структуры показали, что они более стойкие к воздействию ионизирующего и нейтронного излучения, в отличии от структур на основе кремния (6). В данной работе проводится исследование следующих образцов, представленные в таблице 1.

Таблица 1. Исследуемые образцы.

№	Подложка	Буферный слой	Основной слой	T °C, осаждения	Толщина h
1	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	AlN – h~150 nm	GaN	1050	~ 5 mkm
2	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (11-20), Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (10-12)	AlN – h~300 nm	GaN	1034	~3 -5 mkm
3	SiC/Si (111) -4 <sup>0</sup>	-	AlGaN	1033	~ 6 mkm
4	AlN/Si(111)	-	AlGaN	1033	~ 6 mkm
5	AlGaN/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (11-20)	-	AlN	982	~ 5 mkm
6	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	AlN/AlGaN – h~2 mkm	GaN	987	~ 1 mkm
7	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (11-20)	AlN – h~200 nm	AlGaN	1036	~5 mkm
8	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (11-20) Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (10-12)	AlN – h~200 nm	GaN	1034	~ 4 mkm

Проведение испытаний электронных изделий необходимо для контроля их качества, так и для прогнозирования надежности. Как показывают эксперименты с разными видами излучения, GaN структуры могут работать в более тяжелых условиях (1,3,4). Задача данной работы — это увидеть фундаментальные закономерности изменений в эпитаксиальных структурах GaN под воздействием тяжелых заряженных частиц и протонов, влияние больших доз облучения рентгеновским и гамма-излучением, так же это влияние потоков нейтронного облучения.

Первый этап: проведение нейтронного облучения образцов, получение вольтамперных характеристик (ВАХ) и зависимости ЭДС Холла в полупроводниках от концентрации и подвижности носителей заряда.

Второй этап: облучение образцов тяжелыми заряженными частицами, получения ВАХ и зависимости ЭДС Холла в полупроводниках от концентрации и подвижности носителей заряда, структурный анализ.

Третий этап: облучение образцов рентгеновским, гамма – излучением, получения ВАХ характеристик и зависимости ЭДС Холла в полупроводниках от концентрации и подвижности носителей заряда, получение зависимости времени релаксации от поглощенной дозы.

1. Hazdra P. et al., Radiation resistance of wide-bandgap semiconductor power transistors // Phys. Status Solodi A. 2016. P.1-8.
2. Pearton S. J. et al. Review—Ionizing Radiation Damage Effects on GaN Devices // ECS J. Solid State Sci. Technol. 2016. V.5. N2. Q35.
3. Polyakov A.Y. Radiation effects in GaN materials and devices // Journal of Materials Chemistry C. 2013. V.1. N.5. P.877-887.
4. M. P. Khanal et al., Impact of 100 keV proton irradiation on electronic and optical properties of AlGaN/GaN high electron mobility transistors (HEMTs) // J. Appl. Phys. 2018. V.124, P. 215702.

## Влияние режимов осаждения и параметров тока на состав и структуру плёночных структур на основе сплава NiFe

*А.Н. Котельникова<sup>1</sup>, Т.И. Зубарь<sup>1</sup>, М.И. Панасюк<sup>1</sup>, Т.И. Усович<sup>1</sup>, А.А. Бондарук<sup>1</sup>,  
А.А. Роткович<sup>1</sup>, В.А. Фёдкин<sup>1</sup>, О.Д. Канафьев<sup>1</sup>, С.В. Труханов<sup>1,2</sup>, А.В. Труханов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению", Минск

<sup>2</sup>НИТУ МИСис, Москва

УДК: 538.955, 54.057, 54-165.2, 544.654.2

В данной работе плёнки сплава NiFe были получены методом электроосаждения из электролита следующего состава. NiSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O – 210 г/л, NiCl<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O – 20 г/л, FeSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O – 15 г/л, H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> – 30 г/л, MgSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O – 60 г/л, KNaC<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>6</sub>·4H<sub>2</sub>O (сегнетова соль) – 30 г/л, C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>6</sub> (аскорбиновая кислота) – 2 г/л, C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>3</sub>S (сахарин) – 2 г/л. В качестве подложек для электроосаждения была использована полированная сталь. Температура электролита поддерживалась на уровне 35 °С, pH составлял 2,2. Плотность тока катодных и анодных импульсов составляла 25 мА/см<sup>2</sup>.

Плёнки NiFe синтезировались в импульсно-реверсном режиме электроосаждения. Параметры электроосаждения представлены в таблице 1.

Таблица 1 — Технологические параметры получения плёнок NiFe

Образец	Длительность			Толщина плёнки, мкм
	Катодного импульса, мс	Паузы, мс	Анодного импульса, мс	
P5	100	95	5	25,1
P10	100	90	10	25,0
P25	100	75	25	25,0

По мере увеличения длительности анодного импульса с 5 до 10 и затем до 25 мс и одновременном сокращении длительности паузы с 95 до 90 и далее до 75 мс наблюдается уменьшение содержания железа в плёнке сплава NiFe с 27,5 до 25,9 и затем до 17,4 ат.%. Это связано с двумя факторами. Во-первых, железо имеет более низкий стандартный потенциал (-0,44 В), чем никель (-0,24 В), что обуславливает большую скорость растворения железа чем никеля в ходе анодных импульсов тока. В то же время анодные импульсы и паузы существенно снижают аномальный характер осаждения и содержание железа в сплаве за счёт вымывания гидроокисей железа из приэлектродного слоя электролита в его толщу.

Исследование кристаллической структуры плёнок методом рентгеноструктурного анализа показало, что все плёнки сформированы из твёрдого раствора железа в никеле (поскольку на дифрактограммах присутствовали лишь пики, соответствующие атомным плоскостям Ni). Помимо этого, было замечено увеличение отношения интегральных плоскостей Ni (200) к (111) по мере увеличения длительности анодного импульса с 95 до 147 и затем до 211 %. Это свидетельствует об преимущественном направлении роста плёнок. Размер областей когерентного рассеяния увеличивается с 6 до 7 и далее до 10 нм для образцов P5, P10 и P25 соответственно.

Микроструктура поверхности плёнок NiFe была исследована методом атомно-силовой микроскопии. Анализ АСМ снимков показал, что с увеличением длительности анодного импульса  $t_A$  с 5 до 10 мс среднеквадратичная  $R_q$  шероховатость поверхности увеличивается с 15,1 до 36,7 нм, а при дальнейшем увеличении  $t_A$  до 25 мс  $R_q$  снижается до 27,9 нм. С увеличением длительности анодного импульса от 5 до 10 мс уменьшается доля мелких ( $d$  до 0,8 мкм) зерен и значительно увеличивается доля крупных зерен с  $d$  от 1,6 до 2,0 мкм. При максимальной длительности анодного импульса 25 мс наблюдается уменьшение доли площади крупных зерен ( $d$  от 1,6 до 2,0 мкм) и одновременное увеличение доли площади мелких и средних зерен (до 1,4 мкм).

Полученные результаты открывают широкие перспективы для контролируемого получения пленок NiFe с уникальными магнитными свойствами.

*Исследование выполнено в рамках программы «Приоритет 2030» (НИТУ МИСис, грант К6-2022-043).*



## Высоконаправленный вывод фотолюминесценции в гибридной наноструктуре на основе монослоя MoS<sub>2</sub> и нитевидного нанокристалла GaP

А. Кузнецов<sup>1</sup>, М.А. Аникина<sup>1</sup>, А.Н. Токсумаков<sup>1</sup>, А.Н. Абрамов<sup>2</sup>, В.В. Федоров<sup>3</sup>,  
Д.А. Казарян<sup>1</sup>, А.Д. Богдашов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт, Долгопрудный

<sup>2</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН, Санкт-Петербург

УДК:535.3, 535.4, 538.975

Основным объектом исследования в данной работе являлась гибридная система на основе монослоя дисульфида молибдена (MoS<sub>2</sub>) и одиночного нитевидного нанокристалла (ННК) фосфида галлия (GaP). GaP является непрямозонным полупроводником (2.26 эВ при 300 К) с показателем преломления >3 в видимом и ближнем ИК диапазоне и высокими коэффициентами нелинейного оптического преобразования, что делает его перспективным материалом для создания оптических волноводов и резонаторов [1]. Класс новых ван-дер Ваальсовых материалов – дихалькогениды переходных металлов обладают набором особых физических свойств. Изменение толщины кристаллов MoS<sub>2</sub> до монослоев приводит к изменению структуры энергетических зон. Монослои являются прямозонными и обладают эффективным откликом фотолюминесценции (ФЛ) в видимом и ближнем ИК диапазонах [2]. Гибридная наноструктура получена по стандартной «drop-cast» технологии: 10 мкл суспензии изопропанола с ННК GaP, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии, наносилась на подложку Si/SiO<sub>2</sub> с монослоями MoS<sub>2</sub>, предварительно нанесенных методом сухого переноса. Для получения необходимой ориентации ННК GaP на монослое он позиционировался с помощью зонда АСМ. Исследование оптических свойств проводилось методами микроспектроскопии комбинационного рассеяния (КР) и фотолюминесценции. С помощью картирования отклика КРС было определено, что MoS<sub>2</sub> представляет собой монослой, а ННК GaP имеет структуру сфалерита с небольшим количеством вюрцитной фазы. Микроспектроскопия ФЛ демонстрирует наличие ФЛ от монослоя MoS<sub>2</sub>, а также ее усиление в окрестности кончика ННК. Спектроскопия ФЛ с разнесенными в пространстве сбором и возбуждением продемонстрировала, что ФЛ с монослоя активно выводится через ННК, при этом, спектрально модулируется, что говорит о том, что ННК выступает как резонатор Фабри-Перо. Кроме того, при возбуждении конца, находящегося не на монослое в конфокальной геометрии, обнаруживается более слабый, спектрально модулированный сигнал ФЛ, что демонстрирует возможность «удаленного» возбуждения ФЛ на монослое через ННК.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (проект FSMG-2021-0005, соглашение 075-03-2023-106 от 13.01.2023), Минобрнауки (проект FSRM-2023-0009) и Российского научного фонда (Проект 22-19-00558).*

- 1.Schneider K. et al. Optomechanics with one-dimensional gallium phosphide photonic crystal cavities // Optica. 2019. V. 6. No. 5. P. 577-584.
- 2.Ermolaev G. A. et al. Broadband optical properties of monolayer and bulk MoS<sub>2</sub> // Materials and Applications. 2020. V. 4. No. 1. P. 21.

## Влияние состава на атомную структуру образцов $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$

*А.С. Лавренко<sup>1</sup>, Н.Н. Ивахненко<sup>2,3</sup>, З.А. Самойленко<sup>2</sup>, Е.И. Пушенко<sup>2</sup>, В.Я. Сычева<sup>2</sup>,  
М.Ю. Бадекин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Донецкий государственный университет, Донецк

<sup>2</sup>Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк

<sup>3</sup>Российский государственный аграрный университет МСХА им. К.А. Тимирязева, Москва

УДК: 538.9

Одним из актуальных исследований в физике твердого тела не перестает быть изучение многофункциональных материалов. Среди них особый интерес представляют манганит-лантановые перовскиты, легированные висмутом, благодаря своей богатой физике и потрясающим свойствам магнитосопротивления [1]. Они являются потенциальными материалами для применения их в магнитных считывающих головках, магнитно-резистивной памяти и других новых устройствах спинтроники.

Керамические образцы  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$  были получены методом быстрого жидкого спекания. Для дегидратации исходные порошки оксидов металлов, взятых с точностью до 0,0002г прокаливали при температуре 180°C в течение 4h. Смесь исходных порошков в стехиометрическом соотношении измельчали в агатовой ступке, просеивали через сито и прессовали в таблетки диаметром 8 мм под давлением 200МПа. Полученные прессовки спекали на воздухе при температуре 880°C в течение 4h в режиме быстрого нагрева и охлаждения. Нагрев проводили со скоростью 100°C/10s в температурном интервале от комнатной температуры до 770°C и со скоростью 10°/мин в интервале от 770°C до 880°C. Охлаждали образцы от 880°C до комнатной температуры со скоростью 100°C/10s.

Для анализа атомной структуры образцов использовали метод рентгеновской дифракции с помощью регистрации дифракционных картин на рентгеновскую пленку с последующим микрофотометрированием дебаеграмм, что позволило увеличить чувствительность анализа образцов с повышенной внутренней дефектностью кристаллографической многокомпонентной атомной структуры [2, 3].

Полученные дифракционные картины от образцов представляют собой суперпозицию рассеяния рентгеновских лучей от атомных группировок с различным масштабом упорядочения.

В результате исследования изменения концентрации лантана в составе образцов  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$  при  $x=0; 0,1; 0,3; 0,5$  были установлены следующие закономерности:

- 1) В структуре керамических материалов содержатся разновалентные ионы марганца и висмута, анионные и катионные вакансии, наноструктурные кластеры;
- 2) Обнаружено большое количество и разнообразие флуктуационных максимумов (гало), что свидетельствует о высокой степени размерной и фазовой неоднородности в данных структурных группах;
- 3) Во всех образцах наблюдаются изменение формы и соотношения интенсивностей гало, что свидетельствует о гибком характере эволюции структуры при изменении химического состава;
- 4) Наблюдающееся в основании диффузных линий – гало, полученное в результате когерентного рассеяния рентгеновских лучей от группировок атомов, свидетельствует об аморфизации структуры в данных образцах.

1. Daivajna M.D. and al. Electrical, thermal and magnetic studies on Bi-substituted LSMO manganites // Journal of magnetism and Magnetic materials. 2015. Т. 388. С. 90-95.

2. Самойленко З.А. и др. Аномальное поведение кристаллографических и электронных состояний ферритов  $\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Fe}_2\text{O}_4$  // Письма в Журнал технической физики. 2003. Т. 29. № 15. С. 80-86.

3. Самойленко, З.А. и др. Локальная аморфизация атомной структуры в ферритах  $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$  // Письма в Журнал технической физики. 2007. Т. 33. № 7. С. 8-15.

## Метод захвата хромосомных конфигураций (Hi-C) для исследования структуры хроматина в ядре биологической клетки

Т.А. Лагунов

ИЦиГ СО РАН, Новосибирск

Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск

УДК: 577.323.57, 538.9

Живая клетка – биологический объект, состоящий из смеси огромного количества различных биополимеров, концентрированных в небольшом объёме. Изучение физических свойств и законов, действующих в живой клетке позволяет решать различные проблемы фундаментальной биологии а также создавать инструменты для экспериментальной биологии. Изучение укладки ДНК в ядре клетки является одним из центральных вопросов фундаментальной биологии, ведь синтез молекул РНК по матрице ДНК связан с декомпактизацией синтезируемых генов, а регулирующая этот синтез последовательность ДНК (энхансер) может находиться на большом геномном расстоянии от регулируемого гена.

Для изучения закономерностей трёхмерной укладки ДНК в ядре клетки широко используется метод захвата хромосомных конфигураций (Hi-C) [1], позволяющий увидеть какой участок хроматина с каким контактирует. Собирая статистику контактов по большому числу клеток можно выявлять определённые закономерности в укладке хроматина, такие как: домены (образованные протягиванием петли специальными белками когезинами), компартменты, участки возле ламины (оболочки ядра), спирализация хромосом во время компактизации перед делением клетки и другие явления. Однако не менее интересной остаётся укладка хроматина на масштабах между характерными масштабами приведённых закономерностей, а именно случайность конформации из прочих возможных, которая отражается во фрактальной размерности конформации хроматина.

Использование физических моделей полимеров [2] и измерения параметров хроматина позволяют лучше интерпретировать результаты Hi-C эксперимента, а также предсказывать к каким изменениям приведут различные биологические модификации хроматина. Поразительно, что при огромном количестве одновременно взаимодействующих факторов и разнообразных биологических молекул, даже относительно простые модели, такие как гауссов клубок или свободно-сочленённая цепь с исключённым объёмом уже дают хорошую интерпретацию статистического ансамбля конформаций хроматина в большом количестве клеток.

Доклад представляет собой обзор на метод Hi-C, используемые модели статфизики полимеров для интерпретации результатов, а также обзор на основные уже полученные результаты в области укладки хроматина в ядре живой клетки.

*Работа выполнена при поддержке РФФ 22-14-00247.*

1. Belton J.-M. et al. Hi-C: A comprehensive technique to capture the conformation of genomes // *Methods*. 2012. Т. 58. № 3. С. 268–276.

2. Гросберг А. Ю., Алексей Романович Хохлов. Статистическая физика макромолекул. Москва: Наука, 1989. 344 с.

## Ориентационная зависимость энергии взаимодействия Казимира-Полдера ян-теллеровской молекулы $\text{Li}_3$ с гиротропной проводящей поверхностью

*А.Д. Ляхов<sup>1</sup>, А.С. Овчинников<sup>1,2</sup>, И.Г. Бострем<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уро РАН, Екатеринбург

УДК: 53.043, 538.955, 537.226.1, 537.226.5, 537.9, 537.621.5, 539.194

В недавней статье [1] была предложена схема снятия вращательной симметрии системы, состоящей из двух крамеровских дублетов. Основную роль в данной схеме играет взаимодействие Казимира-Полдера между системой и проводящей гиротропной поверхностью.

Нами предложена реальная система, ян-теллеровская молекула  $\text{Li}_3$ , в которой удается выделить два нижайших двукратно вырожденных уровня ротавибронного спектра.

В рамках модели предполагается, что ян-теллеровская молекула находится в вакууме, вблизи поверхности металла, на расстоянии от поверхности большем, чем размер самой молекулы. Диэлектрическая проницаемость и диадная функция Грина электрического поля гиротропной металлической среды, которая входит в выражение для энергии взаимодействия молекулы с поверхностью, рассчитывается с помощью модели заряженной плазмы, помещенной во внешнее магнитное поле.

Были вычислены энергии взаимодействия Казимира-Полдера для двух ориентаций молекулы относительно поверхности. Вертикальная ориентация соответствует случаю перпендикулярных плоскостей молекулы и поверхности, горизонтальная ориентация – параллельных плоскостей.

При этом оказывается, что наиболее выгодной с точки зрения энергии является вертикальная конфигурация [2]. Более того, пространственная переориентация молекулы сопровождается снятием крамеровского вырождения основного состояния ротавибронного спектра, что приводит к появлению ненулевого орбитального магнитного момента, генерируемого вращением ядер молекулы, и сопутствующей аккумуляцией топологической фазы Берри.

1. Silveirinha M. G. Spontaneous rotational symmetry breaking in a Kramers two-level system // Phys. Rev. B. 2019. Vol. 100. P. 165146.

2. Lyakhov A. D., Ovchinnikov A. S., Bostrem I. G., and Kishine J. Rotational symmetry breaking of nuclear motion in the Jahn-Teller  $X_3$  molecule due to Casimir-Polder interaction // Phys. Rev. B. 2023. Vol. 108. P. 115429.

## **Влияние амплитуды напряженности импульсного магнитного поля на параметры магнитопластического эффекта состаренного алюминиевого сплава АК9**

***С.Г. Магамедова, Ю.В. Осинская, Р.Р. Уразов***

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара*

УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

Методами металлографического анализа, измерения микротвердости и рентгеноструктурного анализа выполнено экспериментальное исследование влияния импульсного магнитного поля (ИМП) амплитудой напряженности от 1 до 7 кЭ, частотой импульсов 2 Гц, времени старения 4 ч и температурой 175 °С на старение алюминиевого сплава АК9.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

1. Метод металлографического анализа показал, что наложение ИМП на старение сплава АК9 приводит к увеличению площади участков, соответствующих кремнию до 48 % от общей поверхности металлографического шлифа.

2. Установлено, что наложение ИМП приводит к снижению микротвердости до 13 %, наряду с этим пластические свойства сплава возрастают. Наблюдается положительный МПЭ. Следует заметить, что ход графика микротвердости с повышением амплитуды напряженности ИМП практически не изменяется.

3. Выявлена зависимость параметров тонкой структуры от амплитуды напряженности ИМП: величина среднего размера блоков когерентного рассеяния в ИМП всегда больше, чем в его отсутствии. При этом значения величин относительных микродеформаций и плотности дислокаций при наложении ИМП всегда ниже, чем значения, полученные без него.

## Временная зависимость микротвердости и микроструктуры алюминиевого сплава В95пч, состаренного в постоянном магнитном поле

С.Р. Макеев, Ю.В. Осинская

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара*

УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

Эффект влияния магнитного поля на термодинамические, кинетические свойства и микроструктуру ферромагнитных материалов известен уже достаточно давно [1]. Однако, неожиданным является то, что слабые магнитные поля могут влиять на микро- и макроскопические свойства различных материалов, в частности, под действием магнитных полей изменяются микротвердость, внутреннее трение, предел прочности и другие макроскопические свойства в ионных кристаллах [2], полупроводниках, металлах [3], молекулярных кристаллах, полимерах и т.д. Наблюдается магнитоэластический эффект (МПЭ) [2]. До сих пор не ясна физическая природа данного эффекта в металлических сплавах. Поэтому актуальной и практически значимой задачей является изучение влияния постоянного магнитного поля (ПМП) на свойства и структуру диа- и парамагнитных материалов.

В связи с этим, целью данной работы является комплексное экспериментальное исследование влияния ПМП на микроструктуру и микротвердость состаренного алюминиевого сплава В95пч. Образцы в виде куба с ребром  $\sim 10$  мм вырезали из промышленного листа алюминиевого технического сплава В95пч, основными легирующими добавками которого являются Zn ( $\sim 5.0 - 6.5$  вес. %), Mg ( $\sim 1.8 - 2.8$  вес. %) и Cu ( $\sim 1.4 - 2$  вес. %), а также содержащего неконтролируемые примеси до  $\sim 1.35$  вес. %. Предварительно образцы подвергали закалке при температуре  $470 \pm 5$  °С в течение 1 ч, затем охлаждали в воду при температуре  $20 \pm 0.5$  °С. Старение закаленных образцов проводили при температуре  $140.0 \pm 0.5$  °С в вакууме  $10^{-3}$  Па, времени старения от 2 до 8 ч в ПМП напряженностью  $557.0 \pm 8.0$  кА/м и без него.

Металлографическое исследование выполнено на оптическом металлографическом микроскопе МИМ-8М. Размер зерна определяли с помощью программы «ВидеоТестРазмер-5.0». После закалки на поверхности металлографического шлифа наблюдаются инородные включения. Отжиг сплава длительностью от 2 до 8 ч без наложения ПМП приводит к тому, что размер включений становится значительно больше, чем в закаленном состоянии, наблюдаются ярко выраженные границы зерен. Средний размер зерен составил  $210 \pm 80$  мкм. Наложение ПМП на старение сплава приводит к уменьшению количества и размера включений, а в некоторых случаях они практически полностью отсутствуют. Кроме этого, наблюдаются зерна, средний размер которых не изменяется и достигает значения  $205 \pm 78$  мкм.

Микротвердость измеряли с помощью микротвердомера HAUSER. Наложение ПМП на старение сплава всегда приводит к увеличению микротвердости до  $\sim 21$  %. Наблюдается, так называемый, отрицательный МПЭ [2]. Кроме того, обнаружено, что ПМП не изменяет кинетики процесса старения исследуемого сплава. Увеличение микротвердости можно объяснить тем, что при наложении ПМП структура сплава становится более искаженной, как показали результаты рентгенофазового анализа, приведенные ниже. Вследствие этого, движущиеся дислокации встречают на своем пути значительно большее количество стопоров (фазы, границ зерен и т.д.), и сплав становится более прочным.

1. Покоев А. В., Степанов Д. И., Вержаковская М. А. Влияние переменного магнитного поля на диффузию алюминия в железе // *Материаловедение*. 2005. № 8. С. 2-7.
2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В. и др. Магнитоэластический эффект: основные свойства и физические механизмы // *Кристаллография*. 2003. Т. 48. С. 838-867.
3. Покоев А.В., Осинская Ю.В., Шахбанова С.Г. Магнитоэластический эффект в алюминиевых сплавах // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2018. Т. 82. № 7. С. 961-964.

## Рентгеноструктурный анализ радиально гетероструктурированных нитевидных нанокристаллов GaPNAs/GaP на подложке Si(111)

А.П. Маленин<sup>1</sup>, А.К. Кавеев<sup>2</sup>, В.В. Федоров<sup>1,3</sup>, Д.В. Минин<sup>1</sup>, И.С. Мухин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>СПбАУ им. Ж.И. Алферова РАН, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 539.231, 539.261

Создание светоизлучающих диодов (СИД) методом эпитаксиального выращивания гетероструктур из твердых растворов типа  $A_3B_5$  актуально для современной фотоники [1]. Рост планарных слоев  $A_3B_5$  на Si предпочтителен в силу дешевизны подложек Si и более простой пост-ростовой обработки, однако невозможен напрямую из-за большого рассогласования параметров решеток. Для производства СИД, работающих в красном видимом диапазоне, перспективно использовать семейство четверных твердых растворов GaP(N, As), позволяющих варьировать  $E_g$  в диапазоне от 2 до 1.45 эВ. Добавление азота сжимает решетку GaP и уменьшает  $E_g$  [2], а мышьяка - компенсирует сжатие, позволяя сохранять согласованность решеток эпитаксиального слоя с подложкой, обходясь без буферного слоя, накладывающего ограничения на применение гетероструктур. Однако увеличение доли азота приводит к распаду твердого раствора. Решением проблемы решеточного согласования является создание нитевидных нанокристаллов (ННК), позволяющее выращивать структуры с меньшим количеством упругих напряжений и в более широком стехиометрическом диапазоне, без распада раствора и с малой плотностью дефектов, что позволяет сильнее варьировать  $E_g$  [3]. Массивы ННК могут применяться для создания гибких оптоэлектронных устройств [1].

В настоящей работе впервые были получены радиально-гетероструктурированные по типу ядро-оболочка самокаталитические ННК GaPNAs/GaP/Si(111) с содержанием азота <1% и содержанием фосфора до 80-90 ат.%. Методом рентгеноструктурного анализа показано, что, несмотря на рассогласование рефлексов ННК и кремния (0.6%), параметры решетки ННК и объемного GaP совпадают с точностью до третьего знака, что следует из неразличимости их дальних рефлексов, таких как (-4-42), (44-2) и (333) сфалеритовой структуры. Таким образом, оболочка GaPNAs решеточно-согласована с ядром GaP, что благоприятно с точки зрения дальнейшего создания качественных бездефектных светоизлучающих структур.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки (грант № FSRM-2023-0007).*

1. Neplokh V.V., Fedorov V.V., Mozharov A.M., Kochetkov F.M. et al. Red GaPAs/GaP Nanowire-Based Flexible Light-Emitting Diodes // *Nanomaterials*. 2021. Vol. 11. №10. P. 2549.
2. La R., Pan J.L., Bastiman F., Tu C.W. Self-catalyzed Ga(N)AsP nanowires and GaAsP/GaNAsP core-shell nanowires grown on Si (111) by gas-source molecular beam epitaxy // *Journal of Vacuum Science & Technology B*. 2016. Vol. 34. №2. Art. 02L108.
3. Koval O.Y., Fedorov V.V., Bolshakov A.D., Fedina S.V. Structural and Optical Properties of Self-Catalyzed Axially Heterostructured GaPN/GaP Nanowires Embedded into a Flexible Silicone Membrane // *Nanomaterials*. 2020. Vol. 10. №11. P. 2110.

## Исследование биоуглеродов полученных из кофейных зерен

*Н.А. Малышев<sup>1</sup>, М.В. Солонинкина<sup>1,2</sup>, Д.В. Логинов<sup>1</sup>, С.А. Янковский<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>*Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск*

<sup>2</sup>*Карельский научный центр РАН, Петрозаводск*

<sup>3</sup>*Томский политехнический университет, Томск*

УДК:538.9, 537.9

Биоуглероды играют важную роль в экологических и промышленных процессах [1-2]. Они могут быть произведены из кофейной гущи или кофейных отходов. Процесс производства биоуглеродов из кофе включает в себя термическую или химическую обработку кофейных осадков. Стоит отметить, что кофейные отходы попадают на свалки в большом объеме и нуждаются в новом применении, их переработка в биоуглероды является практичным способом повторного использования отходов и создания ценных продуктов для различных применений. Полученные биоуглероды могут применяться для очистки воды, улучшения почвы, а также в других промышленных процессах [3].

В работе приведены данные о рентгеноструктурном анализе биоуглерода полученного из кофейных зёрен. Объект исследования был получен путем отжига в бескислородной среде при температуре 800°C. Рентгеноструктурный анализ проводился с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-4 под излучение МоКа. Дифракционные картины были получены в автоматическом режиме в диапазоне углов от 2° до 145° с шагом 0.2°. Эксперименты осуществлялись в геометрии на просвет.

В ходе рентгеноструктурного анализа была получена дифракционная картина в масштабе  $I(2\theta)$ , которая показала, что образец обладает аморфной структурой. Кривые распределения  $I(2\theta)$  перестраивались в масштаб дифракционного вектора ( $s$ ), кривые  $I(s)$  были исправлены на комптоновское рассеяние, поляризацию, поглощение рентгеновского излучения образцом и переведены в электронные единицы (эл.ед.). Экспериментальные кривые распределения интенсивности рассеяния  $I_{изм}(2\theta)$  усреднялись по 6 съёмкам.

Из кривой  $I(s)$  были построены кривые распределения парных функций  $D(r)$ , из которых для исследуемого образца рассчитывались радиусы координационных сфер их размытие и координационные числа. За основу входных данных для расчета параметров ближнего порядка были приняты значения радиусов координационных сфер соответствующие гексагональному графиту.

По результатам расчета ближнего порядка видно, что радиус 1 координационной сферы, которая отвечает за связь С-С в углеродном кольце гексаганального графита, схожа с таковым значением для образца в рамках дисперсии, однако остальные значения радиусов не совпадают. Координационные числа также отличны, у биоуглерода полученного на основе кофейных зёрен, они сдвинуты в меньшую сторону. Отсюда можно сделать вывод, что биоуглерод на основе кофейных зёрен не обладает кристаллической структурой, как у гексаганального графита. Помимо этого, стоит отметить, что у исследуемого образца на ряду с углеродом присутствуют примеси такие как кислород (O) и кремний (Si).

1. Figueroa G. A., Homann T., Rawel H. M. Coffee production wastes: Potentials and perspectives // Austin Food Sci. 2016. Т. 1. №. 3. С. 1014.

2. Quosai P. et al. Characterization of biocarbon generated by high-and low-temperature pyrolysis of soy hulls and coffee chaff: For polymer composite applications // Royal Society open science. 2018. Т. 5. №. 8. С. 171970.

3. Yang J. et al. Exploring the Properties and Potential Uses of Biocarbon from Spent Coffee Grounds: A Comparative Look at Dry and Wet Processing Methods // Processes. 2023. Т. 11. №. 7. С. 2099.



## Устойчивость режима метаматериала в квазикристаллической структуре

*Е.Э. Маслова<sup>1</sup>, М.В. Рыбин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе РАН, Санкт-Петербург

УДК: 538.9, 535.3

Периодические фотонные структуры часто используются для устройств, основанных на оптической интерференции. Например, усиление обратного когерентного рассеяния [1-2], андерсоновская локализация [3], аномальное пропускание через перфорированные металлические пленки [4]. Аперриодические структуры также могут поддерживать интерференционные эффекты. В качестве таких структур могут выступать квазикристаллы. Квазикристаллы представляют собой аперриодические упорядоченные структуры без трансляционной симметрии, но обладающие вращательной симметрией и дальним порядком. Исследование фотонных квазикристаллов и других аперриодических структур показывает, что интерференция играет важную роль в формировании оптических свойств фотонных аперриодических структур, то есть квазикристаллы могут быть использованы для устройств на основе оптической интерференции.

В данной работе мы рассматриваем структуру, состоящую из бесконечных диэлектрических цилиндров в узлах квазикристаллической решетки. Мы показали, что транспортные свойства электромагнитных волн при распространении через квазикристаллические структуры качественно такие же, как и в периодических структурах, а «сгущающееся» расположение дифракционных максимумов не запрещает существование метаматериального режима. Таким образом, метаматериал с резонансной зависимостью эффективной магнитной проницаемости может быть создан из диэлектрических цилиндров, расположенных в узлах квазикристаллической структуры как с пентагональной, так и октагональной симметрией. Мы определили область существования режима метаматериала в квазикристаллической структуре при изменении диэлектрической проницаемости цилиндров и фактора заполнения решетки в случае ТЕ поляризации (магнитное поле осциллирует вдоль оси цилиндров). Стоит отметить, что в структуре с октагональной симметрией наблюдаются локализованные состояния. Показано, что минимальное значение диэлектрической проницаемости для режима метаматериала ниже в периодических структурах.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Грант № 20-79-10316).*

1. Wolf P. E., Maret G. Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media // Physical review letters. 1985. V. 55. №. 24. P. 2696.
2. Van Albada M. P., Lagendijk A. Observation of weak localization of light in a random medium // Physical review letters. 1985. V. 55. №. 24. P. 2692.
3. Anderson P. W. Absence of diffusion in certain random lattices // Physical review. 1958. V. 109. №. 5. P. 1492.
4. Ebbesen T. W. et al. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays // Nature. 1998. V. 391. №. 6668. P. 667-669.

## Магнитные взаимодействия в орторомбическом мультиферроике $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$

*А.Н. Матвеева, И.А. Зобкало*

*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.95

Соединения  $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$  принадлежат семейству «несобственных» мультиферроиков-ортоманганитов  $RMnO_3$  (R-ион редкой земли), в них ярко проявляется взаимосвязь магнитных и электрических свойств. При этом появление электрической поляризации в «родительских» соединениях -  $DyMnO_3$ ,  $HoMnO_3$  – описывается различными микроскопическими механизмами, соответственно, обратным эффектом Дзялошинского-Мория и обменно-стрикционнм эффектом [1,2].

Для исследования был выбран прямой метод изучения магнитных свойств вещества на микроскопическом уровне - метод рассеяния нейтронов, включая дифракцию поляризованных нейтронов и поляризационный анализ.

Получена кристаллическая структура  $DyMnO_3$  и  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$ , для обеих соединений она описывается пространственной группой  $Pbnm$ .

Температурные зависимости параметров магнитных структур исследованных кристаллов  $DyMnO_3$  и  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$  демонстрируют значительную зависимость от режима измерений – нагрев или охлаждение, что обусловлено взаимодействием двух магнитных подсистем – марганцевой и редкоземельной.

Произведены расчеты магнитной структуры  $DyMnO_3$ [1]. Магнитная структура  $DyMnO_3$  при 4К – это спиновая циклоида с компонентами типа  $A_yA_z$  для марганцевой подсистемы и  $G_xA_y$  для диспрозиевой подсистемы. При этой температуре магнитная структура диспрозиевой подсистемы имеет два вектора распространения: один несоразмерный, который соответствует вектору распространения магнитной структуры подсистемы Mn, тогда как другой вектор – соразмерный. Т.е. ниже температуры  $T_{NR}$  спонтанного упорядочения редкоземельной подсистемы в ней, наряду с несоразмерным порядком, появляется коллинеарная магнитная структура  $G_xA_y$  с волновым вектором  $(0 \ 0.5 \ 0)$ . Таким образом обнаружено сосуществование двух векторов распространения магнитной подсистемы диспрозия при низких температурах.

Впервые получена магнитная структура допированного соединения  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$  [2]. В соединении  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$  частичное замещение Dy на Ho приводит к единому вектору распространения магнитной структуры как марганцевой, так и редкоземельной подсистемы.

Показано, что, тогда как в  $DyMnO_3$  магнитные моменты лежат в плоскости  $ab$ , в допированном составе  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$  появляется компонента вдоль оси  $c$ , т.е. характер редкоземельного магнитного упорядочения меняется.

Впервые показано влияние внешнего электрического поля на магнитную киральность в соединении  $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$ . Допирование Ho на уровне около 20% в положении Dy дополнительно увеличивает влияние R на подрешетку Mn, подтверждая гипотезу о том, что допирование Ho контролирует не только магнитное упорядочение R, но и всю спиновую структуру соединения.

1. Matveeva A.N. et al. Complex interplay between 3d and 4f magnetic systems in multiferroic  $DyMnO_3$  // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2023. V. 569. P.170415;
2. Matveeva A.N. et al. Magnetic ordering and chirality in multiferroic  $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$  ( $x = 0.2$ ) // Physica B: Condens. Matter. 2023. V. 658. P. 414821.

## Картирование обратного пространства для исследования структурных особенностей эпитаксиальных массивов полупроводниковых нитевидных нанокристаллов АЗВ5 на кремнии

*Д.В. Минин<sup>1</sup>, В.В. Федоров<sup>1,2</sup>, А.К. Кавеев<sup>3</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфорова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

УДК: 539.261, 548.73, 538.9

Эпитаксиальные гетероструктуры узкозонных полупроводниковых соединений АЗВ5 (InAs, InSb) широко применяются в оптоэлектронике ближнего и среднего инфракрасного диапазона. Переход от планарной геометрии к нитевидным нанокристаллам (ННК) позволяет формировать решёточно-рассогласованные гетероструктуры на поверхности Si и стабилизировать метастабильные твёрдые растворы и структурные модификации. Для исследования структурных свойств подобных объектов наиболее часто применяют методы электронной микроскопии, не позволяющие провести интегральную оценку.

В работе показано, что картирование интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве предоставляет достоверную интегральную информацию о кристаллической структуре и композиционном составе эпитаксиальных массивов ННК твёрдых растворов InAs(N). Для восстановления карт обратного пространства и моделирования обратных решёток применялось ПО RecSpaceQT [1]. Комбинация микрофокусного рентгеновского источника с высокой светимостью и позиционно-чувствительного 2D-детектора позволяет осуществить картирование почти всего доступного объёма обратного пространства ( $Q_z > 0$ ,  $|Q| < 2k_{CuK\alpha}$ ) в лабораторных условиях за короткое время.

В процессе молекулярно-пучковой эпитаксии на поверхности Si(111) в массиве формируются как вертикальные ННК со структурой вюрцита (wz), так и сфалеритные (zb) nanoостровки. Результирующая карта обратного пространства – это суперпозиция картин рассеяния от всех типов объектов в массиве, которые можно разделить: малый объём области когерентного рассеяния в ННК ведёт к сильному диффузному рассеянию («тяжам»), а у плохо упорядоченных nanoостровок дифракционные рефлексы размываются в сферические сегменты. Установлено, что межплоскостные расстояния в ННК InAs со случайной гексагональной упаковкой лежат между ранее сообщаемыми значениями для 2H (wz) и 4H политипов InAs [2]. Анализ положений высокоиндексных рефлексов с высокой точностью подтвердил увеличение объёма решётки при встраивании азота в ННК InAsN [3].

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки (грант № FSRM-2023-0007)*

1. Suturin S. et al. Epitaxial Ni nanoparticles on CaF<sub>2</sub> (001), (110) and (111) surfaces studied by three-dimensional RHEED, GIXD and GISAXS reciprocal-space mapping techniques // Journal of Applied Crystallography. 2017. Vol. 50.
2. Kriegner D. et al. Unit Cell Structure of Crystal Polytypes in InAs and InSb Nanowires // Nano Lett. American Chemical Society, 2011. Vol. 11, № 4. P. 1483–1489.
3. Kaveev A.K. et al. Growth, Crystal Structure, and Photoluminescent Properties of Dilute Nitride InAsN Nanowires on Silicon for Infrared Optoelectronics // ACS Appl. Nano Mater. American Chemical Society, 2024.

## Создание цифрового двойника одномерного магнитоплазмонного кристалла на основе пермаллоя

*Т.А. Митрофанов<sup>1</sup>, Т.А. Наджарьян<sup>2</sup>, К.А. Гриценко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград*

<sup>2</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

УДК: 538.9

В настоящее время важной задачей является разработка цифровой модели магнитоплазмонных кристаллов на основе пермаллоя, которые могут найти широкое применение при производстве датчиков магнитного поля в различных областях, включая медицину (для магнитных кардиографов, магнитных энцефалографов и тестирования протезов [1]), космическую промышленность (для высокоточных магнитометров [2]) и обеспечение безопасности (для энтроскопов и металлоискателей [3]). Создание цифровых моделей позволит прогнозировать зависимости различных магнитных характеристик, таких как поле насыщения, коэрцитивная сила и остаточная намагниченность, от толщины тонкой пленки. Это также позволит оптимизировать параметры для конкретных приложений, избегая необходимости проведения дорогостоящих и трудоемких лабораторных экспериментов [4].

В данной работе с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics была построена трехмерная модель одномерного магнитоплазмонного кристалла на основе пермаллоя, с толщинами от 5 до 30 нм. Эта модель была помещена в постоянное магнитное поле, задаваемое с помощью закона Био-Савара-Лапласа. Используя инструменты COMSOL Multiphysics, были получены петли гистерезиса для тонких пленок заданной конфигурации. Представленные результаты демонстрируют влияние толщины пленки на магнитный гистерезис.

1. Ichkitidze L.P., Bazaev N.A., Telyshev D.V., Preobrazhensky R.Y., Gavrushina M.L. Magnetic Field Sensors in Medical Diagnostics // *Biomedical Engineering*. 2015. V.48(6). P.305–309.
2. Brown P., Whiteside B.J., Beek T.J., Fox P., Horbury T.S., Oddy T.M. Space magnetometer based on an anisotropic magnetoresistive hybrid sensor // *Review of Scientific Instruments*. 2014. V.85. N.12. P.125117.
3. Ripka P. Security applications of magnetic sensors // *Journal of Physics: Conference Series*. 2013. V.450. P. 012001.
4. Kalidindi S. R. et al. Digital twins for Materials // *Frontiers in Materials*. 2022. T. 9. C. 48.

## Влияние ионов кальция на взаимодействие криопротекторов с моделью биологической мембраны

О.В. Мишукова<sup>1,2</sup>, В.Ю. Свечникова<sup>1,3</sup>, А.Г. Миронова<sup>4</sup>, Г.Б. Хомутов<sup>3</sup>, М.А. Марченкова<sup>1</sup>,  
С.А. Яковенко<sup>3,5</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов, Институт биохимической технологии и нанотехнологии, Москва

<sup>3</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва

<sup>4</sup>Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва

<sup>5</sup>Клиника ЭКО «Альтравита», Москва

УДК: 538.9

Криопротекторы (КП) играют важную роль в сохранении биологических веществ в криоконсервированном состоянии [1]. Они защищают клетки от повреждений, вызванных замораживанием, и позволяют им сохранить свою структуру и функциональность при низких температурах. Разработка эффективных КП позволит увеличить срок хранения биологических материалов и обеспечить сохранность клеток и тканей для медицинских целей, а также защитить от токсической нагрузки.

В данной работе изучались ленгмюровские монослои яичного желтка и воздействие на них КП, в частности сахарозы, а также влияние ионов кальция из субфазы. По анализу изотерм сжатия-растяжения произведена оценка упругих свойств полученных монослоев посредством расчета их модулей сжатия (МС).

Ионы кальция, как и сахароза, влияют на структуру липидного монослоя, расширяя и размягчая его: в обоих случаях максимум и минимум МС уменьшается в 1,5 раза в сравнении с монослоем чистого желтка.

Включение в монослой по отдельности сахарозы и кальция приводит к его расширению, в то время одновременное их присутствие в монослое сжимает его. При этом МС уменьшается всего в пределах 20%. Таким образом, можно говорить о блокировке влияния кальция и сахарозы друг другом. Это происходит из-за образования комплексных соединений ионов кальция с КП.

На основе полученных данных можно выделить рекомендации по заморозке клеток:

- Отмытие замораживаемых клеток от кальция в среде их инкубации;
- Уменьшение потребления пищи, богатой витамином D, поскольку он помогает организму усваивать кальций.

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

1. Kostyaev A. A., Martusevich A. K., Andreev A. A. Toxicity of cryoprotectants and cryoconservants on their basis for blood components and bone marrow // Nauchnoe obozrenie. Meditsinskie nauki. 2016. Т. 6. С. 54-74.

## Параметрическая оптотермическая модуляция углеродного нанорезонатора с локализованной резонансной частицей кремния

*И.В. Надоян<sup>1</sup>, Н.А. Соломонов<sup>1</sup>, К.Н. Новикова<sup>1</sup>, А.В. Павлов<sup>1</sup>, В.А. Шаров<sup>1</sup>, А.М. Можаров<sup>1</sup>, Д.В. Пермяков<sup>3</sup>, Д.А. Кислов<sup>3,4</sup>, А.С. Шалин<sup>3,4</sup>, А.О. Голубок<sup>5</sup>, М.И. Петров<sup>3,4</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>*Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург*

<sup>3</sup>*Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург*

<sup>4</sup>*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва*

<sup>5</sup>*Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург*

УДК: 538.9

Исследование воздействия оптического излучения на микро- и нанообъекты представляет особый интерес для развития оптомеханических, химических и биологических сенсоров [1]. В частности, исследование влияния лазерного излучения на механические свойства нанорезонаторов на основе одиночных углеродных нановискеров (УНВ) может быть использовано при разработке детекторов различного типа [2,3]. Механические колебания УНВ с локализованной на свободном конце сферической наночастицей кремния можно визуализировать в сканирующем электронном или оптическом микроскопе, что отличает их от существующих сенсоров, требующих достаточно сложных оптических, механических или электронных систем детектирования. УНВ выращиваются из остаточной атмосферы в камере сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) путем фокусировки электронного луча на конце вольфрамовой иглы и имеют малую массу (порядка 200 фг) и собственные частоты в МГц диапазоне, что обеспечивает им высокую чувствительность при регистрации действия сил порядка пН. Для обнаружения влияния оптического излучения на наномеханические колебания лазерный луч фокусировали на Si частицу, расположенную на конце вискера, и регистрировали изменение амплитудно-частотной характеристики.

В соответствии с теоретическими и экспериментальными исследованиями в рассматриваемой системе при облучении лазером возникает параметрический резонанс. Механизм модуляции основан на периодическом оптическом нагреве УНВ, колеблющемся в точке фокуса лазера, и дальнейшей модуляции параметров упругости УНВ. Локализация наночастицы кремния на вершине УНВ за счет оптического резонанса Ми увеличивает оптическое поглощения системы, и как результат, определяет большую модуляцию температуры. Показано, что параметрический механизм модуляции позволяет существенно повысить силу оптико-механической связи.

Таким образом в работе представлены результаты исследований параметрической оптотермической модуляции гибридной наномеханической системы, состоящих из УНВ с наночастицей кремния на ее вершине.

*Работа выполнена при поддержке министерства образования и науки в рамках гранта FSRM-2023-0007.*

1. Zemánek P., Volpe G., Jonás A., Brzobohaty O. Perspective on Light-Induced Transport of Particles: From Optical Forces to Phoretic Motion // *Advances in Optics and Photonics*. 2019. V. 11. P. 577-678.
2. Mukhin I. S., Fadeev I. V., Zhukov M. V., Dubrovskii V. G., Golubok A. O. // *Ultramicroscopy*. 2015. V. 148. P. 151–157.
3. Lukashenko S. Y., Mukhin I. S., Komissarenko F. E., Gorbenko O. M., Sapozhnikov I. D., Felshtyn M. L., Uskov A. V., and Golubok A. O. // *Phys. Status Solid A*. 2018. V. 215. N. 1800046.

## Закономерности атомной и структурной сегрегации при переходе от бинарных к тернарным наночастицам на основе платины и палладия

Н.И. Непша, Н.Ю. Сдобняков, В.М. Самсонов, И.В. Талызин, А.Ю. Колосов, Д.В. Жигунов, К.Г. Савина

Тверской государственный университет, Тверь

УДК: 539.2 : 536.912+536.911, 538.9

Интерес к металлическим наночастицам, в том числе к бинарным и тернарным наносплавам, обусловлен вариативностью их свойств, которые являются следствием вариантности их структуры и композиции по составу. Последовательное изучение свойств моно- [1, 2], бинарных [2, 3] и тернарных наночастиц [4] на основе платины и палладия позволяют проследить возможные закономерности структурообразования (как наследование отдельных свойств от предыдущего класса, так и появление новых нехарактерных).

В данной работе исследована атомная и структурная сегрегация бинарной наносистемы  $Pd_yPt_z$  (здесь и далее  $y[\%]=z[\%]$ ) и тернарной наносистемы  $Ni_xPd_yPt_z$  ( $x[\%]=5, 10$  и  $20$ ), в котором атомы никеля выступают в качестве допанта. Количество атомов в данных системах составляло 2500 и 5000. Использовались два метода моделирования: метод молекулярной динамики (МД) в ПО LAMMPS и метод Монте-Карло (МК) в ПО Metropolis. МД расчёты проводились с помощью двух силовых полей: потенциала погруженного атома (EAM) и потенциала сильной связи; МК расчёты с помощью потенциала сильной связи (TB-SMA). Начальные конфигурации выбранных наночастиц представляли собой сферы, построенные в ПО AtomsK, с ГЦК структурой. Система подвергалась процедуре минимизации энергии. Далее наночастицы нагревались до 1600 К и последующим охлаждением до 100 К с различными скоростями (данная процедура повторялась дважды). Были исследованы соответствующие конечные конфигурации, а именно их атомное упорядочение (распознанные кристаллические структуры) в ПО Ovito [5].

Было показано, что в процессе охлаждения наночастиц  $Pd_yPt_z$  с первоначально равномерным распределением компонент наблюдается формирование структуры типа onion-like с поверхностным монослоем атомов Pd (с малой долей других компонент) и приповерхностным монослоем Pt. Данный порядок слоев не меняется в системе  $Ni_xPd_yPt_z$ , однако третий монослой начинает заполняться преимущественно атомами Ni с ростом процента допанта. Начинает разрушаться внутренний слой из палладия на отдельные кластерные образования, которые могут располагаться как по контуру луковичного слоя, так и в центре наночастицы. Ядро имеет преимущественно смешанный состав из Ni и Pt. Рост доли допанта приводит к разрушению таких упорядоченных структур, как «icosahedra» и «twin structure», а также уменьшает долю ГЦК и ГПУ фаз.

Полученные закономерности атомной и структурной сегрегации позволяют более конкретно определить области нанотехнологии, в которых бинарные и тернарные наносплавы на основе платины и палладия могут быть использованы за счет определенного набора свойств, характерных именно для данной структуры и композиции по составу.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00039, <https://rscf.ru/en/project/24-23-00039/>).*

1. Васильев С.А., Романов А.А., Востров Н.В., Скопич В.Л., Савина К.Г. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 436-442.
2. Samsonov V.M., Romanov A.A., Kartoshkin A.Yu., Talyzin I.V., Puytov V.V. // Applied Physics A. 2022. V. 128. Art. No. 826. 14 p.
3. Колосов А.Ю., Митинев Е.С., Тактаров А.А., Мясниченко В.С., Базулев А.Н., Сдобняков Н.Ю. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. Вып. 14. С. 419-434.
4. Непша Н.И., Соколов Д.Н., Митинев Е.С., Тактаров А.А., Сдобняков Н.Ю. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. Вып. 15. С. 507-519.
5. Stukowski A. // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. V. 1. P. 015012-1-015012-7.

## Структура и магнитные свойства кобальт-цинкового феррита

Е.В. Николаев<sup>1</sup>, С. Бобуёв<sup>1</sup>, А.П. Суржиков<sup>1</sup>, Е.Н. Лысенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

УДК: 537.622.6, 538.9

К одному из широко используемых классов магнитомягких ферритовых материалов относятся кобальт-цинковые ферриты с химической формулой  $\text{Co}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  (Co-Zn) [1]. Широко известно, что ультрадисперсные порошки Co-Zn-ферритов используются в транспортировке лекарственных средств, гипертермии и магнитно-резонансной томографии. Однако неоднократно показано, что способ получения ферритов оказывает влияние на их характеристики, такие как структура, магнитные и электрические свойства. Любое отклонение от стехиометрии во время синтеза и спекания образцов может приводить к изменению свойств ферритов. Кроме того, существует закономерность влияния среднего размера частиц на структурные и электромагнитные свойства порошков.

Таким образом, цель данной работы заключается в установлении влияния среднего размера частиц синтезированного порошка на структуру и магнитные свойства кобальт-цинкового феррита с химическим составом  $\text{Co}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_4$ . Закономерности структурных и магнитных свойств ферритовых порошков в зависимости от среднего размера частиц дисперсности будут установлены методами рентгенофазового анализа, лазерной дифракции, термического анализа.

Данные РФА показали, что увеличение временно-энергетических режимов механической активации приводит к уменьшению размеров кристаллитов и увеличению величины внутренних упругих микронапряжений. Методом термического анализа в магнитном показана динамика изменения величины температуры Кюри экспериментальных образцов при изменении режимов механического измельчения.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-72-10078-П).*

1. Rani R. et al. Structural, morphological and temperature dependent electrical traits of  $\text{Co}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{In}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_a$  spinel nano-ferrites // *Ceramics International*. 2021. V. 47. P. 30902–130910.



## Магнитные и структурные свойства гексаферрита бария, полученного методом твердофазного синтеза

*С.А. Николаева, Е.В. Николаев, С. Бобуёк, А.П. Суржиков*

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

УДК:537.8

Гексаферриты широко используются в качестве материалов для постоянных магнитов и магнитной записи информации. Уникальность их свойств обусловлена большими величинами полей магнитокристаллической анизотропии, намагниченности насыщения и температуры Кюри [1]. Как правило, изготовление гексаферритов осуществляется методом твердофазного спекания, недостаток которого заключается в применении высоких температур, понизить которые можно путем механической активации исходных реагентов. Данная операция значительно увеличивает реакционную способность порошка и делает возможным протекание твердофазного синтеза при более низких температурах.

Целью данной работы является исследование процесса фазообразования гексаферрита бария  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  полученного методом твердофазного синтеза в зависимости от режимов механической активации смеси исходных реагентов и изучение магнитных характеристик изготовленного феррита.

Твердофазный синтез экспериментальных образцов осуществлялся из механически активированных порошков в шаровой мельнице с частотой вращения барабанов 1390 об/мин, 1820 об/мин и 2200 об/мин в течение 60 минут. Температура твердофазного синтеза лежит в диапазоне 1100-1300°C.

Результаты исследования структурных свойств гексаферрита бария показали, что механическая активация исходных реагентов позволяет понизить температуру синтеза бариевого феррита на 100°C. В работе установлено влияние режимов механической активации и температуры твердофазного синтеза на температуру Кюри гексаферрита бария.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект №19-72-10078-П.*

1. Pullar R.C. et al. Hexagonal ferrites: a review of the synthesis, properties and applications of hexaferrite ceramics // Progress in Materials Science. 2012. V. 57. No. 7. P. 1191–1334.

## Разработка наноразмерных светодиодов красного диапазона на основе нитевидных нанокристаллов GaPNAs, синтезированных на кремниевых подложках

К.Н. Новикова<sup>1</sup>, А.С. Голтаев<sup>1</sup>, А.А. Максимова<sup>1,2</sup>, А.К. Кавеев<sup>3</sup>, В.В. Федоров<sup>1,4</sup>,  
А.М. Можаров<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Академический университет им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

<sup>3</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

<sup>4</sup>ФГАОУ ВО СПбПУ, Санкт-Петербург

УДК:538.975, 538.958

Одним из перспективных направлений развития современной электроники является создание интегральных оптоэлектронных схем, где в качестве оптических элементов могут выступать, например, волноводные оптические соединения или светоизлучающие элементы. Перспективным материалом для создания подобных устройств является фосфид галлия. Широкий диапазон прозрачности (0,5-11 мкм) и относительно высокий показатель преломления ( $n=3,1$  для 1,2 мкм) данного материала делают его пригодным для создания волноводных устройств. Изначально непрямозонный материал GaP при добавлении азота и мышьяка становится прямозонным, что позволяет создавать на его основе оптоэлектронные устройства, например, светодиоды красного диапазона. Так в работе [1] представлен метод создания светоизлучающей гетероструктуры на основе планарных слоев GaPNAs, но в планарных слоях может присутствовать паразитное влияние дефектов кристаллической структуры [2]. Использование нитевидных нанокристаллов (ННК) вместо планарных слоев позволяет синтезировать структуры с высоким кристаллическим совершенством. Также преимуществом использования нитевидных нанокристаллов GaP является возможность синтеза на кремниевых подложках [3], что позволяет не только снизить стоимость процесса производства готового изделия, но и совместить создание светоизлучающих структур с отработанными кремниевыми технологиями.

В данной работе предложено создание светоизлучающих структур с высокой квантовой эффективностью на основе нитевидных нанокристаллов GaPNAs, представлен синтез молекулярно-пучковой эпитаксией упорядоченных радиальных p-i-n гетероструктур «ядро-оболочка» p-GaP/GaPNAs/n-GaP на кремниевой подложке. Полученные однородные массивы ННК исследовались методами растровой и просвечивающей электронной микроскопии. Измеренные вольт-амперные характеристики синтезированной структуры показали диодную зависимость, при этом наблюдалось свечение отдельных ННК, полученный спектр электролюминесценции показал пик с максимумом на длине волны 700 нм. Форма данного пика несимметрична: резкий подъем в диапазоне длин волн от 600 до 700 нм и плавный спуск с 700 до 1000 нм, который может свидетельствовать о наличии в запрещенной зоне GaP встроенных азотных уровней.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке министерства образования и науки в рамках гранта FSEG-2024-0017.*

1. Fedorov V.V. et al. Dual-functional light-emitting and photo-detecting GaAsPN heterostructures on silicon // Materials Science in Semiconductor Processing. 2023. Vol. 168. P. 107867.
2. Schöne J. et al. Defect Formation and Strain Relaxation in graded GaPAs/GaAs, GaNAs/GaAs and GaInNAs/Ge Buffer Systems for high-efficiency Solar Cells // Journal of Physics: Conference Series. 2013. Vol. 471. P. 012008
3. Fedina S. V. et al. Processes of formation of epitaxial arrays of self-catalytic GaP nanowires on Si (111) // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 2103, № 1. P. 012127.

## Упругое и неупругое рассеяние нейтронов в редкоземельных ортоферритах TbFeO<sub>3</sub> и YbFeO<sub>3</sub>

*А.К. Овсяников<sup>1</sup>, О.В. Усманов<sup>1</sup>, И.А. Зобкало<sup>1</sup>*

*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.913

Семейство редкоземельных ортоферритов RFeO<sub>3</sub>, где R - редкоземельный элемент, демонстрирует удивительное разнообразие магнитных свойств. Его соединения кристаллизуются в орторомбическую структуру перовскита с пространственной группой R $\bar{3}m$ . При температуре Нееля, которая обычно находится в диапазоне T<sub>N</sub> = 600 ÷ 700 К, магнитные моменты железа образуют антиферромагнитную фазу [1-2] с небольшим наклоном магнитных моментов, где за наклон моментов Fe-подрешетки отвечает взаимодействие Дзялошинского-Мория (ДМ). С понижением температуры усиление обменного взаимодействия между ионами Fe<sup>3+</sup> и R<sup>3+</sup> приводит к изменению баланса энергий магнитных взаимодействий, что вызывает спин-реориентационные переходы [3-4].

Исследование ортоферритов TbFeO<sub>3</sub> и YbFeO<sub>3</sub> проводилось методами неупругого рассеяния нейтронов и монокристаллической дифракции нейтронов в магнитных полях. Низкотемпературная эволюция энергетических щелей исследована для обоих соединений и рассмотрена с точки зрения изменения анизотропии редкоземельных ионов. Получены параметры обмена между ближайшими соседями для Fe<sup>3+</sup> в TbFeO<sub>3</sub>. Получена магнитная фазовая диаграмма для YbFeO<sub>3</sub>, которая рассмотрена с точки зрения баланса энергии между обменными взаимодействиями, взаимодействием Дзялошинского-Мория, анизотропией и внешним магнитным полем.

1. White R.L. Review of Recent Work on the Magnetic and Spectroscopic Properties of the Rare-Earth Orthoferrites // Journal of Applied Physics. 1969. V.40. P.1061.
2. Treves D. J. Studies on Orthoferrites at the Weizmann Institute of Science // Journal of Applied Physics. 1965. V.36. P.1033-1039.
3. Park K., Sim H., Leiner J.C., Yoshida Y., Jeong J., Yano S., Gardner J., Bourges P., Klicpera M., Sechovský V., Boehm M., Park J. Low-energy spin dynamics of orthoferrites AFeO<sub>3</sub> (A= Y, La, Bi) // Journal of Physics: Condensed Matter. 2018. V.30. P. 235802.
4. S. Chaturvedi, P. Shyam, A. Apte, J. Kumar, A. Bhattacharyya, A.M. Awasthi, S. Kulkarni. Dynamics of electron density, spin-phonon coupling, and dielectric properties of SmFeO<sub>3</sub> nanoparticles at the spin-reorientation temperature: Role of exchange striction // Physical Review B. 2016. V.93. P.174117.

## Влияние постоянного и импульсного магнитных полей на процесс фазообразования в бериллиевой бронзе БрБ-2

Ю.В. Осинская

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара

УДК: 621.785.78:537.636

Для изучения влияния постоянного и импульсного магнитных полей на процесс фазообразования методами микротвердости и рентгенофазового анализа использовали образцы из бериллиевой бронзы БрБ-2, это сплав на основе меди и содержит порядка 1,8-2,1 вес. % легирующей примеси бериллия и 0,2-0,5 вес. % примеси никеля, содержание остальных примесей не превышает 0,12 вес. %. Исследуемые образцы из бериллиевой бронзы БрБ-2 были подвергнуты термической обработке при температуре 800 °С и выдержке в течение 0,33 часа и закалке в воду 20 °С. Отжиг с целью старения проводился при температуре 350 °С в вакууме  $10^{-5}$  Тор во внешнем постоянном магнитном поле (ПМП) напряженностью 557,2 кА/м (7 кЭ) и импульсном магнитном поле (ИМП) частотой 2 Гц и амплитудой напряженности 557,2 кА/м (7 кЭ), длительностью от 0,17 до 2 ч.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие краткие выводы:

1. Установлено, что наложение ПМП напряженностью 7 кЭ всегда приводит к возрастанию микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2 до 19 %, наблюдается отрицательный магнитопластический эффект.
2. Обнаружено, что наложение ИМП амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой 2 Гц всегда приводит к уменьшению микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2 до 22 %, наблюдается положительный магнитопластический эффект.
3. Установлены оптимальные режимы термомагнитной обработки:
  - а) в ПМП – температура старения 350 °С, время старения 1 ч, напряженность магнитного поля 7 кЭ, при этом наблюдаются высокие прочностные свойства;
  - б) в ИМП – температура старения 350 °С, время старения 0,5 ч, амплитуда напряженности магнитного поля 7 кЭ, частота импульсов 2 Гц при этом наблюдаются высокие пластические свойства.
4. Методом рентгенофазового анализа обнаружено, что наложение ПМП приводит к активизации процесса фазообразования и увеличению искажений кристаллической решетки, в свою очередь ИМП затормаживает процесс старения.

## Установка малоуглового рассеяния нейтронов МУРЕНА для компактного нейтронного источника DARIA

К.А. Павлов<sup>1,2</sup>, Н.А. Коваленко<sup>1,2</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 538.9

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) прочно себя зарекомендовало как высоко востребованный метод структурных исследований вещества. Поэтому установка МУРН входит в перечень инструментов первой очереди в разработке приборного парка компактного нейтронного источника DARIA [1]. В работе представлена концептуальная схема установки, приведено обоснование ряда предложенных решений, а также проведено численное моделирование работы установки, на основе которого подтвержден принятый подход и результаты аналитических расчетов [2,3].

Ключевой идеей реализации установок проекта DARIA является адаптация частотно-временного режима работы нейтронного источника к нуждам каждой установки индивидуально. При этом максимально эффективно используется генерируемый нейтронный поток, сокращается до предела время простоя детектора в рабочем режиме измерений и, тем самым, нивелируется изначальная разница в интегральном нейтронном потоке компактного источника и установки мега-класса. Опираясь на заданное приборное разрешение порядка 10% и расчётный спектр холодного замедлителя, оценена предельная пролётная база, вычислены оптимальные для установки частота повторения и длительность импульса. Рассчитаны параметры каскада прерывателей, обеспечивающие формирования требуемой временной структуры пучка. Предложены варианты исполнения фильтрации спектра до рабочей полосы, включая также и сопутствующие средства поляризации пучка. В программном пакете McStas [4] разработана подробная математическая модель установки, способная как проиллюстрировать работу установки в целом, так и служить инструментом для решения промежуточных задач на более глубоком уровне. Получены оценки среднего нейтронного потока в позиции образца для различных режимов измерений до  $10^6$  н/(с·см<sup>2</sup>), смоделирован эксперимент на простом образце (однородные сферические монодисперсные частицы).

Полученные результаты показывают принципиальную возможность реализации метода МУРН в пользовательском режиме в условиях импульсного компактного источника нейтронов со средним потоком в  $10^{10}$  н/(с·см<sup>2</sup>) на поверхности модератора холодных нейтронов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No.075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).*

1. Павлов К.А., Коник П.И., Коваленко Н.А., Кулевой Т.В., Серебренников Д.А., Субботина В.В., Павлова А.Е., Григорьев С.В. Компактные источники нейтронов для физики конденсированного состояния в России и мире: состояние дел и перспективы // Кристаллография. 2022. Т. 67 № 1 С. 5-20.
2. Павлов К.А., Коваленко Н.А., Азарова Л.А., Кравцов Е.А., Кулевой Т.В., Григорьев С.В. Установка малоуглового рассеяния нейтронов для компактного нейтронного источника DARIA // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. №7. С.84-92.
3. Григорьев С.В., Коваленко Н.А., Павлов К.А., Москвин Е.В., Сыромятников В.Г., Григорьева Н.А. Нейтронные установки компактного источника нейтронов DARIA: параметры и особенности // Известия РАН. 2023. Т. 87 № 11 С. 1526–1533.
4. Willendrup P.K., Lefmann K. McStas (i): Introduction, use, and basic principles for ray-tracing simulations // Journal of Neutron Research. 2020. V. 22. No.1. P.1-16.

## Пленки CoNiP: ключевые параметры и их влияние на микроструктуру

*М.И. Панасюк<sup>1</sup>, Т.И. Зубарь<sup>1</sup>, Т.И. Усович<sup>1</sup>, А.Н. Котельникова<sup>1</sup>, О.Д. Канафьев<sup>1</sup>,  
В.А. Федькин<sup>1</sup>, А.В. Труханов<sup>1</sup>, С.В. Труханов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск

<sup>2</sup>НИТУ МИСиС, Лаборатория интеллектуальных сенсорных систем,  
Кафедра технологии материалов электроники, Москва

УДК:538.9, 541.13

Покрyтия сплава CoNiP были получены методом электрохимического осаждения из сульфатного электролита состава, г/л: 150 CoSO<sub>4</sub>; 150 NiSO<sub>4</sub>; 30 H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>; 10 NaH<sub>2</sub>PO<sub>2</sub>; 1 сахараина; 10 сегнетовой соли. Плотность тока варьировалась от 10 до 50 мА/см<sup>2</sup>.

При увеличении плотности тока с 10 до 30 мА/см<sup>2</sup> мы наблюдали постепенное увеличение содержания Co в сплаве с 62,3 до 79,2 ат.%. Этот результат показал, что сплавы CoNiP из электролита данного состава осаждаются по аномальному типу электроосаждения: предпочтительно осаждаются менее благородный металл. Для всех образцов наблюдалось повышенное содержание кобальта, содержание никеля с увеличением плотности тока от 10 до 30 мА/см<sup>2</sup> постепенно уменьшилось с 27 до 21,9 ат.%.  
При дальнейшем увеличении плотности тока (40 и 50 мА/см<sup>2</sup>) на покрытии начали формироваться две четко выраженные области, сильно отличающиеся по составу и микроструктуре. В области 1 содержалось значительно больше кобальта чем в области 2. А содержание никеля и фосфора напротив в области 1 было ниже. Поверхность образцов в области 1 сильно развита. Морфология поверхности представляет собой совокупность зерен с произвольной формой. Структура поверхности разупорядочена и сформирована из агрегатов различной архитектуры. В области 2 наблюдается менее развитая микроструктура.

Мы предположили, что к вышеописанному эффекту привело содержание в электролите сегнетовой соли. Мы выдвинули гипотезу, что сегнетова соль оказывает влияние на распределение металлов в растворе и создает условия, при которых происходит разделение сплава на области с различным составом и микроструктурой.

Мы повторили эксперимент используя все те же технологические параметры, что и ранее. Однако исключили из состава электролита сегнетову соль.

Состав образцов, осажденных из электролита, не содержащего сегнетову соль, с увеличением плотности тока изменялся незначительно. Наблюдалось содержание кобальта от 79 до 82,2 ат.%. Состав каждого из образцов был равномерным по всей поверхности. На поверхности образцов не было обнаружено областей, отличающихся по микроструктуре.

Таким образом, можно сделать вывод, что явление формирования двух областей происходило под влиянием сегнетовой соли. На основании полученных данных мы выдвинули гипотезу о механизме данного эффекта.

На поверхность образцов, осажденных из электролита, содержащего сегнетову соль, адсорбируется комплексобразователь. Адсорбция происходит по линиям проката медной фольги, выступающими активными центрами роста. Адсорбированные частицы выступают в качестве дефектов поверхности и становятся энергетически выгодными центрами роста. На них начинают активно осаждаться ионы металлов. Из-за обеднения прикатодного слоя реагирующими ионами металлов происходит активный усиленный рост этих выступающих областей осадка навстречу потоку разряжающихся ионов. На активных центрах роста преимущественно осаждаются кобальт. Ионы кобальта при высоких плотностях тока активно расходуются на осаждение на выступающих частях осадка. Новые ионы кобальта постепенно поступают из прианодной области. Оставшиеся ровные менее энергетически выгодные части осадка заполняет никель, концентрация которого изначально была ниже.

Таким образом, под действием комплексобразователя (сегнетовой соли) происходит формирование двух различных по составу и микроструктуре областей.

*Исследования были поддержаны в рамках программы «Приоритет 2030» (НИТУ МИСиС, грант К6-2022-043).*

## Направленный поиск условий упорядочения пористой структуры при анодировании алюминия в электролите на основе смеси серной и щавелевой кислот

*М.М. Пизин, И.В. Росляков, К.С. Напольский*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва*

УДК: 538.9, 544.653.23

Пористые плёнки анодного оксида алюминия (АОА), получаемые электрохимическим окислением металла в растворах кислот, широко используются для создания на их основе мембран, газовых и оптических сенсоров, а также в качестве темплатов для получения нанокомпозитов различного состава. Структура АОА состоит из цилиндрических пор заданного размера, которые формируют гексагональный массив. Упорядоченные структуры получаются лишь в узком диапазоне напряжений анодирования, а их параметры (например, расстояние между соседними порами –  $D_{int}$ ) строго определены. Для получения плёнок АОА с промежуточными параметрами, можно использовать смеси кислот, например серной и щавелевой [1, 2].

Целью данной работы является направленный поиск условий упорядочения системы пор анодного оксида алюминия, получаемого в смеси серной и щавелевой кислот, для создания малодефектных пористых структур.

Для определения природы лимитирующей стадии анодного окисления алюминия было проведено исследование методом линейной вольтамперометрии (ЛВА) в электролите состава 0,1 М  $H_2SO_4$  + 0,3 М  $H_2C_2O_4$ . Зависимости плотности тока от напряжения имеют несколько характерных участков. Кривые совпадают ниже 35 В и расходятся при более высоких напряжениях. Выше 80 В плотность тока плавно уменьшается несмотря на увеличение напряжения. При этом обратная плотность тока линейно возрастает при увеличении толщины АОА, что свидетельствует об ограниченной диффузии реагентов/продуктов в каналах АОА при данных напряжениях анодирования. Промежуточные напряжения (от 35 до 80 В) соответствуют смешанному режиму формирования анодного оксида алюминия.

С помощью растровой электронной микроскопии с последующей статистической обработкой изображений показано формирование упорядоченной упаковки пор в структуре АОА с долей пор в гексагональном окружении более 80% при напряжении 32 В и в диапазоне 80÷95 В, что согласуется с верхней границей кинетического режима и диффузионным режимом по данным ЛВА, соответственно. В диффузионном режиме при напряжениях анодирования от 80 до 95 В наблюдается формирование упорядоченной пористой структуры с  $D_{int} = 113\div 134$  нм. Дальнейшее увеличение напряжения анодирования до 100–140 В позволит получать упорядоченные пористые пленки анодного оксида алюминия с  $D_{int}$  в диапазоне 140 – 210 нм, которые в настоящее время не упоминаются в литературе.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10176П).*

1. Kashi M.A. et al. Fabrication of Self-Ordered Nanoporous Alumina with 69–115 nm Interpore Distances in Sulfuric/Oxalic Acid Mixtures by Hard Anodization // Japanese Journal of Applied Physics. 2010. V. 49 No. 1R 015202.
2. Kashi M.A. et al. Optimum self-ordered nanopore arrays with 130–270 nm interpore distances formed by hard anodization in sulfuric/oxalic acid mixtures // Japanese Journal of Applied Physics. 2007. V. 40. No. 22. P. 7032-7040.

## Изучение формирования углеродных гетероструктур в процессе автоэлектронной эмиссии из алмазных иглоподобных кристаллитов

*А.Е. Пищулина<sup>1</sup>, В.И. Клец<sup>1</sup>, А.Н. Образцов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва

УДК: 537.5, 538.9

Разнообразные электронные свойства углеродных наноматериалов открывают возможности для разработки на их основе различных микроэлектронных и оптоэлектронных устройств. Например, в работе [1] была продемонстрирована возможность создания полностью углеродных гетеропереходов и гетероструктур на основе тонких слоев аморфного углерода с различным содержанием  $sp^3$  и  $sp^2$  связей. В то же время, в последние годы растет интерес к разработке гетероструктур, сформированных на окончаниях острия, и исследования в них явлений автоэлектронной и фотоэлектронной эмиссии [2, 3].

Ранее, в работе [4] была продемонстрирована возможность формирования полностью углеродной гетероструктуры на окончании алмазного иглоподобного кристаллита (микроиглы) в процессе автоэлектронной эмиссии. Было показано, что за счет структурной модификации микроиглы под действием высокого электрического поля и высокой температуры на окончании эмиттера формируется протяженный наноразмерный выступ, отделенный от тела эмиттера туннельным барьером. В результате формируется двухбарьерная система (гетероструктура), в которой наблюдается эффект кулоновской блокады, проявляющийся в волнообразном (или “ступенчатом”) виде вольтамперной характеристики эмиттера. Механизм образования таких гетероструктур ранее не был подробно изучен. В настоящей работе представлены результаты систематического исследования процесса формирования таких гетероструктур в ходе экспериментов по автоэлектронной эмиссии из алмазных микроигл, а также проводится сопоставление результатов таких экспериментов с результатами структурных исследований, проведенных с помощью просвечивающей электронной микроскопии. На основе полученных данных предложена модель гетероструктурированного эмиттера, и проведено моделирование распределения электрического поля в системе, которое показало хорошее соответствие между рассчитанными и наблюдаемыми параметрами вольтамперных характеристик.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-72-10067).*

1. Bhattacharyya S. et al. Resonant tunnelling and fast switching in amorphous-carbon quantum-well structures // Nature Materials. 2006. V. 5. P.19–22.
2. Wang A. et al. Ultra Coherent Single Electron Emission of Carbon Nanotubes // Advanced Materials. 2023. V. 35.
3. Pascale-Hamri A. et al. Ultrashort single-wall carbon nanotubes reveal field-emission Coulomb blockade and highest electron-source brightness // Physical Review Letters. 2014. V. 112.
4. Kleshch V.I. et al. Carbon single-electron point source controlled by Coulomb blockade // Carbon. 2021. V.171.



## Исследование нанокompозитных пленок Cu-Si, полученных ионно-лучевым распылением, методами рентгеноструктурного анализа

И.В. Польшин<sup>1)</sup>, К.А. Барков<sup>1</sup>, Е.С. Керсновский<sup>1</sup>, В. А. Терехов<sup>1</sup>, Д. Н. Нестеров<sup>1</sup>,  
С. А. Ивков<sup>1</sup>, А. В. Ситников<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

<sup>2</sup> ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж

УДК: 538.915

Система Cu-Si представляет интерес в производстве нового типа литий-ионных аккумуляторов [1, 2], а также имеет широкий спектр технологических применений, в частности, в микроэлектронике [3] и катализе [4]. Однако при использовании таких методов, как магнетронное, электронно- и ионно-лучевое распыление, которые характеризуются высокой энергией частиц, падающих на подложку, не исключена вероятность образования метастабильных фаз и других составов при охлаждении частиц на подложке. Поэтому исследования структуры, фазового состава, электронного строения и электрических свойств пленок Cu-Si, полученных ионно-лучевым распылением очень важны.

В данной работе с помощью метода ионно-лучевого распыления составной мишени, на кремниевых подложках Si (100) марки КДБ-12 были получены пленки Cu-Si толщиной ~300 нм. Осаждение проводилось в вакуумной камере ( $10^{-6}$  Torr), заполненной Ar (чистота 99,992%) до общего давления газа  $8 \cdot 10^{-4}$  Torr. Для проведения широкого спектра исследований, образцы имеют градиент по содержанию меди, который обеспечивался кремниевыми навесками на мишени.

Анализ формирования кристаллических фаз в пленках Cu-Si проводился при помощи метода рентгеновской дифракции на приборе ДРОН 4-07 с медным источником излучения ( $\lambda$  Cu  $K_{\alpha 1,2} = 1,542 \text{ \AA}$ ). Самыми интенсивными дифракционными линиями в пленке Cu-Si при содержании меди >36 вес. % являются линии от высокотемпературных модификаций  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si и  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si. Сравнивая дифракционные линии  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si и чистой меди, мы обнаружили уширение рефлекса  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si. При помощи формулы Дебая-Шеррера, по этому уширению были рассчитаны размеры нанокристаллов, которые составили ~30 нм. Вместе с тем, полуширина рефлекса  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si практически не отличается от эталона, что может говорить о формировании кристаллитов данной фазы со средним размером более 100 нм.

Увеличение содержания Cu до ~51 вес. % приводит к росту интенсивности данных рефлексов. Однако интенсивность компоненты  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si снижается относительно  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si. Наряду с этим происходит изменение размера нанокристаллов этих высокотемпературных модификаций, а именно: увеличение до 45 нм для фазы  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si и уменьшение до ~35 нм для фазы  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si.

Рост содержания меди в пленке до ~60 вес. % приводит к увеличению содержания фазы  $\eta''$ -Cu<sub>3</sub>Si и одновременному уменьшению среднего размера её кристаллитов до ~25 нм. Вместе с тем, размер нанокристаллов, связанных с фазой  $\eta$ -Cu<sub>3</sub>Si увеличивается до ~40 нм. Дальнейший рост содержания меди в пленке до ~68 вес. % к каким-либо изменениям не приводит.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.*

1. Ahn H. J. et al. Formation and characterization of Cu-Si nanocomposite electrodes for rechargeable Li batteries // Journal of power sources. 2006. V. 163. №. 1. P. 211-214.
2. Li H. et al. The crystal structural evolution of nano-Si anode caused by lithium insertion and extraction at room temperature // Solid State Ionics. 2000. V. 135. №. 1-4. P. 181-191.
3. Liu Y. et al. Diffusion barrier performance of reactively sputtered Ta-W-N between Cu and Si // Microelectronic engineering. 2004. V. 75. №. 3. P. 309-315
4. Selamoglu N. et al. Copper-catalyzed etching of silicon by F2: Kinetics and feature morphology // Journal of applied physics. 1988. T. 64. №. 3. C. 1494-1498.

## Влияние условий синтеза на фазовый состав перспективного катодного материала для натрий-ионных аккумуляторов

О.Ю. Пономарева, С.В. Сумников, Р.Н. Васин, Е.А. Корнеева,  
Н.Ю. Самойлова

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 538.9, 546.02

Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) являются перспективными источниками тока из-за доступности натрия. Разработка эффективных катодных материалов является важной задачей для широкого распространения НИА. Классом перспективных катодных материалов для НИА являются гексацианоферраты  $\text{Na}_{2-y}\text{M}[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  (аналоги берлинской лазури, где М – катионы переходных металлов). Для успешного использования материала  $\text{Na}_{2-y}\text{Fe}[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  в реальных источниках тока значение «у» должно быть минимальным, чтобы скомпенсировать безвозвратную потерю натрия в аноде. Количество воды в структуре РВ также является важным параметром, влияющим на работу катодного материала и приводящим к постепенному падению емкости. Предварительный отжиг электрода в вакууме приводит к снижению содержания кристаллизационной воды в структуре  $\text{Na}_2\text{Fe}[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  и образованию обезвоженной ромбоэдрической фазы с наилучшими электрохимическими свойствами. Однако при температуре выше 200°C материал РВ начинает разлагаться.

В настоящей работе исследовались фазовые переходы при нагревании и охлаждении коммерческого материала РВ, синтезированного согласно патенту [1]. Кроме того, была отработана методика синтеза материала РВ в ЛНФ ОИЯИ. За основу синтеза была взята методика, изложенная в работе [2]. С помощью рентгеновской дифракции было показано, что первую стадию синтеза (кислотное разложение ферроцианида натрия  $\text{Na}_4\text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ ) можно проводить на воздухе, что делает процедуру получения РВ более простой. В инертной же атмосфере достаточно проводить только стадию дополнительного обогащения материала натрием. Морфология коммерческого и синтезированного материалов отличалась: средний размер кубических частиц синтезированного материала РВ составил около 1 мкм, что на порядок меньше размеров частиц коммерческого материала. Методом *operando* рентгеноструктурного анализа было показано, что в материале РВ с меньшим размером частиц фазовые превращения происходят при температурах на 10°C ниже, что позволяет проводить стадию дегидратации электрода при более щадящих температурах и снижает вероятность разрушения образца во время сушки. *Ex situ* рентгеноструктурный анализ материала РВ при охлаждении до – 220°C показал, что обезвоженная ромбоэдрическая фаза является стабильной в указанных условиях. В то же время в невысушенных образцах РВ происходит обратимый переход ромбоэдрической фазы в моноклинную, что нежелательно с точки зрения практического применения катодного материала. Отличия были выявлены и в характере фазовых переходов в процессе циклирования аккумуляторов на основе коммерческого и синтезированного материалов РВ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 21-12-00261).

1. Brant W. et al. Method of producing a sodium iron(II)-hexacyanoferrate(II) material // United States Patent application publication. 2019. No:2019/0270649 A1.
2. Brant W.R., Mogensen R., Colbin S., Ojwang D.O., Schmid S., Haggstrom L., Ericsson T., Jaworski A., Pell A.J., Younesi R. Selective Control of Composition in Prussian White for Enhanced Material Properties // Chem. Mater. 2019. V. 31. P. 7203–7211.

## Структура и магнитные характеристики пленок Pt/Co/MgO и WTe<sub>2</sub>/Pt/Co/MgO

*А.В. Приходченко<sup>1</sup>, М.А. Кузнецова<sup>1</sup>, А.В. Огнев<sup>1</sup>, И. Ванг<sup>2</sup>, А.Г. Козлов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Лаборатория пленочных технологий, Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

<sup>2</sup>Даляньский технологический университет,

Лаборатория спиновых квантовых материалов и устройств, Далянь

УДК: 538.955

В последние годы в области спинтроники интенсивно исследуются ультратонкие пленки, включающие в свой состав дихалькогениды переходных металлов. Такие материалы могут найти применение в области создания энергоэффективной магнитной памяти благодаря своим богатым спин-зависимым свойствам [1]. Перспективы разработки сред хранения и записи информации построенных на эффекте передачи спин-орбитального момента (SOT) стимулируют поиск структур и материалов с сильной перпендикулярной магнитной анизотропией и большим SOT эффектом.

В работе исследовались магнитные тонкие пленки Pt/Co/MgO и влияние на их структурные и магнитные свойства подслоя дителлурида вольфрама. Объектами исследования являлись две серии образцов: Pt(d<sub>Pt</sub>)/Co/MgO и WTe<sub>2</sub>/Pt(d<sub>Pt</sub>)/Co/MgO, полученных методом магнетронного распыления на подложку SiO<sub>2</sub>. Толщины слоев определялись с помощью кварцевого измерителя толщин и методом рентгеновской рефлектометрии. Определены шероховатость интерфейсов и плотность материалов. Магнитные параметры исследованы по петлям гистерезиса полученным с помощью вибромагнетометра. Построены зависимости магнитного момента насыщения, коэрцитивной силы, энергии эффективной анизотропии от толщины слоя Pt. Показано существенное влияние подслоя дителлурида вольфрама на структуру и магнитные свойства.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание №FZNS-2023-0012).*

1. Qidong Xie, et al. Giant Enhancements of Perpendicular Magnetic Anisotropy and Spin-Orbit Torque by a MoS<sub>2</sub> Layer // *Advanced Materials*. 2019. V.31.

**Численное моделирование малоуглового рассеяния фрактальных объектов  
при помощи быстрого преобразования фурье  
К.А. Пшеничный<sup>1</sup>, Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, О.Д. Шнырков<sup>1,2</sup>, С. В. Григорьев<sup>1</sup>**

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 538.9

В работах [1,2] представлены исследования, связанные с определением фрактальной размерности объектов в двумерном пространстве. В первой работе представлен способ определения фрактальной размерности модельных объектов, во второй - экспериментальное доказательство логарифмической фрактальной структуры реальных деревьев. Для определения фрактальной размерности объекта необходимо использовать численное моделирование процесса малоуглового рассеяния света в двумерном пространстве или проникающего излучения (нейтронов или рентгена) в трехмерном пространстве.

Этот процесс можно разбить на несколько этапов. Первое, построение модели в виде численных значений двумерной матрицы ( $n \times n$ ). Второе, быстрое преобразование фурье от численных значений модели (матрицы) и возведение в квадрат модуля значений (получение интенсивности). Третье, азимутальное усреднение интенсивности для получения кривой рассеяния. Этот подход применим как для 2-мерного, так и для 3-мерного пространств, т.е. для моделирования рассеяния на объемном объекте.

В качестве примера трёхмерной модели фрактальной глобулы была предложена фрактальная кривая Гильберта. Для численной реализации кривой Гильберта нами был написан алгоритм построения на языке C++. В качестве пространства построения был выбран трехмерный комплексный массив с типом числа double с возможностью его записи в файл. Сами элементы фрактала были построены значением 1.0 в действительной части трехмерного массива. Кривая Гильберта является теоретической кривой и заполняет все пространство без промежутков. Поэтому для разнесения в пространстве остовов поворота кривой был выбран коэффициент равный  $k=2$ , умножаемый на координаты поворота кривой. Кривая строилась линиями от одной координаты до другой. Таким образом кривая Гильберта представляет линию с поворотами толщиной в 1 пиксель и пустыми промежутками в 1 пиксель. Далее к фрактальной модели применялось трехмерное Быстрое Преобразование Фурье (БПФ) с выделением интенсивности (квадрат модуля БПФ) и его последующим сферическим усреднением для получения зависимости  $I(q)$ , где  $I$  — интенсивность,  $q$  — радиус-вектор в сферических Фурье-координатах. При преобразовании из декартовых в сферические координаты, для получения межпиксельных значений интенсивности была использована трilinearная итерполяция, которая необходима из-за дискретности пространства. Усреднение осуществлялось проходом по всему диапазону азимутальной и зенитальной переменных с шагом  $\text{atan}(1\text{pix}/q)$  и для каждого значения  $q$  (проходящему от 0 до границы пространства с шагом в 1 пиксель), находилось среднее значение интенсивности  $I$ .

Для визуализации построенного фрактала, была использована программа, написанная на языке C++ с интерфейсом Qt, которая дает двухмерное изображение объекта трехмерного массива, на выбранной координате  $z$ . Программа также суммирует двумерные изображения вдоль оси  $z$  и строит двухмерный график суммы по всем координатам  $z$ .

Программа доступна для скачивания по ссылке: <https://github.com/tre3k/fractal>

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-12-00188.*

1. Григорьев С.В., Шнырков О.Д., Пшеничный К.А., Пустовойт П.М., Яшина Е.Г. Модель фрактальной организации хроматина в двумерном пространстве // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2023. vol. 163. N 3. P.1-11.
2. Grigoriev S.V., Shnyrkov O.D., Pustovoit P.M., Iashina E.G., Pshenichnyi K.A. Experimental evidence for logarithmic fractal structure of botanical trees // Physical Review E. 2022. V.105. P.044412.

## Причины охрупчивания термоэлектрика PbTe с точки зрения химического связывания

*А.Д. Радина, И.В. Чепкасов, А.Г. Квашинин*

*Сколковский институт науки и технологий, Москва*

УДК: 538.9, 537.323

Теллурид свинца (PbTe) – материал, проявляющий термоэлектрические свойства, благодаря которым он нашёл своё применение во многих электронных устройствах, в частности, в датчиках, используемых в газопроводах в удалённых областях, куда невозможно провести линии электропередач. Свойства данного материала могут быть улучшены при помощи легирования, однако было отмечено [1], что даже незначительные концентрации примеси существенно сказываются на механических свойствах PbTe, а значит и на его сроке эксплуатации. Так, в случае легирования примесями n-типа материал становится более хрупким, однако в данном случае изменения незначительны. В то время, как в случае легирования примесями p-типа материал становится почти в два раза хрупче.

С целью установления причин столь значительных изменений были проведены квантовохимические расчёты, реализованные в рамках программного пакета VASP, которые позволили проанализировать перераспределение электронной плотности, вызванное лигатурой. В дальнейшем, при помощи программного пакета LOBSTER были проанализированы связи, возникающие между атомами примеси и атомами PbTe.

Таким образом, было выявлено [2], что взаимодействие атома Te с примесями p-типа, такими как Na и K, аналогично взаимодействию, возникающему в плавиковой кислоте – происходит формирование сильной связи, однако при сообщении энергии, данная связь легко разрушается. В то время, как в случае легирования примесями n-типа, такими как Bi и Sb, электроны примеси занимают антисвязывающие орбитали и ослабляют связь.

В ходе данной работы были выявлены причины изменения механических свойств PbTe в ходе легирования различными примесями.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-72-30043.*

1. Male J.P., Abdellaoui L., Yu Y., Zhang S., Pieczulewski N., Cojocaru-Mirédin O., Scheu C., Snyder G.J. Dislocations Stabilized by Point Defects Increase Brittleness in PbTe // *Advanced Functional Materials*. 2021. Vol. 31. No. 52. P. 2108006.
2. Chepkasov I.V., Kvashnin A.G., Radina A.D., Matsokin N.A., Jalolov F.N., Kvashnin D.G., Oganov A.R., Dashevsky Z. Origin of brittle behavior of doped PbTe-based thermoelectric materials // *Applied Physics Letters*. 2024. Vol. 124. No. 2. P. 022104.

## Исследование механических свойств и структурных особенностей сплавов Mg-Zn-Gd-Zr при помощи ультразвукового резонанса

*М.В. Розаева, Д.А. Калганов, Е.А. Найпак, М.В. Дорогов, А.Е. Романов*

*Университет ИТМО, Санкт-Петербург*

УДК: 539.3, 538.9

Работы по изучению тройных соединений магния Mg-Zn-RE (RE – редкоземельный элемент) остаются актуальными более полувека [1-8]. С развитием экспериментальной исследовательской техники и вычислительных методов фазовая диаграмма для этой системы дополнялась данными о квазикристаллических [1,4] и кристаллических фазах [1,2,5-6]. Основная цель большинства исследований этих фаз заключалась в создании нового лёгкого, прочного и, в то же время, пластичного конструкционного материала. Увеличение критических напряжений сдвига в базальных и призматических плоскостях и "включение" дополнительных систем скольжения гексагональной структуры атомами Zn-RE приводит к увеличению пластичности изначально хрупких твёрдых растворов  $\alpha$ -Mg [7]. Формирование поликристаллических материалов Mg-Zn-RE из расплава как правило происходит с образованием дисперсных фаз различного состава и обеспечивает их упрочнение за счёт усложнения дефектной структуры и множественного накопления повреждений при разрушении [8]. Характерным свойством лигатуры Mg-Zr, как добавки при производстве сплавов магния, является высокая способность к усложнению зёрновой структуры [9]. Благодаря размерному соответствию и высокому фактору ограничения роста система Mg-Zr позволяет реализовать мелкозернистость материала без дополнительной обработки. Одним из методов, совмещающим исследования механических свойств и структурных особенностей материалов, является измерение амплитуды и частоты резонанса продольной моды в образце, использованное в данной работе.

Образцы в системе Mg-Zn-Gd-Zr были получены из расплава в соответствии с различными температурными профилями с последующей низкотемпературной обработкой (старением) и без неё. Для исследуемых образцов установлено значение плотности  $\rho = 1922 \text{ кг/м}^3$ , характерные значения модуля продольной упругости (первая гармоника на частоте  $f = 100 \text{ кГц}$ , длина образца  $l = 25 \text{ мм}$ )  $E = 39,5 \text{ ГПа}$  и внутреннего трения  $\delta = 0,0015$ .

Проведённые исследования позволяют говорить об изменении структуры материала после низкотемпературной обработки сопровождающемся композиционным упрочнением.

*Работа выполнена при поддержке Университета ИТМО в рамках ПО НИОКТР 423022.*

1. Zselyan B.N., Saldau P.Y., Afanasev S.K. Magnesium-rich part of the magnesium-yttrium-zinc phase diagram // Russian Metallurgy (Metally). 1968. No. 6. P. 191-194.
2. Padezhnova E.M., Melnik E.V., Milievskii R. Investigation of the Mg-Zn-Y System // Russian Metallurgy (Metally). 1982. No. 4. P. 185-188.
3. Kaminskii V.V. et al. Kinking in LPSO Mg-Zn-Y Alloys and Other Layered Materials // Reviews on Advanced Materials and Technologies. 2022. V. 4. No. 2. P. 15-31.
4. Luo Z. et al. Quasicrystals in as-cast Mg-Zn-RE alloys // Scripta metallurgica et materialia. 1993. V. 28. No. 12. P. 1513-1518.
5. Deng D.W. et al. Crystal structure of the hexagonal  $\text{Zn}_3\text{MgY}$  phase // Journal of alloys and compounds. 2004. V. 373. No. 1-2. P. 156-160.
6. Hamaya A. et al. Experimental Study on Phase Equilibria in the Vicinity of X, W and H Phases in the Mg-Zn-Y Ternary System // Materials Transactions. 2013. V. 54. No. 5. P. 641-646.
7. Suzuki M. et al. Strengthening effect of Zn in heat resistant Mg-Y-Zn solid solution alloys // Scripta Materialia. 2003. V. 48. No. 8. P. 997-1002.
8. Wang J. et al. Strengthening mechanisms, hardening/softening behavior, and microstructure evolution in an LPSO magnesium alloy at elevated temperatures // Materials Characterization. 2023. No. 203. P. 113066.
9. Sun M. et al. Recent advances in the grain refinement effects of Zr on Mg alloys: a review // Metals. 2022. V. 12. No. 8. P. 1388.

## Структурное состояние и обменные взаимодействия системы твердых растворов литий никель/кобальт фосфатов

П.Е. Ромашко<sup>1,2</sup>, Н.В. Урусова<sup>2,3</sup>, А.Н. Пирогов<sup>1,2</sup>, М.А. Сёмкин<sup>1,2,4</sup>

<sup>1</sup>ИФМ УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>ИЕНиМ УрФУ, Екатеринбург

<sup>3</sup>ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 538.91

Методом упругого когерентного рассеяния нейтронов выполнено одновременное изучение эволюции параметров структурного состояния и характера обменных взаимодействий в системе твердых растворов замещения  $\text{Li}(\text{Ni},\text{Co})\text{PO}_4$  [1-3].

В исследуемом интервале концентраций никеля/кобальта оливин-структуры (пространственная группа  $R\bar{3}m$ , параметр  $a > b > c$ ) и температур от 3 К и менее 21 К, в основном состоянии формируются антиферромагнитные структуры (АФМ) спинов  $\text{Ni}^{2+}/\text{Co}^{2+} = M$  упорядоченных в плоскости  $bc$  оливин-структуры с сильными косвенными АФМ взаимодействиями между ближайшими соседями первой координационной сферы цепочек  $M1(4c)\text{-O}(8d)\text{-}M2(4c)$  и  $M3(4c)\text{-O}(8d)\text{-}M4(4c)$  внутри двух слоев, разнесенных на удвоенную величину  $2\varepsilon$  с координатами  $x/a = 1/4 \pm \varepsilon$  и  $x/a = 3/4 \pm \varepsilon$  в каждом слое и слабыми ферромагнитными взаимодействиями следующих за ближайшими соседями между слоями  $M1(4c)\text{-O}'(4c)\text{-P}(4c)\text{-O}''(4c)\text{-}M3(4c)$ ,  $M2(4c)\text{-O}''(4c)\text{-P}(4c)\text{-O}'(4c)\text{-}M4(4c)$  и слабым АФМ взаимодействием  $M2(4c)\text{-O}(8d)\text{-P}(4c)\text{-O}''(4c)\text{-}M3(4c)$  и тенденцией монотонного роста параметров  $a$ ,  $b$ ,  $c$  элементарной ячейки при увеличении доли кобальта во всем интервале замещений и нерегулярным характером изменения величины  $\varepsilon$ .

Показано, что наибольшие изменения испытывает параметр  $a$ , причем положение магнитоактивных ионов вдоль оси  $b$  – фиксировано кристаллографической симметрией позиции  $4c$  для  $M1$ :  $(1/4 + \varepsilon; 1/4; 1 - \delta)$ ;  $M2$ :  $(3/4 + \varepsilon; 1/4; 1/2 + \delta)$ ;  $M3$ :  $(3/4 - \varepsilon; 3/4; \delta)$ ; и  $M4$ :  $(1/4 - \varepsilon; 3/4; 1/2 - \delta)$ , где  $\varepsilon \approx 0.025$ ;  $\delta \approx 0.015$ , т. е. сохраняется прямая связь величины  $y/b = 1/4 \pm 1/2$  и изменений параметра  $b$  с долей кобальта в образце. Кроме того, положения ионов  $\text{Ni}/\text{Co}$  участвующих в обменных взаимодействиях не зависит от величины  $\delta$  и остается фиксированным по координате  $z/c = 1/2$  от периода решетки вдоль  $c$  оси, и также прямо пропорционально.

Таким образом, при увеличении концентрации кобальта увеличиваются все три параметра кристаллической решетки системы растворов замещения, следует ожидать уменьшение компонент обменных взаимодействий в направлениях  $b$  и  $c$  за счет увеличения расстояний между соседними магнитоактивными атомами, и нетривиальную зависимость в направлении  $a$ , для которого нужно учитывать степень отклонения ближайших катионов от выделенного слоя на величину  $(\pm\varepsilon)$ , и учитывать угол сильных АФМ взаимодействий с анионом кислорода в позиции  $(8d)$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания МИНОБРНАУКИ России (шифр «Поток» Г.р. № 122021000031-8).*

1. Semkin M.A., Urusova N.V., Hoser A., Neznakhin D.S., Pirogov A.N. Models of Ni- and Co-ion occupation in  $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{PO}_4$  orthophosphate and its magnetic structure // Journal of Physics: Condensed Matter. 2022. V.34. P.165801.
2. Semkin M.A., Urusova N.V., Beskrovnyi A.I., Volegov A.S., Nosov A.P, Park J.-G., Lee S., Pirogov A.N/ Magnetic phase transitions in the  $\text{LiNi}_{0.9}\text{M}_{0.1}\text{PO}_4$  ( $M = \text{Mn}, \text{Co}$ ) single crystals // Physica Scripta. 2022. V.97. P. 025707.
3. Semkin M.A., Urusova N.V., Hoser A., Beskrovnyi A.I., Pirogov A.N., Magnetic Structures of the  $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$  Crystal // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2021. V.15. P. 890.

## Структурные, экранирующие свойства композиционных материалов на основе полиэтилена и вольфрама

*А.А. Роткович, А.А. Бондарук, С.А. Герман, Т.И. Зубарь, А.В. Труханов, Е.С. Дашкевич, Д.И. Тишкевич*

*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск*

УДК:669.227, 538.9

Ионизирующее излучение остается одной из наиболее серьезных проблем для здоровья человека и окружающей среды [1]. Электронные компоненты, приборы и оборудование играют важную роль во многих сферах жизни. Однако, одной из главных угроз, которым они подвергаются, является воздействие ионизирующего излучения, а именно высокоэнергетического гамма-излучения. Применение специальных материалов – экранов, способных поглощать или ослаблять радиацию, является важным мероприятием для обеспечения надежной работы и защиты от негативных последствий [2].

Для изготовления композиционных материалов использовались два компонента: порошок вольфрама марки ПВЧ с чистотой 99,99% и порошок линейного полиэтилена высокого давления (ЛПЭВД) марки UR644 (LOTTE Chemical, South Korea). Массовое содержание вольфрама варьировалось от 0 до 70%. Образцы были изготовлены методом термопрессования и пронумерованы в соответствии с текстом: 0W, 10W, 30W, 50W, 70W (где "0, 10, 30, 50, 70" = весовое содержание W в системе).

Моделирование параметров эффективности экранирования от гамма-излучения выполнялось в ПО Phy-X/PSD для линейного коэффициента ослабления (ЛКО), слоя половинного ослабления (СПО) и средней длины свободного пробега (ДСП). Указанные расчеты проводились в диапазоне энергий 0,8-2,5 МэВ для источника  $Co^{60}$ .

Эффективность экранирования возрастает с увеличением значений ЛКО. Наблюдается, что при увеличении энергии излучения от 0,826 до 2,506 МэВ значения ЛКО уменьшаются, и экранирующие свойства исследуемых образцов ЛПЭВД-W снижаются, особенно при действии энергии 1,25 МэВ. Например, образец W70 имеет значения ЛКО 0,239 и 0,158  $см^{-1}$  при энергиях излучения 0,8 и 1,25 МэВ, соответственно, что фактически на 51% меньше. Образец с содержанием W в 70% обладает наибольшими значениями ЛКО в сравнении с другими образцами.

Аналогичные результаты наблюдаются и при моделировании СПО. Композиционные материалы имеют относительно низкую плотность, поэтому для ослабления более высоких энергий требуются образцы с большей толщиной. Следовательно, данные материалы рекомендуется использовать при энергии гамма-квантов до 1,25 МэВ, так как при дальнейшем увеличении энергии излучения необходимо значительно увеличивать толщину образцов. Однако, введение порошка W до 70% значительно снизило значения СПО. Например, значения СПО при энергии излучения 1,25 МэВ для образца из чистого полиэтилена W0 и образца W70 составляют 10,85 и 3,53 см, соответственно. В результате отмечается уменьшение значений СПО в 3,07 раза. Подтверждается, что результаты моделирования параметра ДСП коррелируют с результатами моделирования СПО. Кроме того, отмечается, что в составе композиционных материалов системы ЛПЭВД-W особенно выделяется образец W70 своими высокими экранирующими характеристиками, поскольку обладает значительно меньшими значениями ДСП. В частности, максимальные значения ДСП для образцов W0 и W70 составляют 25,327 и 8,546 см, соответственно.

В целом, композиционные материалы системы ЛПЭВД-W с загрузкой наполнителя 70% в большей степени подходят для создания экранов радиационной защиты за счет своих высоких экранирующих свойств и улучшенных массогабаритных параметров.

1. Sahin N. et al. Low cost radiation shielding material for low energy radiation applications: Epoxy/Yahyali Stone composites // Prog. Nucl. Energy. 2021. V. 135. P. 103703.
2. AbuAlRoos N. J. et al. Conventional and new lead-free radiation shielding materials for radiation protection in nuclear medicine: A review // Radiat. Phys. Chem. 2019. V. 165. P. 108439.



## Изучение слабых кросс-корреляций в малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов

*В.В. Рунов*

*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.9

Дан обзор работ по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов [1-6], характерной особенностью которых является измерение и анализ магнитно-ядерного интерференционного рассеяния (МЯ), т.е. произведение ядерной ( $A$ ) и магнитной ( $B$ ) амплитуд рассеяния, ( $AB$ ). Цель обзора - показать высокую эффективность и чувствительность метода при решении определенных задач, которая основана на возможности изучать магнитно-ядерное контрастирующее рассеяние (кросс-корреляции) на фоне общего, существенно более сильного, магнитного или ядерного, или того и другого. В эксперименте интерференционное рассеяние  $\Delta(q)$  измеряют как разность в интенсивности рассеяния с поляризацией нейтронов по/против поля, прикладываемого к образцу, т.е.  $\Delta(q) = I^+(q) - I^-(q) \approx P(AB)$ , где  $P$  – поляризация прошедших образец нейтронов. Наблюдение МЯ интерференционного рассеяния однозначно свидетельствует о наличии в изучаемом материале намагниченных областей характерного масштаба.

1. Gordeev G., Okorokov A., Runov V., Runova M., Toperverg B., Brulet A., Kahn R., Papoular R., Rossat-Mignod J., Gladli H., Eckerlebe H., Kampmann R., Wagner R. // *Physika B*. 1997. 234-2366, P.837-838.
2. Рунов В.В., Ильин Д.С., Рунова М.К., Раджабов А.К. Изучение ферромагнитных корреляций, обусловленных примесями в немагнитных материалах, методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов // *Письма в ЖЭТФ*. 2012. Т.95. С.530-533.
3. Рунов В.В., Скоробогатых В.Н., Рунова М.К., Сумин В.В. Small Angle Polarized Neutron Scattering Study of the Mesostucture of Phase Precipitates in the Steel P91 after Heat Treatment // *ФТТ*. 2014. Т.56(1). С.62-67.
4. Ershenko E., Bobyl A., Boiko M., Zubavichus Y., Runov V., Trenikhin M., Sharkov M. Fe<sub>3</sub>P impurity phase in high-quality LiFePO<sub>4</sub>: X-ray diffraction and neutron-graphical studies // *Ionics*. 2017. Т.23, №9. С.2293-2300.
5. Рунов В.В., Бугров А.Н., Смыслов Р.Ю., Копица Г.П., Рунова М.К., Васильев Б.В., Попова Е.Н., Кириллова С.А., Феоктистов А., Пипич В. Мезоструктура композиционных материалов на основе сегментного полиуретанимида, содержащего наночастицы ферритов // *Журнал неорганической химии*. 2021. Т.66. №2. С.1-13.
6. Рунов В.В., Бугров А.Н., Смыслов Р.Ю., Копица Г.П., Иванькова Е.М., Павлова А.А., Феоктистов А. Магнитное рассеяние нейтронов в восстановленном оксиде графена // *Письма в ЖЭТФ*. 2021. V.113. N. 6. P.385-389.

## Определение характеристик каталитических наночастиц (Me)Pd (Me=Cu, Ag)

*Я. Сазонова<sup>1</sup>, Н.Н. Губанова<sup>1,2</sup>, В.А. Матвеев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург

УДК: 538.91

Катализаторы широко применяются в химической промышленности и научных исследованиях, поэтому актуальной задачей является улучшение их характеристик. Активность катализатора зависит от природы металла и количества активных центров на единицу площади его поверхности. Активные центры представляют собой атомы и/или группы атомов катализатора, располагающиеся на поверхности и активно участвующие в процессе катализа. В тоже время, атомы внутри объема катализатора не взаимодействуют с реагентами и играют роль носителя активных центров. Целью представленной работы было получение и определение характеристик каталитических материалов на основе биметаллических наночастиц (Me)Pd (Me=Cu, Ag).

Наночастицы металлов были синтезированы методом «мокрой химии». Медные наночастицы получались путем восстановления меди из водного раствора CuSO<sub>4</sub>[1], для получения серебряных наночастиц использовали реакцию восстановления металла из спиртового раствора AgNO<sub>3</sub>[2]. Получаемые наночастицы Cu и Ag использовались в качестве носителей, на них из спиртового раствора PdCl<sub>2</sub> осаждался Pd. В дальнейшем биметаллические наночастицы (Me)Pd (Me=Cu, Ag) смешивались с проводящей сажей и полимером, образуя композитный каталитический материал.

Структура биметаллических наночастиц (Me)Pd (Me=Cu, Ag), была исследована методами рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии. Размеры кристаллитов оценивались по данным рентгеновской дифракции и сведены в табл. 1.

Таблица 1. Размеры кристаллов в биметаллических наночастицах (Me)Pd (Me=Cu, Ag).

(hkl)	(Cu)Pd		(Ag)Pd	
	Cu	Pd	Ag	Pd
	D, нм		D, нм	
(111)	59±2	11±1	25±1	12±1
(200)	35±2	60±1	14±1	7±1
(220)	35±2	72±1	17±1	9±1

Каталитическая активность косвенно оценивалась по результатам циклической вольт-амперометрии. Согласно полученным ЦВА-граммам большую каталитическую активность проявляют образцы композитов, содержащих биметаллические наночастицы: (Cu)Pd, в которых медь была получена в среде глицерина, и (Ag)Pd, в которых серебро осаждалось в спиртовой среде гидразин гидратом.

1. Gawande M. B. et al. Cu and Cu-based nanoparticles: synthesis and applications in catalysis // Chemical reviews. 2016. Т. 116, №. 6. P. 3722-3811.

2. Patil R. S. et al. One-pot synthesis of PVA-capped silver nanoparticles their characterization and biomedical application // Advances in natural sciences: nanoscience and nanotechnology. 2012. Т. 3. №. 1. P. 015013.

## Создание экспериментального стенда для получения поляризованных нейтронов на реакторе ИР-8

Е.О. Серов<sup>1</sup>, А.И. Калюканов<sup>1</sup>, С.С. Агафонов<sup>1</sup>, П.С. Савченков<sup>1</sup>, А.В. Рогачев<sup>1</sup>, В.И. Боднарчук<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 543.444, 538.97

Использование пучков поляризованных нейтронов в исследованиях конденсированных сред существенно расширяет круг задач, решаемых на станциях нейтронного рассеяния. Опыт международных нейтронных центров показывает необходимость создания мод с использованием поляризованных нейтронов для всех приборов, на базе которых реализуются традиционные методы исследований с использованием рассеяния нейтронов (дифракция [1], малоугловое рассеяние нейтронов [2], рефлектометрия [3] и др.). Поляризованные нейтроны являются незаменимым инструментом для исследования магнитных структур.

До настоящего времени в составе нейтронографического комплекса на реакторе ИР-8 не было установок с поляризованными нейтронами. На реакторе ИР-8 создан экспериментальный стенд, позволяющий работать с поляризацией нейтронов. Стенд позволит отработать методику получения поляризованного пучка нейтронов и даст опыт обработки экспериментальных данных. Предполагается, что на стенде будет реализован метод нейтронной радиографии с использованием поляризованных нейтронов. Стенд включает в себя основные узлы: поляризатор (анализатор), спин-флиппер, систему управления, узел образца и детектор. В течение 2023 г. была закончена сборка основных узлов стенда. В 2024 г. будут проведены первые эксперименты для получения характеристик стенда.

1. Зобкало И.А. Дифракция поляризованных нейтронов в исследованиях на монокристаллах // Кристаллография. 2021. Т. 66. №. 2. С. 214-229.
2. Авдеев М.В., Аксенов В.Л. Малоугловое рассеяние нейтронов в структурных исследованиях магнитных жидкостей // Успехи физических наук. 2010. Т. 180. №. 10. С. 1009-1034.
3. Никитенко Ю.В., Сыромятников В.Г. Рефлектометрия поляризованных нейтронов. 2014.

## Особенности строения допированных литием и фтором флюоритоподобных молибдатов $\text{La}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$ в интервале температур 90–1050 К

*Е.В. Сидорова, Т.А. Сорокин, В.Б. Кварталов, А.М. Антипин, Н.Е. Новикова, Н.И. Сорокина, Е.С. Смирнова, О.А. Алексеева*

*Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва*  
УДК:548, 538.9

Редкоземельные молибденсодержащие оксиды  $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  ( $\text{Ln} = \text{La-Gd}$ ,  $\delta = 0-0.5$ ) [1] с кубической флюоритоподобной структурой (пр.гр.  $Pn-3n$ ) являются перспективными материалами для электродов симметричных твердооксидных топливных элементов [2]. Катионы молибдена в этих фазах меняют степень окисления при изменении парциального давления кислорода, кристаллическая структура соединений сохраняется. Вследствие переменной валентности молибдена содержание кислорода в соединениях  $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  изменяется в пределах  $\delta = 0-0.5$ . В структуре  $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  экспериментально установлено присутствие сверхстехиометрического кислорода в октаэдрических полостях (интерстициях) [3]. Его количество  $\delta$  и наличие вакансий в базовой анионной подрешетке влияют на механизм анионной составляющей проводимости флюоритоподобных соединений  $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  – при уменьшении величины  $\delta$  смешанный интерстиционно-вакансионный механизм становится вакансионным. Таким образом, кислородную составляющую проводимости фаз  $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  можно регулировать либо изменением парциального давления кислорода во внешней среде, либо с помощью гетеровалентного допирования редкоземельных катионов  $\text{Ln}$  или молибдена.

В настоящей работе в широком диапазоне температур исследовались атомная структура редкоземельных молибдатов, совместно допированных литием и фтором и имеющих номинальный состав  $\text{LiLa}_4\text{Mo}_3\text{O}_{15}\text{F}$ .

Соединение было получено в виде моно- и поликристаллов и охарактеризовано методами рентгеновского фазового, элементного, структурного анализа, масс-спектрометрии, термогравиметрии, ДСК, импеданс-спектроскопии.

Рентгеноструктурный анализ, проведенный при 90, 293, 600, 1050 К при повышении температуры и при 600 и 293 К при понижении температуры, показал, что исследуемые легированные литием и фтором кристаллы  $\text{La}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$  имеют кубическую структуру (пр. гр.  $Pn-3n$ ). Установлено вхождение атомов  $\text{Li}^+$  в позиции атомов  $\text{La}^{3+}$ , атомов  $\text{F}^{-1}$  в позиции атомов  $\text{O}^{-2}$ . Полученная по значениям заселенности кристаллографических позиций атомов  $\text{La}(\text{Li})$  и  $\text{Mo}$  катионная структурная формула исследованного монокристалла  $\text{Li}_{0.42}\text{La}_{4.58}\text{Mo}_3$  хорошо согласуется с данными масс-спектрометрии. Катионный состав в структуре сохраняется во всем диапазоне температур 90–1050 К, а анионный состав с ростом температуры изменяется. При температуре выше 600 К из анионных позиций (межузельной и основных кристаллографических) начинают уходить атомы фтора. Структура кристаллов становится более совершенной. Химическая формула исследованных монокристаллов при температуре 1050 К и температурах 600 и 293 К при понижении температуры –  $\text{Li}_{0.42}\text{La}_{4.58}\text{Mo}_3\text{O}_{15.60\pm\delta}\text{F}_0$ .

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

1. Voronkova V.I., Leonidov I.A., Kharitonova E.P. et al. Oxygen ion and electron conductivity in fluorite-like molybdates  $\text{Nd}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16}$  and  $\text{Pr}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16}$ // J. Alloys Compd. 2014. V. 615. P. 395–400.
2. Lyskov N.V., Kotova A.I., Petukhov D.I. et al. A new electroactive and stable electrode based on praseodymium molybdate for symmetrical SOFC // Russ. J. Electrochem. 2022. V. 58. №1. P. 989–997.
3. Antipin A.M., Sorokina N.I., Alekseeva O.A. et al. Crystal Structure of Fluorite-like Compound Based on  $\text{Nd}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16}$  with Lead Partly Substituting for Neodymium.// Acta Cryst. B. 2015. V. 71. № 2. P. 186–193.

## Исследование магнитной структуры соединений $Mn_{1-x}Rh_xSi$

*Д.О. Сканченко<sup>1,2</sup>, В.Н. Краснорусский<sup>1</sup>, Е.В. Алтынбаев<sup>1,2,3</sup>, Ю. Ке<sup>4</sup>, Zh. Xie<sup>4</sup>,  
И. Алферьев<sup>3</sup>, А.В. Боков<sup>1</sup>, З.Н. Волкова<sup>1,5</sup>, Д.А. Саламатин<sup>1</sup>, А.В. Семенов<sup>1,6</sup>, В.А. Сидоров<sup>1</sup>,  
А.П. Геращенко<sup>1,5</sup>, В.В. Бражкин<sup>1</sup>, А.В. Цвященко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>3</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>4</sup>Dongguan Research Department, Institute of High Energy Physics (IHEP),  
Chinese Academy of Sciences (CAS), Dongguan

<sup>5</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

<sup>6</sup>Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН, Москва

УДК: 538.9

Проведено исследование магнитной структуры соединений  $Mn_{1-x}Rh_xSi$  с  $x = 0,0125, 0,02, 0,025$  и  $0,05$  методами магнитометрии,  $^{29}Si$  ЯМР и малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Эти соединения, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20 как и  $Mn_{1-x}Rh_xGe$  [1]. Отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов в данной кристаллической структуре, как правило, приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мория (ДМ) и образованию гомокиральной магнитной спирали [2, 3]. Исследования стабильности геликоидальной магнитной структуры в квазибинарных соединениях со структурой типа B20, в зависимости от электронной концентрации и величины постоянной ячейки, являются актуальными, в том числе с точки зрения возможного применения данных материалов в области спинтроники и магноники. Замена 3d-металлов на 4d-элементы является одним из способов изменения указанных параметров, и приводит к неожиданным и значимым с научной точки зрения результатам [4]. Одним из таких 4d-элементов является Rh и образующееся квазибинарное соединение со структурой типа B20 –  $Mn_{1-x}Rh_xSi$  ( $x = 0,0125, 0,020, 0,025$ ).

Добавление 4d металла вместо 3d оказывает сильное воздействие на электронную подсистему  $MnSi$ . Среди основных особенностей можно отметить существенное расширение области существования А-фазы (даже для состава  $x = 0,020$ ), как по температуре, так и по магнитному полю: А-фаза возникает сразу после перехода в однодоменное состояние и простирается от  $T_c$  вплоть до 4 К, а также появление высокотемпературного магнитного перехода  $\sim 200$  К в  $Mn_{0,975}Rh_{0,025}Si$ , не наблюдавшегося ранее при добавлении Fe или Co.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00008)*

1. Tsvyashchenko A.V. et al. High-pressure synthesis of  $RE_6Cu_{23}$  compounds ( $RE \equiv Tb, Dy, Yb, Lu$ ) // J. Less-Common Met. 1984. V. 99. No. 2. P. L9–L11.
2. Dzyaloshinskii I.E. et al. Theory of helicoidal structures in antiferromagnets // J. Exp. Theor. Phys. 1964. V. 19. No.4. P. 1420-1437.
3. Bak P., Jensen M.H. et al. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in  $MnSi$  and  $FeGe$  // J. Phys. C Solid State Phys. 1980 V. 13. No. 31 P. L881–L885.
4. Skanchenko D.O. et al. Split of the magnetic and crystallographic states in  $Fe_{1-x}Rh_xGe$  // J. Alloys Compd. 2023. V. 935. No. 2. 167943.

## Установка гидростатического давления для спектрометра малоуглового рассеяния нейтронов «ЮМО»

*В.В. Ской, П.К. Утробин, А.Х. Исламов, Т.Б. Петухова, О.И. Иваньков, А.И. Куклин*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

УДК: 620.179.155.5, 538.9

Одним из преимуществ, предоставляемых использованием метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) для структурных исследований в физике конденсированного состояния, является высокая проникающая способность тепловых нейтронов. Эта ключевая особенность позволяет применять ряд конструкционных материалов для создания систем окружения образца, в частности, камер высокого гидростатического давления.

Установки давления различных конструкций успешно применялись на спектрометре МУРН ЮМО, расположенной на реакторе ИБР-2, с начала 1990-х гг. Первая установка давления представляла собой ручной гидравлический пресс, развивающий усилие до 100 кН. Жидкий образец помещался в ячейку высокого давления, изготовленную из титаноциркониевого сплава, выдерживающую давление до 10 кбар. Давление контролировалось при помощи манометра с точностью до 0.03 кбар. Температура ячейки и образца изменялась в пределах от 10 до 80°C путем циркуляции воды по петле, соединяющей термостат с измерительной ячейкой [1]. С применением этой установки были изучены фазовые переходы в мицеллярных растворах сурфактанта TDMAO в широком диапазоне температур, давлений и концентраций [2].

Позже благодаря возможности использования новой установки давления для волюметрических измерений одновременно с методом МУРН были определены изменения площади, приходящейся на молекулу липида DPPC при фазовых переходах под давлением [3]. Основным элементом новой установки является камера высокого давления производства фирмы Sitec (Швейцария). Давление на образце повышается путем перемещения поршня, сжимающего рабочую жидкость. Камера позволяет создавать давление до 4000 бар с точностью 2,5 – 10% (в зависимости от величины давления), определяемой по аналоговому манометру, либо при помощи цифрового датчика давления с точностью  $\pm 0.1$  бар. Жидкий образец помещается в ячейку давления – алюминиевый цилиндрический сосуд, проницаемый для тепловых нейтронов. Образец отграничен от рабочей жидкости сепаратором. Температура ячейки и образца контролируется с помощью термостата с точностью  $\pm 0.05$  °C [4].

В настоящий момент установка очередной раз модернизирована. С помощью прецизионного датчика угла поворота и электронного датчика давления показана линейность генерируемого установкой избыточного гидростатического давления от перемещения поршня в диапазоне давлений вплоть до 2 кбар. Автоматизация камеры давления и возможность удаленного управления установкой с использованием специально написанного программного обеспечения позволяют проводить измерения методом МУРН, а также в PVT-режиме с высокой точностью установления температуры и давления на образце.

1. Gorski N.I. et al. Small angle neutron scattering setup for high pressure measurements at IBR-2 // International Journal of High Pressure Research. 1995. V. 14. No.1- 3. P. 215-220.
2. Gorski N., Kalus J., Kuklin A.I., Smirnov L.S. A small-angle neutron scattering investigation of the TDMAO micelle system at high hydrostatic pressure // Journal of Applied Crystallography. 1997. V. 30. No. 5. P. 739-743.
3. Soloviov D. et al. Changes in the Area per Lipid Molecule by P–V–T and SANS Investigations // Macromolecular Symposia. 2014. V. 335. No. 1.
4. Kuklin A.I., et al. New opportunities provided by modernized small-angle neutron scattering two-detector system instrument (YuMO) // Journal of Physics: Conference Series. 2011. V. 291. No. 1.

## Магнитные свойства нанопроволок Co типа «медуза»

М.И. Собиров, А.Ю. Самардак, К.А. Рогачев, А.Ф. Шишелов, Н.А. Огнев, Г.А. Лейко,  
А.С. Самардак, А.В. Огнев

*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток*

УДК: 537.623, 53.072, 53.082.75, 537.621.5, 538.9

Наноструктуры зачастую условно делят на группы по их размерности в пространстве - нульмерные, одномерные, двумерные и трёхмерные. В частности, нанопроволоки из ферромагнитных материалов, в свою очередь, имеют ещё большую зависимость своих свойств от формы, так как на наноуровне начинает проявляться сильная анизотропия формы, в большой степени определяющая магнитное поведение исследуемых объектов. Так, лёгкая ось намагничивания в одномерных объектах как нанопроволоки, представляющих из себя цилиндры с диаметром в диапазоне 10-300 нм и соотношением сторон 1 к 10 и более, обычно направлена вдоль их длинной стороны, что определяет их потенциальное использование в качестве носителей информации высокой плотности, средств адресной доставки лекарств и борьбы с раком, элементов наноэлектроники и магнитной памяти, как биосенсоры и датчики магнитных полей [1].

Нанопроволоки Co типа «медуза» были синтезированы путем электрохимического осаждения с использованием электрохимической ячейки с раствора  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O} + \text{H}_3\text{BO}_3$ . В качестве шаблона для получения нанопроволок, была использована двухслойная пористая матрица оксида алюминия, получаемого методом модифицированного анодирования чистого алюминия в слабых кислотах [2]. Проведены морфологические и магнитные исследования синтезированных массивов нанопроволок Co типа «медуза».

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (Госзадание № FZNS-2023-0012).*

1. Moreno J.A., Bran C., Vazquez M., Kosel J. Cylindrical Magnetic Nanowires Applications // IEEE Transactions on Magnetics. 2021. V.57(4). P.1-17.
2. Masuda H. Highly ordered nanohole arrays in anodic porous alumina // Ordered Porous Nanostructures and Applications. 2005. С. 37-55.

## Исследование бразильского графита методами рентгеновской дифракции, сканирующей электронной микроскопии и синхронного термического анализа

М.В. Солонинкина<sup>1,2</sup>, Д.В. Логинов<sup>2</sup>, Н.Н. Рожкова<sup>1</sup>, С.А. Мошкалева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Карельский научный центр РАН, Петрозаводск

<sup>2</sup>Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

<sup>3</sup>Center for Semiconductor Components, State University of Campinas, Campinas

УДК: 537.9. 538.9

Большая часть органической составляющей Земли состоит из углерода, который является важным объектом – связующим звеном между различными областями химии, физики и геологии. Графит – одна из распространенных форм углерода, состоящая из слоев графена, соединенных слабыми ван-дер-ваальсовыми взаимодействиями. За счет своей уникальной атомарной структуры, и, как следствие, обладания разнообразным набором физико-химических свойств, графит широко применяется в различных областях человеческой деятельности – от изготовления красок, карандашей до использования в ядерной промышленности, электронике и медицине [1-2]. Вместе с развитием новых методов исследования материалов растет интерес к углеродсодержащим материалам, используются классические методы, включая рентгеновскую дифракцию, которая позволяет достоверно определять структуру исследуемых материалов.

В данной работе был исследован образец природного графита перерабатываемого и поставляемого компанией Nacional de Grafite, Brazil (Nacional de Grafite Ltda, Itacerperica, MG, Brazil) [3]. Образец представляет собой готовый продукт, известный на рынке и ранее использованный для получения многослойного графена [4]. Для изучения структурного состояния образца было проведено рентгенографическое исследование на автоматизированном дифрактометре ДРОН-6 в  $\text{MoK}_\alpha$ -излучении в геометрии на просвет и синхронно термический анализ на приборе STA 449 F1 Jupiter (NETZSCH) для определения фазового состава образца. Также использовалась сканирующая электронная микроскопия для изучения микроструктуры образца и определения элементного состава в его микрообъеме.

Установлено, что бразильский графит обладает орторомбической сингонией с параметрами решетки  $a = 6.7414 \text{ \AA}$ ,  $b = 2.5634 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.2534 \text{ \AA}$ . При проведении качественного рентгенофазового анализа было выявлено наличие трех фаз в образце, что подтверждается данными исследования синхронно термического анализа. Сканирующая электронная микроскопия показала, что поверхность образца обладает чешуйчатой структурой, а весовой объем примеси в микрообъеме образца не превышает 7%. По расчетам параметров ближнего порядка, структура бразильского графита близка к гексагональному графиту, в рамках погрешностей, но наблюдается резкий рост координационных чисел. Это может свидетельствовать о наличии в образце большого количества частиц нанометрового размера, которые входят в структуру образца, а также наличие изгиба (вспучивания) графеновых сеток.

1. Coetzee D. et al. Comparison of the Synthesis, Properties, and Applications of Graphite, Graphene, and Expanded Graphite // Advanced Multifunctional Materials from Fibrous Structures. Singapore : Springer Nature Singapore, 2023. P. 71-87.
2. Куприянова В.А., Бирюкова Н. В. Исторический опыт и перспективы использования графита в медицине и фармации // Современное образование: актуальные вопросы, достижения и инновации. 2020. С. 122-126.
3. Alaferdov A.V., Gholamipour-Shirazi A., Canesqui M.A., Danilov Y.A., Moshkalev S.A. Size-controlled synthesis of graphite nanoflakes and multi-layer graphene by liquid phase exfoliation of natural // Carbon. 2014. N 69. P. 525–535.
4. Nacional de graphite [Электронный источник]. – URL: [http://grafite.com/inici\\_o\\_en.asp](http://grafite.com/inici_o_en.asp) (Дата обращения: 19.01.2024).



## Топологические дефекты в жидкокристаллических пленках

*Н.А. Спириденко, К.Д. Бакланова, П.В. Долганов*

*ФГБУН Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка*

УДК:538.91, 539.22

Топологические дефекты существуют в различных упорядоченных системах, их изучение представляет собой важный раздел физики конденсированного состояния. В жидких кристаллах топологические дефекты могут существовать в ориентационном поле молекулярного упорядочения [1]. Наблюдения в поляризованном свете позволяют визуализировать топологические дефекты и восстановить распределение поля молекулярного упорядочения вокруг дефекта.

В докладе представлены результаты исследований топологических дефектов нематического жидкого кристалла, связанных с каплями изотропной жидкости. Капли получены в плоских оптических ячейках при нагреве до двухфазной области нематический жидкий кристалл – изотропная жидкость. Изучены капли двух типов: трехмерные, размер которых меньше толщины ячейки, и квазидвумерные, поперечный размер которых больше толщины ячейки [2]. Исследования проведены в поляризованном свете с использованием оптического микроскопа Olympus BX51.

В каплях, размер которых меньше толщины ячейка, нами наблюдались точечные топологические дефекты на полюсах капель и линейный экваториальный дефект («кольцо Сатурна» [1]). Одновременное наличие двух типов дефектов связывается с наклонными граничными условиями для директора жидкого кристалла на границе капель [1,2]. При увеличении размера капель и переходе к квазидвумерной геометрии «кольцо Сатурна» разбивается на два линейных дефекта, локализованных в мениске капель.

Топологические дефекты могут быть получены при слиянии капель. При слиянии квазидвумерных капель нами наблюдалось образование двух точечных дефектов и двух локализованных линейных дефектов. Образующиеся дефекты являются антиподами существующих дефектов. Изучена динамика взаимодействия топологических дефектов, приводящего к их попарной аннигиляции. Экспериментальные данные сопоставляются с существующими теориями. Зависимость расстояния между точечными дефектами от времени может быть описана степенной функцией с показателем, близким к 0.5. При разрыве прослойки изотропной жидкости в окружении жидкого кристалла наблюдалось каскадное образование топологических дефектов на поверхности капель, формирующихся в результате разрыва [3].

*Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант 23-12-00200.*

1. Клеман М., Лаврентович О.Д. Основы физики частично упорядоченных сред. Пер. с англ. М.: Физматлит. 2007.
2. Dolganov P.V. et al. Static and dynamics of point boojums, line and modified Saturn ring topological defects in nematic confined geometry // European Physical Journal E. 2023. V. 46. No. 12. P. 121.
3. Долганов П. В. и др. Каскадное образование топологических дефектов и спутанных капель при динамической капиллярной неустойчивости в жидких кристаллах // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2023. Т. 118. №. 2. С. 118-124.

## Применение синхротронного излучения для исследования локальной атомной структуры неравновесных фазовых состояний

Р.В. Сундеев<sup>1,2,3</sup>, А.В. Шалимова<sup>2</sup>, А.А. Велигжанин<sup>4</sup>

<sup>1</sup>РТУ МИРЭА, Москва

<sup>2</sup>ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П.Бардина», Москва

<sup>3</sup>НИТУ «МИСис», Москва

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва

УДК: 539.26, 538.9

Вопросы разработки новых перспективных материалов является важной и актуальной задачей современного физического материаловедения. К инновационным материалам предъявляются высокие требования, связанные с тем, что они должны обладать сложным комплексом физических, механических, химических и др. свойств. Одним из перспективных направлений повышения физико-механических свойств материалов является создание в них новых неравновесных структурно-фазовых состояний методами экстремальных воздействий. К наиболее эффективным методам экстремальных воздействий, приводящих к формированию уникальных структурно-фазовых состояний, является закалка из расплава и большие (интенсивные) пластические деформации. Известно, что многие механические и физико-химические свойства материалов во многом зависят от специфики локальной атомной структуры материала. Применение метода EXAFS-спектроскопии при использовании синхротронного рентгеновского излучения способно решить существующие проблемы идентификации атомной структуры неравновесных фаз, возникающих при экстремальных воздействиях, и выявить влияние структурных параметров сплава на комплекс их физико-механических свойств.

В работе методом EXAFS спектроскопии, изучены особенности локальной атомной структуры аморфного сплава  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ , полученного методом закалки из расплава и большими пластическими деформациями. Показано, что локальная атомная структура аморфных фаз, полученных методами закалки из жидкого состояния и большими пластическими деформациями, не идентична. Обнаружено, что механизмы и кинетика кристаллизации аморфной фазы в сплаве  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ , полученная при закалке из жидкого состояния и при больших пластических деформациях, существенно различаются. Аморфное состояние после закалки из жидкого состояния кристаллизуется в ходе двухстадийной реакции, включающей образование зародышей и их последующий рост. Аморфное состояние, полученное при деформации, напротив, кристаллизуется в ходе одностадийной реакции, при которой реализуется только рост зародышей кристаллической фазы.

Изучено влияние температуры деформации в ходе больших пластических деформаций на характер атомной структуры, на тепловые и магнитные характеристики аморфных сплавов на основе железа, полученных методом закалки из расплава. Установлена взаимосвязь между атомной структурой аморфных сплавов на основе железа после деформации и их свойствами. Выявлено, что деформационная нанокристаллизация аморфных сплавов в процессе больших пластических деформаций при комнатной температуре реализуется за счет двух факторов: как локального повышения температуры в полосе сдвига, так и увеличения концентраций областей свободного объема в них. При этом большие пластические деформации аморфных сплавов при криогенной температуре, приводят к подавлению процессов деформационной кристаллизации и к образованию более устойчивого к кристаллизации аморфного состояния, чем состояние после закалки из жидкого состояния.

## Низкоразмерная магнитная структура $\text{LiMn}^{2+}\text{Mn}^{3+}\text{TeO}_6$ , определенная методом нейтронной порошковой дифракции

А.Е. Сулопарова, А.И. Курбаков

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

УДК: 537.9, 538.911, 538.955

$\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$  это слоистый теллуриат, принадлежащий семейству  $\text{LiMn}^{2+}\text{Mn}^{3+}\text{XO}_6$  ( $\text{X} = \text{Sb}, \text{Te}$ ) с уникальной переменной валентностью марганца +2.5. Более распространенными и изученными являются соединения с валентностью между 3+ и 4+. Такие оксиды марганца смешанной валентности обладают эффектом колоссального магнитосопротивления и актуальны как перспективные материалы в энергетической промышленности, например, как катоды для литий-ионных аккумуляторов.

Соединения семейства являются прототипами сильно коррелированных систем и представляют собой уникальные объекты для современной физики магнетизма, в которых одновременно проявляются спиновые, зарядовые и орбитальные степени свободы. Такие соединения могут найти потенциальное применение в областях спинтроники, компьютерных технологий и литий-ионных аккумуляторов, что делает их интересными объектами для исследований.

Кристаллическая структура была определена на основе комплиментарного анализа нейтронных и синхротронных данных.  $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$  кристаллизуется в пространственную группу низшей сингонии  $P1$ , с параметрами элементарной ячейки  $a = 5.0956(1)$ ,  $b = 8.5566(2)$ ,  $c = 5.0405(1)$ ,  $\alpha = 92.651(2)$ ,  $\beta = 92.145(2)$ ,  $\gamma = 89.766(2)$ .

Триклинная кристаллическая структура  $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$  представляет собой сильно искаженный вариант орторомбической ( $Pnn2$ ) структуры  $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$  [1] с упорядочением Li/Mn на двух независимых позициях Li. При этом, сам  $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$  является надстройкой, производной от  $\text{LiSbO}_3$ .  $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$  можно рассматривать как квазидвумерную или даже одномерную магнитную структуру, так как расстояния между тремя атомами Mn-Mn-Mn (расстояния в зигзагообразных цепочках вдоль оси  $b$ , определенные из нейтронных измерений, короче, чем в двух других направлениях).

Проведены низкотемпературные измерения, на основе которых была предложена модель магнитной структуры. В магнитной подсистеме ниже температуры Нееля 20 К реализуется дальний антиферромагнитный порядок. При этом, ниже 13 К происходит резкое изменение магнитной части нейтронограмм, что связано с переходом магнитной структуры от несоизмеримой к соизмеримой. Установлен вектор распространения  $k=(0, 1/3, 1/2)$  при температуре 16 К. Магнитная структура при 2 К более сложная, представляет собой несоразмерную спираль с тремя компонентами.

1. Choisnet J., Rulmont A., et al., Ordering phenomena in the  $\text{LiSbO}_3$  type structure: The new mixed tellurates  $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$  and  $\text{Li}_2\text{SnTeO}_6$  // J. of Solid State Chemistry. 1989. V 82. P. 272-278.

## Уравнение Линдблада в описании переноса заряда в молекуле ДНК

А.В. Сюракшин

*Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, Самара*

УДК: 53.047; 519.6; 538.935

Численно исследована квантово-механическая модель сильной связи для описания транспорта заряда по фрагменту искусственного ДНК различной длины.

Транспортная модель проводящих свойств молекулы ДНК основана на гибридизации вдоль оси молекулы электронных  $\pi$ -орбиталей атомов углерода и азота, образующих пары оснований в двойной спирали ДНК. В качестве конкретного объекта применения этой модели рассмотрена искусственно созданная цепочка ДНК-олигонуклеотида с однородным фрагментом, составленным из  $N$  одинаковых аденин-тиминных пар. Этот фрагмент заданной длины  $N$  заключен между гуанин-цитозиновыми концевыми участками, которые играют роль донорных и акцепторных центров для движущегося заряда. [1, 2]

В настоящей работе обоснование модели и выбор значений ее параметров осуществлены в рамках концепции ДНК как открытой квантовой системы, взаимодействующей со стохастическими полями молекулярного окружения. Перенос дырочного носителя в данной модели описывается решением временного уравнения Линдблада для матрицы плотности системы с учетом двух типов диссипативных процессов:

(а) относительно медленного затухания волновой функции заряженного носителя, движущегося от донора к акцептору, за счет захвата носителя окружающей средой, и

(б) процесса потери когерентности волновой функции носителя, вызванного дефазирующим действием на него тепловых шумов окружения.

Численные решения уравнения Линдблада находятся с использованием открытого программного кода LindbladMPO, моделирующего элементы квантового алгоритма на классическом компьютере. [3]

Из последующего анализа результатов получено, что для определенных значений параметров модели и различных длин  $N$  фрагмента ДНК существуют два режима движения заряженного носителя, предположительно, – туннельный и прыжковый, что согласуется с результатами экспериментальных измерений скорости переноса заряда по ДНК фрагменту как функции его длины. [4]

Обсуждены пределы применимости модели, ограниченность которой не позволяет получить на ее основе некоторые особенности процесса зарядового транспорта в ДНК. Вместе с тем, подчеркнута эвристическая ценность данной модели и возможность ее обобщения с целью дальнейшего изучения переноса заряда в молекуле ДНК.

1. Skourtis S., Nitzan A. Effects of initial state preparation on the distance dependence of electron transfer through molecular bridges and wires // J. of Chem. Phys. 2003. V. 119. P. 6271-6276.
2. Сюракшин А.В., Лахно В.Д., Юшанхай В.Ю., Перенос заряда в молекуле ДНК в рамках простой модели открытой квантовой системы // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2021. 023. 26 с.
3. Landa H. and Misguich G. Nonlocal correlations in noisy multiqubit systems simulated using matrix product operators // SciPost Phys. Core. 2023. V. 6. P. 037-38.
4. Giese B., Amaudrut J., Köhler A.K., Spormann M., Wessely S. Direct observation of hole transfer through DNA by hopping between adenine bases and by tunneling // Nature. 2001. V. 412. P. 318-320.

## Кластерные квантово-химические *ab initio* вычисления для моделей квантового магнетизма

Л.А. Сюракина<sup>1</sup>, В.Ю. Юшанхай<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатории информационных технологий  
им. М.Г. Мецеракова, Дубна

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория теоретической физики  
им. Н.Н. Боголюбова, Дубна

УДК: 538.915, 544.183, 537.622

Широко применяемые методы теории функционала плотности (DFT) имеют ряд существенных ограничений при описании магнитных свойств материалов с сильными электронными корреляциями. Развиваемый нами альтернативный подход использует преимущества методов вычислительной квантовой химии, что позволяет строго учитывать эффекты электронных корреляций при оценке энергии и спиновых состояний многоэлектронных конфигураций для относительно небольших кристаллических фрагментов (кластеров) сложных соединений, например, оксидов переходных металлов. В этих соединениях атомы переходных металлов обладают открытыми электронными *nd*-оболочками ( $n = 3, 4, 5$ ), а их магнитные моменты участвуют в сверхобменных взаимодействиях посредством промежуточных лигандов – атомов кислорода. Решается задача количественной оценки сверхобменных констант, отвечающих как изотропному, так и анизотропным вкладам во взаимодействие пар магнитных атомов.

Магнитные свойства являются результатом конкуренции трех основных факторов. Первый фактор формируется внутриатомными электронными взаимодействиями (кулоновским/хатбардовским отталкиванием  $\sim U$ , обменом Хунда  $\sim J_H$  и, для тяжелых атомов, большим спин-орбитальным взаимодействием  $\sim \lambda$ ), второй — кристаллическими полями электрической природы, и третий фактор — это делокализация, которая измеряется характерной кинетической энергией  $\sim W$ , приобретаемой электроном в основном состоянии за счет распространения его волновой функции по узлам решетки; последнее опосредовано промежуточными атомами немагнитного лиганда. С увеличением отношения  $U/W$  эффекты делокализации уменьшаются, и электронная система переходит, при определенной степени заполнения электронных уровней, в моттовское изолирующее состояние.

В докладе демонстрируется, как использование инструментария квантовой химии обеспечивает продуктивный метод получения эффективных спиновых гамильтонианов, свойства которых возможно точно воспроизводят магнитное поведение в низкоэнергетическом пределе для широкого семейства оксидов переходных металлов. [1-4].

1. Katukuri V. et al. Mechanism of Basal-Plane Antiferromagnetism in the Spin-Orbit Driven Iridate  $Ba_2IrO_4$  // *Phys. Rev. X*. 2014. V. 4. P. 021051(10).
2. Nishimoto S. et al. Strongly frustrated triangular spin lattice emerging from triplet dimer formation in honeycomb  $Li_2IrO_3$  // *Nat. Commun.* 2016. V. 7. P. 10273(7).
3. Xu L. et al. Superexchange interactions between spin-orbit-coupled  $j \approx 1/2$  ions in oxides with face-sharing ligand octahedra // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 99. P. 115119(11).
4. Eldeeb M. et al. Energy scales in  $4f^1$  delafossite magnets: Crystal-field splittings larger than the strength of spin-orbit coupling in  $KCeO_2$  // *Phys. Rev. Mater.* 2020. V.4. P. 124001(6).

## Магнитная фазовая диаграмма в редкоземельном ортоферрите $TmFeO_3$ по данным монокристалльной дифракции нейтронов во внешнем магнитном поле

К.Ю. Ткаченко<sup>1</sup>, А.К. Овсяников<sup>2</sup>, О.В. Усманов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Санкт-Петербург

<sup>2</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

УДК: 538.911

За последние полвека одними из наиболее интересных в изучении стало семейство соединений оксида железа  $Fe_2O_3$  с оксидами других металлов, которые объединяют общим термином ферриты. Такие соединения разделяют на четыре группы, в зависимости от оксида присоединённого металла периодической системы химических элементов. В нашей работе мы будем рассматривать ферриты с орторомбической кристаллической решёткой, имеющие общую формулу  $RFeO_3$ . Редкоземельные соединения обладают сегнетоэлектрической поляризацией при определённых температурах магнитного упорядочивания [1], которые были обнаружены в экспериментах по изучению диэлектрической поляризации ниже температуры магнитного упорядочивания  $T_{NR}=5-10K$  [2]. Изучение соединений типа  $RFeO_3$  стало весьма востребованным в сфере передовых технических устройств с низким энергопотреблением, благодаря проявлению в ортоферритах мультиферроитных свойств. В качестве исследуемого соединения мы будем использовать  $TmFeO_3$ , для которого была обнаружена дополнительная смешенная фаза [3-4].

Рентгеновские исследования проводились на дифрактометре Rigaku SmartLab в Петербургском институте ядерной физики (ПИЯФ). Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на Institut Laue-Langevin. Измерения магнитной структуры проводились на дифрактометре D23 во внешних магнитных полях.

По итогу всей проделанной работы из эксперимента по рассеянию рентгеновских лучей были получены параметры решётки  $TmFeO_3$  при температурах 50, 85, 150 и 300K, которые оказались равными между собой вплоть до третьего порядка малости. Также были построены двумерные карты распределения электронной плотности, благодаря которым оказалось возможным косвенно продемонстрировать пути взаимодействия между Fe-O-Fe и Tm-O-Fe. По результатам обработки данных нейтронного эксперимента мы построили магнитную фазовую диаграмму для  $TmFeO_3$ .

1. Tang G., Li Z., Ma L. Three models of magnetic ordering in typical magnetic // Physics Reports. 2018. V.758. P.1-56.
2. Tokunaga Y. et al. Composite domain walls in a multiferroic perovskite ferrite // Nature Materials. 2009. V.8. P.558-562.
3. Bombik A., Leśniewska B., Pacyna A.W. Magnetic susceptibility of powder and single-crystal  $TmFeO_3$  orthoferrite // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2000. V.214. P.243.
4. Tsymbal L.T. et al. Natural behavior of the magnetization under spontaneous reorientation:  $TmFeO_3$ ,  $EuFeO_3$ . Low Temperature Physics. 2005. V.31. P.277-282.

## Влияние термической обработки на свойства полимер-содержащих композитных пленок CsPbBr<sub>2</sub>I

*А.С. Тойкка<sup>1,2</sup>, Р. Кенесбай<sup>1</sup>, М.Г. Баева<sup>1</sup>, Д.М. Митин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский академический университет им. Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>ИТМО, Санкт-Петербург

УДК: 538.9

Галогенидные перовскиты – класс полупроводниковых материалов, которые имеют структуру ABX<sub>3</sub>, где А и В моно- и двухвалентный катионы соответственно, X – анион галогенов. Варьирование состава ABX<sub>3</sub> позволяет перестраивать электрооптические свойства устройств на основе перовскитов в широком диапазоне, что находит применение в оптоэлектронике. В контексте разработки светоизлучающих устройств видимого диапазона, обладающих относительно высокой стабильностью по отношению к воздуху, влажности и электромагнитным полям, следует выделить свинцово-галогенидные перовскиты (В=Pb<sup>2+</sup>) на основе катионов цезия (А=Cs<sup>1+</sup>). Так, например, перовскит на основе CsPbBr<sub>3</sub>, излучающий в спектральном диапазоне, соответствующем зеленому цвету, является одним из наиболее изученных и технологически проработанных [1]. Настоящее исследование посвящено разработке композитного материала на основе галогенидных перовскитов для светоизлучающих в диапазоне 600-640 нм устройств, путем перехода от методики синтеза CsPbBr<sub>3</sub> [2] к CsPbBr<sub>2</sub>I. Ограничением в использовании перовскитов со смешанными анионами является фазовая сегрегация, которая проявляется в формировании областей с разным стехиометрическим составом, при этом, формируется два или более пика люминесценции, снижается интенсивность излучения, перовскит становится менее устойчивым к внешним воздействиям (влажность, излучение и т.д.). Одним из методов снижения фазовой сегрегации является легирование перовскитов солями на основе Mn, что было реализовано при разработке фотовольтаических устройств [3]. Однако, для реализации стабильных светоизлучающих устройств на основе CsPbBr<sub>2</sub>I использования данного подхода недостаточно из-за большого количества дефектов и низкой интенсивности люминесценции.

Настоящая работа посвящена исследованию полимер-содержащих композитных пленок на основе CsPbBr<sub>2</sub>I с содержанием Mn ≈0,5 вес. %. В качестве полимерных материалов использовались полиэтиленоксид (PEO) и поливинилиденфторид (PVDF). Растворителем служил диметилсульфоксид. Исследовалось влияние температур нуклеации (вакуумирования,  $T_{vac}$ ) и кристаллизации (отжига,  $T_{ann}$ ) на морфологические, оптические и резистивные свойства композитных пленок на основе CsPbBr<sub>2</sub>I с разным содержанием PEO и PVDF, полученных методом центрифугирования в атмосфере азота. Было установлено, что при использовании  $T_{vac}=60^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{ann}=70^{\circ}\text{C}$  и соотношении "PEO:PVDF"=1:4 наблюдаются оптимальные условия для формирования композитных пленок. При данных условиях фотолюминесценция имеет одиночный пик при  $\lambda=600-630$  нм и стабильную интенсивность, отсутствует фазовая сегрегация, а полученные пленки сохраняют свои свойства на воздухе при нормальной влажности на протяжении трех и более суток.

*Работа выполнена при поддержке госзадания FSRM-2023-0007 "Светоизлучающие, фотодетекторные и фотопреобразовательные структуры ближнего ИК и видимого диапазонов на основе полупроводниковых наноструктур".*

1. Kim B.W., et al. Morphology controlled nanocrystalline CsPbBr<sub>3</sub> thin-film for metal halide perovskite light emitting diodes // J. of Industrial and Engineering Chemistry. 2022. No. 97. P. 417.
2. Baeva M., et al. Enhancing the CsPbBr<sub>3</sub> PeLEC properties via PDMS/PMHS double-layer polymer encapsulation and high relative humidity stress-aging// J. of Mat. Chem. C. 2023. No. 11. P. 15261.
3. Liu J.L.Z., et. al. Enhancing Optical, Electronic, Crystalline, and Morphological Properties of Cesium Lead Halide by Mn Substitution for High-Stability All-Inorganic Perovskite Solar Cells with Carbon Electrodes // Advanced Energy Materials. 2018. V. 8. No. 1800504. P. 1.

## Применение комбинированного анализа XPS и XANES для изучения атомного и электронного строения кластеров нанографена, допированного азотом

*Д.Б. Толчина<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, В.В. Срабионян<sup>1</sup>, А.Т. Гюласарян<sup>2</sup>, А.Т. Козаков<sup>3</sup>,  
А.В. Никольский<sup>3</sup>, А.В. Емельянов<sup>4</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>4</sup>, Э.Г. Шароян<sup>2</sup>, А.С. Манукян<sup>2</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Физический факультет, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

<sup>2</sup>*Институт физических исследований Национальной Академии Наук Армении, Аштарак*

<sup>3</sup>*Научно-исследовательский институт Физики, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

<sup>4</sup>*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва*

УДК: 538.915

Определены изменения электронной и локальной атомной структуры азотсодержащих углеродных образцов, обладающих ферромагнитными свойствами при комнатной температуре, в зависимости от условий синтеза и используемых прекурсоров. Синтез проводился методом твердофазного пиролиза углеродсодержащих исходных материалов – фталоцианина, фталонитрила и полиэтилена. Изучение строения материалов выполнялось рядом взаимодополняющих методов.

С помощью измеренных рентгеновских фотоэлектронных спектров (XPS), а также СКЛЛ спектров определены элементный состав образцов и отношение  $sp^2/sp^3$  связей в них. Для определения атомного строения центров азота использовался комбинированный подход, в рамках которого результаты анализа N 1s XPS спектров использовались при построении моделей ближнего окружения азота в изучаемых образцах. Полученные модели структур в дальнейшем использовались и проверялись в ходе фитинга спектров N K-edge XANES в каждом из образцов, соответствующими этим моделям теоретическими спектрами. Такой подход позволил определить длины и углы связей в азотсодержащих атомных конфигурациях. Установлено процентное содержание этих структурных состояний азота в образцах и его зависимость от условий синтеза. Выявлено уменьшение доли пиридинового и увеличение пиррольного азота в образцах с увеличением давления в камере.

Установлено также, что давление азота в камере и выбор исходных материалов для пиролиза являются эффективными параметрами для управления электронными и магнитными характеристиками создаваемых углеродсодержащих материалов. Образец, синтезированный под давлением, обладает менее развитой кристаллической структурой, меньшим количеством общего азота и более высокой долей  $sp^3$ -гибридизации и Pyrolic-N. Показано, что рост отношения  $sp^3/sp^2$  совпал с уменьшением доли пиридинового азота и увеличением пиррольного азота, а увеличение отношения  $sp^3/sp^2$  приводит к увеличению ферромагнитной составляющей магнитного момента.

*Организация, финансировавшая выполнение данной работы: Российский фонд фундаментальных исследований РФФИ № 20-52-05011 Арм\_а.*



## Каналы и станции для прикладных исследований проекта NICA

*В.И. Тюлькин, Е.М. Сыресин, А.В. Бутенко, А.А Сливин, Г.А Филатов, А.Р. Галимов, А.В. Тузиков, Д.О. Леушин, А.А. Балдин, П.Р. Харьюзов, Д.С. Коровкин, А.Б. Сафонов*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

УДК: 621.382.6(06), 538.97

В ОИЯИ в рамках реализации проекта коллайдер NICA ведется сооружение ускорительного комплекса, включающего в себя станции и каналы для прикладных исследований в области радиобиологии, ядерной энергетики и при облучении электронных компонентов. Облучение производится пучками различных типов ионов  $^{12}\text{C}^{4+}$  до  $^{197}\text{Au}^{31+}$  с различной энергией. Станция облучения микросхем (СОЧИ) работает на пучках с энергией 3,2 МэВ/нуклон, выведенных из линейного ускорителя тяжелых ионов (ЛУТИ). Испытательная станция компонентов для радиоэлектронной аппаратуры (ИСКРА) и Станция исследований медико-биологических объектов (СИМБО) работают на пучках с энергией 150—500 МэВ/нуклон (ИСКРА), 400—100 МэВ/нуклон (СИМБО), выведенных из синхротрона Нуклотрон [1]. Тестирования компонентов электроники, проводимые на станциях, позволят повысить их надежность при работе в условиях космоса, а проводимые исследования, на биологических объектах будут применены при планировании длительных полетов, чтобы оценить влияние космического излучения на живые организмы.

Станция облучения микросхем (СОЧИ) предназначена для прогнозирования, оценки и контроля радиационной стойкости изделий микроэлектроники к воздействию заряженных частиц. Так как система является однопролетной, для снижения потерь пучка с заданной энергией (3,2МэВ/н) на молекулах остаточного газа требуется получить рабочее давление в канале транспортировки не хуже  $10^{-6}$  Па, при этом состав остаточных газов не должен включать в себя тяжелые газы, углеводороды. Разработанные вакуумная система, система позиционирования образца и система детектирования параметров пучка позволяют облучать микросхемы с длительностью цикла 30 минут.

Станция исследований медико-биологических объектов (СИМБО) предназначена для проведения радиобиологических исследований с целью моделирования воздействия тяжелых заряженных частиц галактических и солнечных космических лучей на когнитивные функции мозга приматов и мелких лабораторных животных. Испытательная станция компонентов радиоэлектронной аппаратуры (ИСКРА) предназначена для исследований и испытаний изделий полупроводниковой микро и наноэлектроники на стойкость к воздействию тяжелых заряженных частиц высоких энергий [2]. Энергия пучка и однопролётность системы позволяет получить требуемы уровень потерь пучка при рабочем давлении  $10^{-1}$ Па. Размещение образцов осуществляется на системе позиционирования станций при атмосферном давлении. Вывод пучка из канала осуществляется через титановые мембраны, толщиной 100мкм. Диагностика каналов и станций представлена набором различных типов детекторов для настройки и контроля параметров пучка во время эксперимента.

В 2023 году произведены сеансы с пучком на станции СОЧИ, в которых произведено облучение декапсулированных микросхем. В декабре 2023 года станции и каналы СИМБО, ИСКРА были смонтированы, готовы к проведению пусконаладочных работ и получению рабочих параметров.

1. Филатов Г.А., Сливин А.А., Сыресин Е.М. и др. Каналы и станции для прикладных исследований ускорительного комплекса NICA // Письма в ЭЧЭА. 2023 Т.20, №4(249). С. 812–818.
2. Filatov G.A. et al. Beam Lines and Stations for Applied Research Based on Ion Beams Extracted from Nuclotron // Proc. of the 13th Intern. Part. Accel. Conf. (IPAC'2022), Bangkok, June 12–17, 2022. P. 3096.

## Исследование гидрида кобальта методами неупругого рассеяния нейтронов и дифференциальной сканирующей калориметрии

***Р.И. Усманов<sup>1,2</sup>, В.И. Кулаков<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва*

УДК: 536.631, 538.913

При температурах 500-600 К растворимость водорода в низкотемпературной ГПУ-фазе кобальта, помещенного в атмосферу  $H_2$ , монотонно возрастает с повышением давления и достигает атомного соотношения  $H/Co$ , равного  $x \approx 0,5$  при  $P = 6,5$  ГПа. При  $P \geq 7$  ГПа растворимость водорода в кобальте резко возрастает до  $x \approx 1$  из-за образования стехиометрического гидрида ГЦК-CoH. Быстрое охлаждение (закалка) синтезированных образцов  $CoH_x$  под высоким давлением до температуры жидкого азота предотвращает потерю водорода при последующих исследованиях при атмосферном давлении. Кристаллические структуры закаленных образцов гидридов кобальта ГПУ и ГЦК ранее были изучены методом дифракции нейтронов; динамика решетки ГЦК-CoH была изучена методом неупругого рассеяния нейтронов (INS). Краткий обзор этих исследований, а также ссылки на оригинальные статьи можно найти в ссылке [1].

В настоящей работе спектры оптических колебаний в закаленных образцах ГПУ-CoH $_x$  с  $x = 0,06, 0,091, 0,34$  и  $0,51$  были исследованы с помощью нейтронного спектрометра IN1-BeF при температуре 5 К в Институте Лауэ-Ланжевена (Гренобль, Франция). Измеренные спектры неупругого рассеяния нейтронов были преобразованы в фононную плотность состояний  $g_{opt}(E)$  и дополнены  $g_{ac}(E)$  для акустических колебаний, рассчитанных в приближении DFT-GGA. Теплоемкости ГПУ-CoH $_{0.51}$  и ГЦК-CoH были измерены методом дифференциальной сканирующей калориметрии и хорошо согласуются с результатами, полученными из суммы  $g_{ac}(E)$  и  $g_{opt}(E)$  в этой работе и в [1], соответственно.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-22-00361. Работа также частично финансировалась в рамках проекта научно-учебных групп НИУ ВШЭ (№23-00-01).*

1. Antonov V.E., V.K. Fedotov, A.S. Ivanov, et al. Recent Advances in Hydrogen Storage Materials // Journal of Alloys and Compounds. 2022. V. 905 P.164208 (1–32).

## Формирование и релаксация полей упругих напряжений в радиальных наногетероструктурах InAs/InP

***С.В. Федина<sup>1</sup>, В.В. Федоров<sup>2</sup>, А.К. Кавеев<sup>3</sup>, Д.В. Минин<sup>1</sup>, Е.И. Белякова<sup>3</sup>, И.С. Мухин<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>*Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург*

<sup>3</sup>*ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*

УДК 538.911

На сегодняшний день, гетероструктуры на основе узкозонных (<1 эВ) полупроводников находят широкое применение в области инфракрасной (ИК) оптоэлектроники. Практическая значимость работ в данном направлении обуславливается возможностью создания мультиспектральных ИК радиометров и тепловизоров для систем разведки и опознавания, а также сенсоров химического состава, применяемых в системах обнаружения и идентификации взрывчатых веществ. Тем не менее, развитие данной области ограничивается двумя основными факторами. Известно, что малая ширина запрещенной зоны ( $E_g$ ) неизбежно ведет к увеличению темпов термогенерации и безызлучательной рекомбинации носителей заряда, что приводит к высоким значениям темнового тока, увеличению шумов и снижению чувствительности фотопреобразующих устройств [1]. В свою очередь, проблема согласования постоянных решеток слоев гетероструктуры, существенно ограничивает возможности управления зонным профилем гетероструктур [2].

В данной работе исследовались эпитаксиальные массивы InAs ННК и InAs/InP гетероструктур типа ядро-оболочка на основе ННК, синтезированных на установке молекулярно-пучковой эпитаксии Veeco GEN III MBE. Продемонстрированы высокие поверхностные плотности синтезированных InAs и InAs/InP ННК (5-10 ННК/мкм<sup>2</sup>). Данные высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии показали, что тонкая оболочка InP с толщиной до 10 нм растёт когерентно с InAs ядром ННК и в основном обладает структурой случайной гексагональной плотной упаковки с преобладанием политипной фазой типа вюрцит.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки в рамках гранта FSRM-2023-0007.*

1. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1973. 456 с.
2. Martyniuk P. и др. New concepts in infrared photodetector designs // Applied Physics Reviews. 2014. Т. 1. №. 4.

## Влияние магнитных полей на объемную диффузию Sn в $\alpha$ -Fe

А.А. Федотов С.В. Воронин

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара  
УДК 539.219.3, 538.9

Экспериментальные исследования показали [1,2], что магнитные поля (МП) оказывают существенное влияние на диффузионную подвижность атомов примеси в ферромагнитной матрице, а величина влияния МП зависит от намагниченности материала (степени магнитного упорядочения), структурного состояния матрицы, напряженности МП, а также частоты в случае постановки импульсных магнитных полей (ИМП). Существующие физические модели объясняют возникновение дополнительного массопереноса изменением магнитного прядка во внешнем поле, взаимодействием атмосфер примесных атомов с движущимися в МП дислокациями, магнитострикционными напряжениями кристаллической решетки и т.п. [3]. В свою очередь, проблема ограниченности экспериментальных данных о диффузии в условиях воздействия МП не позволяет выяснить величину дополнительного вклада в общий массоперенос каждого из механизмов.

В этой связи предпринято экспериментальное исследование влияния постоянных магнитных полей (ПМП) и ИМП на объемную диффузию Sn в  $\alpha$ -Fe в области температур 730-830° С при амплитудах напряженности МП  $H=39.8-557.2$  кА/м (0.5-7.0 кЭ). Рентгенографическим методом установлено, что наложение внешних МП оказывает существенное влияние на величину коэффициента диффузии (КД) Sn в  $\alpha$ -Fe, в частности, при воздействии ИМП со значениями амплитуд напряженности  $H=238.8-557.2$  кА/м (3.0-7.0 кЭ) наблюдается «резонансный» характер изменения величины КД Sn в  $\alpha$ -Fe в частотном диапазоне 1-21 Гц. Существенное увеличение значений КД Sn в  $\alpha$ -Fe наблюдается и в парамагнитной области при  $T=790^\circ$  С, что подтверждает предположение о влиянии магнитострикционных напряжений на диффузионную подвижность атомов немагнитной примеси в ферромагнетиках. Тогда как уменьшение значений КД Sn в  $\alpha$ -Fe в области слабых магнитных полей  $H=39.8-78.6$  кА/м (0.5-1.0 кЭ) как в ИМП на низких частотах 1-3 Гц, так и в ПМП свидетельствует о доминировании механизма магнитного упорядочения ферромагнитной матрицы. Таким образом, в результате исследования влияния ИМП и ПМП на объемную диффузию Sn в  $\alpha$ -Fe в диапазоне температур 730-830° С получено экспериментальное подтверждение реализации механизма влияния магнитного порядка и магнитострикционного механизма на диффузию немагнитной примеси в ферромагнетиках.

1. Вержаковская М.А., Петров С.С., Покоев А.В. Гетеродиффузия Al в  $\alpha$ -Fe в импульсном магнитном поле // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 22. С. 44-48.
2. Pokoev A.V., Fedotov A.A. Magneto-diffusional Effect in Ferromagnets in the Constant and Pulsed magnetic fields // Defect and Diffusion Forum. 2015. V. 363. P. 190-195.
3. Мазанко В.Ф., Покоев А.В., Миронов В.М. и др. Диффузионные процессы в металлах под действием магнитных полей и импульсных деформаций. М.: Машиностроение. 2006. Т. 2. 320 с.

## Модель Изинга на решетке Union Jack с двумя трансляциями

Е.С. Цуварев<sup>1,2</sup>, Ф.А. Кассан-Оглы<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Российский федеральный ядерный центр – ВНИИТФ им. академика Забабахина, Снежинск

УДК: 537.611.2, 537.9, 538.9

Выдающаяся работа Онзагера [1], в которой впервые получено точное решение для свободной энергии Гельмгольца на квадратной решетке в модели Изинга, открыла новую эпоху и фактически определила границу размежевания между предыдущими наивными и весьма упрощенными теориями типа среднего (молекулярного) поля и современной эрой исследования критических явлений в статистической физике. Наиболее значимое следствие точного решения – логарифмическая сингулярность теплоемкости вблизи точки фазового перехода.

Решение Онзагера, побудило последующих исследователей к поискам других точных решений на различных решетках [2]. Одним из способов получения новых еще неизученных решеток является процедура обобщения на некоторое число трансляций в решетке [3, 4].

В данной работе произведено обобщение модели Изинга на решетке Union Jack с шестью обменными взаимодействиями. Выведены точные аналитические выражения для свободной энергии Гельмгольца и спонтанной намагниченности при учете ближайших и не ближайших соседей (шести параметров обменных взаимодействий). Исследованы термодинамические и фрустрационные свойства модели. Выявлены существенные особенности поведения энтропии, теплоемкости и спонтанной намагниченности. Получен ряд точных выражений для температур фазовых переходов, нуль-температурной (residual) энтропии и нуль-температурной (residual) спонтанной намагниченности. Особенно изобилующей новыми эффектами рассматриваемая модель проявляется во множестве частных случаях и взаимосвязях с другими (известными ранее) решетками. Несколько открытых новых решеток заслуживают пристального внимания, открывая широкие исследовательские возможности для получения новых свойств и эффектов.

1. Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // Physical Review. 1944. V. 65. No. 3. P. 117–149.

2. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике // М.: Изд-во Мир. 1985. 488 с.

3. Цуварев Е.С. и др. Обобщенная модель Изинга в отсутствие магнитного поля // ЖЭТФ. 2020. Т. 158. № 3. С. 504–514.

4. Цуварев Е.С., Кассан-Оглы Ф.А. Обобщенная модель Изинга в магнитном поле // ЖЭТФ. 2021. Т. 160. № 2. С. 232–248.

## Теория волн плотности и устройство белковых оболочек малых и средних вирусов с икосаэдрической симметрией

*Д.В. Чалин, О.В. Коневцова, С.Б. Рошаль*

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

УДК: 538.91, 578.32, 577.322

Понимание физических принципов, лежащих в основе структурной организации белковых вирусных оболочек (капсидов), имеет важное значение для разработки противовирусных стратегий. В настоящей работе строится феноменологическая термодинамическая теория [1], описывающая структуры икосаэдрических капсидов малого и среднего размера. В рамках данной теории самосборка белковых оболочек рассматривается как результат конденсации минимального числа волн плотности на сферической поверхности. Каждая из этих неприводимых критических волн обладает икосаэдрической симметрией и может быть разложена по определенному набору сферических гармоник  $Y_{lm}$  с одинаковым волновым числом  $l$  [2]. Как мы показываем, для описания структуры малых капсидов, самособирающихся из индивидуальных белков, достаточно двух критических волн плотности. Максимумы первой волны определяют положение белков, а пространственные производные второй задают ориентации белков на поверхности оболочки.

Средние капсиды, в отличие от малых, собираются из пентамеров и гексамеров (называемых капсомерами). Рассмотрев все известные структуры таких оболочек (взяты с архива Protein Data Bank [3]), нами было обнаружено, что организация капсомеров в этих капсидах описывается интерференционными картинками, которые порождаются не более чем двумя критическими волнами плотности. Последний факт позволил нам объяснить наблюдаемое в природе ограничение на размер вирусных оболочек, собирающихся из капсомеров.

В работе также строятся неравновесные термодинамические потенциалы, описывающие кристаллизацию белков на сферической поверхности, и в их рамках обсуждаются причины возникновения хиральности в вирусных оболочках.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант №22-12-00105.*

1. Konevtsova O.V., Chalin D.V., Rochal S.B. Theory of density waves and organization of proteins in icosahedral virus capsids // Physical Chemistry Chemical Physics. 2024. V. 26. No. 1. P. 569-580.
2. Lorman V.L., Rochal S.B. Landau theory of crystallization and the capsid structures of small icosahedral viruses // Physical Review B. 2008. V. 77. No. 22. P. 224109.
3. Berman H. M. et al. The Protein Data Bank and the challenge of structural genomics // Nature structural biology. 2000. V. 7. No. 11. P. 957-959.

# Стабильность и проводимость фторидов редкоземельных элементов из первых принципов и их потенциальное применение в качестве твёрдых электролитов

*Д.М. Чернышов, Д.А. Аксёнов*

*Сколковский институт науки и технологий, Москва*

УДК: 544.622, 544.653.2/3, 538.9

Аккумуляторы являются неотъемлемой частью нашей современной жизни. Обеспечивая независимое питание и хранение энергии, они находят широкое применение в различных областях, включая электронику, автомобильную промышленность, энергетику и медицину.

Перспективной технологией, позволяющей значительно повысить энергоёмкость и безопасность аккумулятора являются твердотельные аккумуляторы, с твердым электролитом и металлическим литием или натрием в качестве анода [1]. Одним из ключевых аспектов в разработке твердотельных аккумуляторов является обеспечение стабильности интерфейсов электролит/электрод, особенно на анодной стороне, где электролит контактирует с щелочным металлом. Не менее важным свойством является высокая ионопроводимость электролита, что обеспечит быстроту протекания электрохимических реакций, а также высокое электрическое сопротивление, для предотвращения восстановления лития в объеме электролита.

В данной работе исследуются соединения  $\text{NaLaF}_4$  и  $\text{NaYF}_4$  в качестве потенциальных твердых электролитов для натрий-ионных аккумуляторов. Эти соединения обладают структурой гагаринитов с пространственной группой  $R-6$  и характеризуются ионным разупорядочением [2], что создает трудности для их моделирования. В данной работе предпринята попытка исследования структуры этих соединений с использованием теории функционала плотности. Была получена электронная структура данных соединений и изучен характер химических связей. Анализ моделирования указывает на то, что данные соединения являются изоляторами с большой шириной запрещенной зоны  $\sim 6$  eV.

Для оценки стабильности электролита были рассчитаны энергии электрохимических реакций в зависимости от химического потенциала Na на аноде и катоде. После чего было вычислено термодинамическое окно стабильности: для  $\text{NaLaF}_4$  - 5.37 eV, для  $\text{NaYF}_4$  - 5.85 eV.

Для оценки ионной проводимости были вычислены барьеры миграции Na в разных кристаллографических направлениях с помощью метода упругой ленты. Так, высота барьера миграции Na для  $\text{NaLaF}_4$  составляет около 0.28 eV, в то время как для  $\text{NaYF}_4$  – 0.45 eV.

Исходя из полученных результатов, можно заключить, что данные соединения обладают большим сопротивлением, хорошей стабильностью и потенциально высокой ионной проводимостью, что делает их хорошими кандидатами в качестве твердых электролитов. Ввиду более низкого барьера миграции в качестве твердого электролита лучше использовать соединение  $\text{NaLaF}_4$ , в то время как соединение  $\text{NaYF}_4$  можно использовать в качестве тонкого буферного слоя между электролитом и анодом, для обеспечения стабильности интерфейса, положительным аспектом здесь является и то, что периоды решёток данных соединений очень близки друг к другу, что должно обеспечить высокую энергию адгезии.

*Работа выполнена при поддержке Сколковского Института Науки и Технологий.*

1. Zaman, Wahid, and Kelsey B. Hatzell. Processing and manufacturing of next generation lithium-based all solid-state batteries // Current Opinion in Solid State and Materials Science. 2022. V. 26. No. 4. P. 101003.
2. Shi, Rui and Brites, Carlos D.S. and Carlos, Luís D. Hexagonal-phase  $\text{NaREF}_4$  upconversion nanocrystals: the matter of crystal structure // Nanoscale. 2021. V. 13 P. 19771-19782.

## Влияние внешних воздействий на микроструктуру и фазовый состав состаренного алюминиевого сплава АК9

*А.А. Четверкин, Ю.В. Осинская, С.Г. Магамедова*

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара*

УДК: 621.785.78:537.636, 538.9

Достаточно хорошо известно, что прочностные свойства закалённых алюминиевых сплавов типа Д1, Д16, Al–Li [1], искусственно состаренных в постоянных и импульсных магнитных полях, заметно изменяются по сравнению со случаем старения без магнитного поля. Наблюдается магнитопластический эффект [2, 3]. Таким образом, с целью получения улучшенных свойств алюминиевых сплавов актуальным является использование наложения постоянного магнитного поля (ПМП) на их старение. В случае получения высоких значений функциональных характеристик становится возможной перспектива развития технологии термомагнитной обработки алюминиевых сплавов для получения требуемых конструкционных характеристик. В связи с этим, целью данной работы является комплексное экспериментальное исследование влияния ПМП напряженностью 557.2 кА/м, времени отжига 4 ч и температуры старения от 120 до 200 °С на микроструктуру, фазовый состав и микротвердость состаренного алюминиевого сплава АК9.

В результате проведенного исследования были сделаны следующие краткие выводы:

1. Металлографический анализ показал, что наложение ПМП на старение приводит к уменьшению площади фазовых выделений чистого кремния на 16 %, а увеличение температуры старения от 120 до 200 °С приводит к уменьшению площади фазовых выделений чистого кремния как при наложении поля, так и без него в 1,3 раза.

2. Старение алюминиевого сплава АК9 в ПМП приводит к уменьшению микротвердости сплава до 13 %, при этом его пластические свойства возрастают. Наблюдается положительный МПЭ, причиной которого является формирование однородной и менее искаженной структуры сплава.

3. Анализ данных, полученных рентгенографическим методом, свидетельствует о том, что наложение ПМП на старение алюминиевого сплава АК9 и увеличение температуры старения от 120 до 200 °С не приводит к существенному изменению параметра решетки сплава.

4. Методом рентгеноструктурного анализа было обнаружено, что при наложении ПМП на старение сплава в интервале температур старения от 120 до 200 °С наблюдается тенденция к увеличению среднего размера блоков когерентного рассеяния и уменьшению плотности дислокаций и величины относительной микродеформации. Температурные зависимости параметров тонкой структуры коррелируют с температурными зависимостями микротвёрдости.

5. Методом рентгенофазового анализа обнаружено, что наложение ПМП и увеличение температуры старения от 120 до 350 °С приводит к увеличению интенсивности всех наблюдаемых линий и уменьшению их полуширины, что свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры сплава.

1. Osinskaya J.V., Pokoev A.V. Manifestation of magnetoplastic effect in some metallic alloys // Defect and Diffusion Forum. 2018. V. 383. P. 180–184.

2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. Магнитопластический эффект: основные свойства и физические механизмы // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 5. С. 838–867.

3. Моргунов Р. Б. Спиновая микромеханика в физике пластичности // Успехи физических наук. 2004. Т. 174. № 2. С. 131–153.



## Имплантация молекулярных ионов азота в кремний из плазмы

*Чжоу Зо Лин<sup>1</sup>, Турьянский А.Г.<sup>1</sup>, Сенков В.М.<sup>1</sup>, Цыганков П.А.<sup>2</sup>, Скрыбин А.С.<sup>2</sup>, Веснин В.Р.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ФИАН им. Лебедева РАН, Москва

<sup>2</sup>МГТУ им. Н.Э Баумана, Москва

УДК: 538.9

Изучались процессы формирования поверхностных структур в кремнии при высокодозной ( $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ ) имплантации молекулярных ионов  $\text{N}_2^+$  из плазмы. Использование такой технологии актуально при создании слоистых структур с высокой адгезией. В качестве модельных использовались образцы из монокристалла кремния, обработанные при высоких плотностях ионного тока ( $10 \text{ мА/см}^2$ ) при различных ускоряющих напряжениях 10-30 кВ в среде азота.

Образцы исследовались методами рентгеновских рефлектометрии и дифрактометрии. Согласно рефлектометрии при обработке при напряжении 10 кВ на поверхности образца формируется рыхлая сильно аморфизированная пленка толщиной до 25 нм с резкой внутренней границей. Основная фракция ускоренных ионов, пройдя этот поверхностный слой, тормозится в кремнии, формируя зону раствора внедрения с плотностью около  $2.5 \text{ г/см}^3$  и толщиной 10 нм.

В случае обработки образцов при катодном смещении 20 кВ, резко возрастает роль процессов распыления поверхности. С учетом роста среднего проективного пробега атомарного иона азота это приводит к образованию на поверхности пленки толщиной 3 нм и формированию протяженной зоны (45 нм) внедренного в кремний азота с максимальной плотностью  $2.5 \text{ г/см}^3$  и спадом на периферии до  $2.2 \text{ г/см}^3$ . Это связано с аморфизацией и интенсивным ростом числа дефектов кристаллической решетки подложки под действием интенсивного ионного потока.

На поверхности образца, обработанного при катодном смещении 30кВ, пленки малой плотности не наблюдалась, образец деформирован и проведение детального анализа рефлектометрии невозможно.

Сравнение дифрактометрических данных имплантированных слоев и подложки не обнаружило образования новых кристаллических фаз.

## Извлечение порошка ниобата лития из жидкой среды

Ю.С. Шаблов<sup>1</sup>, А.Н. Олейник<sup>1</sup>, М.Э. Гильц<sup>1</sup>, В.Ю. Иониди<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет», Белгород

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт им. Д. В. Скобелыцына МГУ им М. В. Ломоносова, Москва

УДК: 537.363, 538.9

Широко известным фактом являются обеззараживающие способности многих сегнетоэлектрических материалов [1]. Исследования по антибактериальной активности, например, ниобата лития, активно проводятся последние 10 лет. Стоит отметить, что в научных работах активно используются, как монокристаллы, так и образцы в виде порошка. Широкое применение в скором времени может найти и пьезокаталитическая активность многих сегнетоэлектриков. Однако, одна из основных проблем при проведении экспериментов с порошком ниобата лития в жидкой среде является ее вторичное загрязнение. Таким образом, оставшийся в жидкой среде порошок трудно извлечь и повторно использовать.

В докладе предлагается способ извлечения порошка сегнетоэлектрического материала с помощью воздействия внешнего электрического поля, создаваемого титановыми электродами. В качестве жидкой среды выступала деионизированная вода. Выбор материала электродов обусловлен тем, что титан инертен по отношению к живым тканям, а также обладает коррозионной и механической стойкостью. Для наибольшей эффективности в сборе порошка из жидкой среды возможно проведение опытов с изменением температуры рабочего объема, то есть использование пьезоэлектрических свойств.

*Работа выполнена при финансовой поддержке конкурсной части госзадания по созданию и развитию лабораторий, проект № FZWG-2020-0032 (2019-1569).*

1. Blazquez-Castro A., García-Cabanes A., Carrascosa M. Biological applications of ferroelectric materials // Applied Physics Reviews. 2018. Т. 5. №. 4.

## Оптимизация препаративного получения белков, участвующих в рекомбинации, для исследования методом малоуглового нейтронного рассеяния

***В.И. Шалгуев, Н.Г. Соболева***

*НИИ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 577.15.08

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) – эффективный неинвазивный метод, позволяющий изучать структуру различных объектов в широком диапазоне размеров и молекулярных масс. Метод особенно важен для изучения строения биологических макромолекул в растворе, т. е. в условиях, близких к физиологическим. Метод МУРН применяется для определения общей структуры и формы биологических макромолекул, а также их комплексов и агрегатов.

Гомологичная рекомбинация (ГР) – фундаментальный процесс, происходящий в живой клетке. Ключевым белком ГР является белок RecA. В основе модели [1] процесса гомологической рекомбинационной репарации лежит способность пресинаптического комплекса, образованного белком RecA на определенной ДНК, катализировать *in vitro* гомологическое спаривание и обмен одной из нитей линейной молекулы двунитевой ДНК (днДНК) фага M13 на кольцевую однострелковую ДНК (онДНК) того же фага. Метод МУРН позволяет определять структуру и форму нуклеопротеиновых филаментов, образованных белком RecA в растворе [2–5].

Препаративные количества онДНК бактериофага M13 получали из вирусных частиц, секретируемых инфицированными бактериями в окружающую среду. Бактериальный белок RecA очищали до гомогенности последовательными этапами: после индукции RecA соответствующую клеточную культуру центрифугировали, обрабатывали ультразвуком и далее экстрагировали белки полиэтиленгликолем. Затем проводили фракционирование белков RecA на колонке с фосфоцеллюлозой, далее элюировали RecA с онДНК–целлюлозы добавлением АТФ в элюирующий буфер. Белок концентрировали осаждением в аммоний-сульфатном буфере, растворяли в соответствующем буфере до высокой концентрации (~ 100 мг/мл) и диализовали против того же буфера. Для экспериментов МУРН белок RecA диализовали против буфера, содержащего D<sub>2</sub>O.

В рамках данной модели [1] представляет интерес изучение не только прокариотических белков ГР, но и белков ГР низших эукариот. После некоторой оптимизации этим методом возможно выделение не только бактериального RecA, но его дрожжевого аналога – белка Rad51, в частности, из дрожжей *Pichia angusta*, с последующим исследованием его методом МУРН.

1. Шалгуев В.И., Киль Ю.В., Юрченко Л.В., Ланцов В.А. Термозависимость главного белка гомологической рекомбинации Rad51 у дрожжей *Hansenula polymorpha* // Доклады Академии наук. 2002. Т. 387. №. 5. С. 694-696.
2. Lebedev D.V., Baitin D.M., Islamov A.K., Kuklin, A.I., Shalguev V.K., Lanzov V.A., Isaev-Ivanov V.V. Analytical model for determination of parameters of helical structures in solution by small angle scattering: comparison of RecA structures by SANS // FEBS letters. 2003. V.537. No. 1-3. P. 182-186.
3. Petukhov M., Lebedev D., Shalguev V., Islamov A., Kuklin A., Lanzov V., Isaev-Ivanov V. Conformational flexibility of RecA protein filament: transitions between compressed and stretched states // Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics. 2006. V.65. No. 2. P. 296-304.
4. Lebedev D.V., Monkenbusch M., Shalguev V.I., Lantsov V.A., Isaev-Ivanov V.V. Dynamic properties of RecA protein filaments from *E. coli* and *P. aeruginosa* investigated by neutron spin-echo // Biofizika. 2007. V.52. No. 5. P. 799-803.
- 5 Karellov D.V., Lebedev D.V., Suslov A.V., Shalguev V.I., Kuklin A.I., Islamov A.K., Lauter H., Lanzov V.A., Isaev-Ivanov V.V. Large-scale structure of RecA protein from *Deinococcus radiodurans* and its complexes in solution // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. V. 20. No. 10. P. 104215.

## Детальное изучение структур органических сегнетоэлектриков методом РСА при варьировании температуры и давления

*С.С. Шарая, Б.А. Захаров*

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

*УДК: 539.26, 548.31, 54-162.2, 538.9*

Структурные исследования при варьировании давления или температуры дают информацию о взаимодействиях, определяющих структуру кристалла и его физические свойства. Для таких исследований интересны, в частности, молекулярные сегнетоэлектрики. Информация об их структуре и ее изменениях при варьировании внешних условий является критически важной, так как позволяет оценить не только области устойчивости определенной фазы, но выявить межмолекулярные взаимодействия и структурные особенности, определяющие возникновение сегнетоэлектрических свойств.

Цель работы - изучение структурных изменений органических сегнетоэлектриков при варьировании температуры и давления с малым шагом на примере двух объектов: сегнетовой соли ( $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , калия-натрия L(+)-тартрата тетрагидрат) и R-(3)-хинуклидинола (1-азобицикло[2.2.2]октан-3-ол).

Сегнетова соль и ее структура активно изучаются с 1920-х годов. При этом до сих пор интерес к этому объекту не угас. Проведено и опубликовано множество исследований её физических свойств, дифракционных работ по уточнению структуры и теоретических моделей, объясняющих природу фазового перехода и наличие 2-х температур Кюри. Однако предшествующие кристаллографические исследования не дали однозначного ответа, какие изменения на атомном уровне предшествуют фазовым переходам. В рамках данной работы впервые методом монокристаллической рентгеновской дифракции исследована структура сегнетовой соли в температурном интервале от 308 до 100 К с шагом в 25 К, включающем обе температуры Кюри (255 К и 297 К). На основании анализа структурных изменений во многих точках по температуре сделан вывод о том, что ранее считавшиеся различными низко- и высокотемпературные параэлектрические фазы являются одной и той же фазой. Анализ температурных зависимостей параметров атомных смещений ионов K1 позволил заключить, что разупорядочение этих ионов в неполярной фазе носит преимущественно (если не исключительно) динамический характер.

R-хинуклидинол – низкомолекулярный сегнетоэлектрик, с уникально высокой для органических кристаллов температурой Кюри (400 К). В данной работе методом монокристаллической рентгеновской дифракции впервые были изучены структурные изменения сегнетоэлектрической фазы в условиях варьирования давления (до 3,4 ГПа) и температуры (90-350 К), проанализированы механизмы барической и температурной деформации, во взаимосвязи с характеристиками межмолекулярных взаимодействий. Показано, что при низких давлениях до  $\approx 0,3$  ГПа, механизм барической деформации близок к механизму температурной. При дальнейшем повышении давления, механизм деформации меняется.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00410, <https://rscf.ru/project/24-23-00410/> на оборудовании кафедры химии твердого тела НГУ и ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Авторы благодарят к.х.н. В.А. Дребуцака и д.х.н. Е.В. Болдыреву (НГУ), д.ф.-м.н. Чернышова Д.Ю. за полезные обсуждения и Смирнову Е.С. и Иванову А.Г. (ФНИЦ КИФ РАН) за техническую помощь при работе в ЦКП.*

## Детонационный наноалмаз и алмазная шихта. Результаты комплексного исследования с применением методов рассеяния лучей

О.А. Шилова<sup>1</sup>, Г.П. Копица<sup>1,2</sup>, Т.В. Хамова<sup>1</sup>, Н.В. Цвигун<sup>3</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>4</sup>,  
С.Ю. Котцов<sup>5</sup>, А.Е. Баранчиков<sup>5</sup>, А.Е. Соколов<sup>1</sup>, В.Ю. Долматов<sup>6</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>3</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>4</sup>Объединенный институт ядерных исследований,

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Дубна

<sup>5</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

<sup>6</sup>ФГУП СКТБ «Технолог», Санкт-Петербург

УДК: [546.26-162:620.3]:046.55, 538.9

Углеродные наноматериалы – фуллерены, углеродные нанотрубки, графен, уже многие годы вызывают неизменный интерес исследователей во всем мире. Одним из таких объектов является детонационный наноалмаз (ДНА), который был разработан в 60-ые годы в СССР. Его производство налажено в целом ряде стран – в России, Беларуси, Японии, КНР. Добавки ДНА улучшают целевые свойства целого ряда материалов и покрытий. В частности, ДНА успешно используют как наполнитель в машинных маслах, при электрохимическом осаждении металлов, в золь-гель технологии получения покрытий, для подавления роста патогенных бактерий и грибов [1]. ДНА является структурирующим агентом, влияющим на структуру материалов и покрытия, в т.ч. фрактальную. Обнаружено существенное положительное влияние ДНА и алмазной шихты (постдетонационный алмазосодержащий углерод, АШ) на рост и развитие растений при использовании их для предпосевной обработки семян [2]. Для осознанного использования этих материалов в качестве модифицирующих добавок важно изучать их атомную и надатомную структуру. При этом надатомная структура наночастиц ДНА до настоящего времени является дискуссионной. Наиболее эффективными методами исследования надатомной структуры подобных материалов являются методы рентгеновского и нейтронного рассеяния [3,4]. Как ДНА, так и АШ характеризуются двухуровневой фрактальной структурой, что характерно для некоторых конденсированных материалов, полученных взрывом [3]. В последние годы во ФГУП СКТБ «Технолог» были разработаны ДНА и АШ, легированные различными элементами – В, Р, Li и др. Это расширяет области применения ДНА и АШ. В последние годы встала проблема замены прекурсоров взрыва – тротила и гексогена, на другие альтернативные взрывчатые вещества, например, на доступный и недорогой тетрил. Представляло интерес проанализировать влияние как прекурсоров, так и легирующих добавок на атомную и надатомную структуру получаемых ДНА и АШ. Для ДНА и АШ, полученных на основе двух альтернативных прекурсоров, в т.ч. для АШ, легированной В, Р, Li, методами WAXS и SANS в сочетании с рядом других методов исследования (Raman, SEM, BET), произведено сравнение их атомной и надатомной структуры, морфологии и текстурных характеристик, что будет продемонстрировано в докладе.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке госзадания НИЦ КИ - ИХС РАН 1023033000122-7-1.4.3.*

1. Dolmatov V.Yu. et al. Detonation Nanodiamonds: New Aspects in the Theory and Practice of Synthesis, Properties and Applications // Russ. Chem. Rev. 2020, V. 89. No. 12. P. 1428–1462.
2. Shilova O. et al. Nanodiamond Batch Enriched with Boron: Properties and Prospects for Use in Agriculture // Biointerface Res. Appl. Chem. 2022. V. 12. P. 6134–6147.
3. Shilov V.V. et al. Fine and fractal structure and protonic conductivity of silica phosphite-nanodiamond sol-gel nanocomposites /In: D.M. Gruen, O.A. Shenderova and A.Ya. Vul' (eds.) Properties and Applications of Ultrananocrystalline Diamond. Springer, Dordrecht., 2005. V. 192. P. 299-310.
4. Шилова О.А. и др. Морфология и структура шихты детонационного наноалмаза, допированной бором //Физика и химия стекла. 2022. Т. 48. № 1. С. 52-62.

## Фурье-анализ фрактальной структуры ветвей ели

О.Д. Шнырков<sup>1,2</sup>, Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, К.А. Пшеничный<sup>1</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

УДК: 57.018.4, 53.01, 538.9

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что результат их измерения привычными нам мерами (длина, площадь, объём) зависит от выбора мерного отрезка (масштаба). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. Было показано, что боковая проекция листовенного дерева является логарифмическим фракталом, для которого выполняется закон сохранения площади [2]. Теоретические попытки описать фрактальную структуру ели, как одномерного объекта, фрактальная размерность которого определяется из зависимости суммарной длины веток от изменения масштабной единицы, приводят к противоречивым результатам [3].

Мы использовали метод численного Фурье-анализа для экспериментального изучения фрактальной структуры ветвей ели. Изучены изображения еловых лап взрослого дерева, произрастающих на разной высоте. Фурье образы изображений еловых ветвей демонстрируют одинаковую степенную зависимость спектральной интенсивности  $I(q) = Aq^\nu$ , где  $\nu = 2$  в диапазоне переданных импульсов от 0.01 до 1 см<sup>-1</sup>. Степенной закон характеризует масштабную инвариантность структуры объекта исследования, то есть объект является самоподобным на разных масштабах. Кроме того, такой степенной закон характеризует ветвящуюся структуру в диапазоне размеров от 3 до 300 см, описывающуюся логарифмическим фракталом в двумерном пространстве. На зависимости спектральной интенсивности  $I(q)$  можно обнаружить отчетливую особенность с характерным размером в 1 см, которую можно приписать иголкам, покрывающих лапы ели. Показано, что поскольку лапы ели формируются, подчиняясь закону логарифмического фрактала в двумерном пространстве, то выполняется правило, сохранения площади ветвей до и после ветвления:  $d_i l_i = n d_{i+1} l_{i+1}$ , где  $d_i$  - диаметр ветви и  $l_i$  длина ветви,  $n$  - количество ветвей, образующихся при ветвлении. Интересно отметить, что многочисленные иголки играют заметную роль в структуре ветви, как логарифмического фрактала, являясь ее неотъемлемой частью.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 20-12-00188.*

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature. New York: Freeman, 1983.
2. Grigoriev S.V., Shnyrkov O.D., Pustovoit P.M., Iashina E.G., and Pshenichnyi K.A. Experimental evidence for logarithmic fractal structure of botanical trees // Physical Review E. 2022. V. 105, P.044412.
3. Гурцев А.И., Цельникер Ю.Л. Фрактальная структура ветви дерева // Сибирский экологический журнал. 1999. Т.4, С.431-441.

# Расчёт влияния фторида фуллерена, адсорбированного на поверхности монокристалла германия, на распределение его электронных состояний

Е.А. Шрамков, Р.Г. Чумаков

Научный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

УДК: 539.233

Актуальность решения задачи управления электронной плотностью полупроводников через воздействие наведённого электрического поля (ЭП) обусловлена наличием потенциала применения этого эффекта в нанoeлектронных компонентах [1], [2]. Так в работе [1] рассматривается возможность использования молекулы фторида фуллерена  $C_{60}F_{18}$ , адсорбированного на поверхности монокристалла кремния, в качестве источника внешнего ЭП. Это обуславливается наличием у молекулы фторида фуллерена высокого значения собственного электрического дипольного момента около 11 Д [3].

В рамках текущей работы производилось оценка влияния молекулы фторида фуллерена, адсорбированной на поверхности монокристалла германия, на плотность электронных состояний германия. Основным преимуществом германия по сравнению с кремнием в качестве материала нанoeлектронных элементов является большее количество разрешённых атомных состояний, и как следствие, более широкий диапазон изменения его проводимости.

Для расчёта влияния дипольного момента молекулы были решены следующие подзадачи:

- ✓ Расчёт изначального распределения электронных состояний в германии;
- ✓ Определение положения адсорбированной молекулы фторида фуллерена;
- ✓ Расчёт изменённого распределения электронных состояний в германии, с учётом влияния ЭП от адсорбированной молекулы.

Расчёт межатомного взаимодействия производился путём численного решения уравнения Шредингера. Волновая функция, описывающая молекулярную орбиталь, получалась путём представления атомных орбиталей в виде линейных функций. Основные уравнения, описывающие данный подход:

$$\Psi_{\mu} = \sum_p c_{p\mu} \cdot \chi_p \quad (1)$$

$$\sum_q (\langle \chi_p | f | \chi_q \rangle - \varepsilon_{\mu} \cdot \langle \chi_p | \chi_q \rangle) \cdot c_{p\mu} = 0 \quad (2)$$

где  $\Psi_{\mu}$  – волновая функция молекулярной орбитали  $\mu$ ,  $\chi_p$  – вектор волновой функции атомной орбитали  $p$ ,  $\varepsilon_{\mu}$  и  $c_{p\mu}$  – энергии молекулярной орбитали,  $f$  – эффективный одноэлектронный оператор Гамильтона.

Решение системы уравнений (1-2) осуществлялось при помощи компьютерного кода, написанного на языке *Python* с применением библиотек *ASE* и *GPW*, с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>).

В результате проведённой работы были получены распределения электронных состояний для чистого монокристалла германия (монокристалла германия с одним оксидным слоем) в зависимости от наличия на его поверхности фторида фуллерена. Из полученных значений электронных плотностей можно сделать вывод о потенциальной применимости данных кластеров в области нанoeлектроники.

1. Bakhtizin R. Z. et al. Adsorption and electronic structure of single  $C_{60}F_{18}$  molecule on Si(1 1 1)-7 x 7 surface // Chemical Physics Letters. 2009. V. 482. P. 308-311.
2. Dat D.Vo. et al. Janus monolayer PtSSe under external electric field and strain: A first principles study on electronic structure and optical properties // Superlattice and microstructures. 2020. V. 147. P. 1-7.
3. Goryachevskiy A.V. et al. Modeling of the Electrical Properties of Self-Assembled Island-Type Films of Polar  $C_{60}F_{18}$  Molecules on Chemically Inactive Surfaces // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. № 5. С. 51-66.

## Трехосный спектрометр тепловых нейтронов на РК ПИК

*М.Х. Юзвюк, И.А. Зобкало*

*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 538.97

Метод трехосной спектроскопии позволяет решать широкий круг задач по исследованиям магнитных, решеточных, локализованных возбуждений в кристаллическом поле, изучению критической динамики и физики фазовых переходов. Основное преимущество метода – возможность настроить спектрометр на измерения в любой точке обратного пространства или пространства энергия-импульс.

На РК ПИК (Гатчина) активно ведется разработка трехосного спектрометра тепловых нейтронов IN1, который будет располагаться в зале горизонтальных каналов. 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 трех типов монохроматоров – на основе пиролитического графита PG(002), германия Ge(220) и упруго изогнутых пластин кремния Si(111). Основным монохроматором являются кристаллы пирографита, германий используется в случае работы с более высокими начальными энергиями, кремний – при необходимости более точной фокусировки. Кристаллы PG и Si также будут использоваться и в качестве анализаторов. Есть возможность использовать соллеровские коллиматоры расходимостью 20', 40', 60'.

Спектрометрические исследования применяются в областях квантовых технологий, электроники и информационных технологий, энергоэффективности и энергосбережения. В частности, спектрометр IN1 позволит изучать возбуждения в сверхпроводящих материалах, в материалах, применяемых для электрических трансформаторов и в области спинтроники. Применение разнообразного оборудования окружения образца (криостат, криомагнит, криопечь, камеры давления) позволит проводить исследования при вариациях температуры, давления, магнитных полей.

Основными задачами на данный момент является проектирование защиты монохроматора, анализатора и детектора, разработка документации на системы АСУ и пневматики. Особое внимание уделяется проектированию секторной части защит монохроматора и анализатора.



## Создание гибкого растяжимого светодиода на основе перовскита CsPbBr<sub>3</sub> с использованием распределенных электродов ННК кремния и фосфида галлия

А.А. Якубова<sup>1</sup>, Ф.М. Кочетков<sup>1</sup>, В.А. Масталиева<sup>1</sup>, А.С. Голтаев<sup>1</sup>, В.В. Неплох<sup>1</sup>, Д.М. Митин<sup>1</sup>,  
И.С. Мухин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>СПБАУ РАН им. Ж.И.Алферова, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>ФГАОУ ВО «СПбПУ», Санкт-Петербург

УДК: 538.91

В последние годы наблюдается стремительное развитие технологий создания гибких и растягиваемых оптоэлектронных устройств. Перспективным по фундаментальным свойствам материалом является неорганический галогенидный перовскит CsPbBr<sub>3</sub>, яркость электролюминесценции которого может достигать нескольких тысяч нит (cd/m<sup>2</sup>) [1]. Однако наиболее распространенная тонкопленочная технология устройств на основе перовскитов не может решить ряд существенных проблем: обеспечить стабильность перовскита к окружающей среде, создать устойчивые к растяжению контакты, обеспечить эффективную инжекцию носителей в электролюминесцентный слой и т.д. Для решения этих задач авторами была разработана новая архитектура устройства на основе распределённого электрода.

Ключевым решением является разработка комбинированного распределенного электрода на основе ОУНТ и массивов непрямоугольных полупроводниковых нитевидных нанокристаллов. В качестве вертикальных электродов, ориентированных вглубь электролюминесцентного слоя перовскита для лучшей инжекции, были использованы нитевидные нанокристаллы (ННК) на основе кремния (Si) и галлий фосфида (GaP), предварительно инкапсулированные в химически инертный прозрачный силиконовый полимер (ПДМС). Полимер с инкапсулированными внутрь ННК образовывал мембрану, которая сохраняла ориентацию и физическую целостность ННК после отделения от ростовой подложки, а также обеспечивала гибкость и растяжимость структуры.

Кремниевые ННК имеют ряд преимуществ в виде относительной простоты получения методом литографии и плазмохимического травления. Массив при этом получается равномерным по морфологии. Однако относительно низкое соотношение высоты к диаметру в сравнении с другими ННК, а также высокое сродство кремниевых ННК к кремниевой подложке усложняет процесс механического отделения мембраны для придания гибкости и ведет к ее механическому повреждению, что приводит к отсутствию или ухудшению электролюминесценции перовскита. В то же время, несмотря на неравномерность по высоте GaP ННК, механическое отделение проще ввиду высокого соотношения высоты к диаметру и низкому сродству к подложке. В качестве латерального электрода использовался массив одностенных углеродных нанотрубок с прозрачностью 90% и сопротивлением 84 Ω/□.

В качестве светоизлучающего слоя перовскита использовался его композитный раствор CsPbBr<sub>3</sub>/PEO/LiTFSI, обладающий свойством электрохимической ячейки, где полиэтиленоксид являлся транспортным слоем, дополнительно защищающим пленку от внешней среды, а литиевая соль являлась легирующей добавкой, обеспечивающей ионную проводимость слоя.

Таким образом, получен гибкий и растяжимый перовскитный светодиод с новой архитектурой на основе распределенного электрода, имеющий ряд преимуществ перед тонкопленочной технологией.

*Работа выполнена при поддержке госзадания FSRM-2023-0007 "Светоизлучающие, фотодетекторные и фотопреобразовательные структуры ближнего ИК и видимого диапазонов на основе полупроводниковых наноструктур"*

1. Mishra A. et al. Stable and Bright Electroluminescent Devices utilizing Emissive 0D Perovskite Nanocrystals Incorporated in a 3D CsPbBr<sub>3</sub> Matrix // Advanced materials. 2022. V. 34.

## Пространственная модель организации хроматина в ядре биологической клетки по данным малоуглового рассеяния

Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, Е.Ю. Варфоломеева<sup>2</sup>, Р.А. Пантина<sup>2</sup>, В.Ю. Байрамуков<sup>2</sup>, Р.А. Ковалев<sup>2</sup>,  
Н.Д. Федорова<sup>2</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>3</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>3</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 538.97

За последнее десятилетие был установлен факт бифрактальной организации хроматина для разных типов клеток с помощью методов малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН, УМУРН, СЭМУРН) [1-5]. Мелкомасштабный фрактальный уровень описывается моделью объемного фрактала, в то время как крупномасштабный фрактальный уровень описывается моделью логарифмического фрактала. Также эксперименты по МУРР демонстрируют корреляцию высокой транскрипционной активности ядер HeLa с наличием объемно фрактальной структуры в организации хроматина. Таким образом, наблюдаемая в эксперименте по малоугловому рассеянию нейтронов и рентгеновского излучения структура объемного фрактала соответствует структуре транскрипционно активного хроматина.

Обобщая результаты по МУР и принимая во внимание успех описания транскрипционно неактивного (закрытого) хроматина моделью фрактальной глобулы [6], мы предлагаем бифрактальную модель структуры ядра, в котором активный (открытый) хроматин существует на фоне неактивного хроматина, плотно и однородно заполняющего пространство ядра [7]. На масштабах от нескольких десятков до нескольких сотен нанометров активный хроматин формируется в структуру объемного фрактала с фрактальной размерностью равной  $D_F=2.5$ , в то время, как на масштабах от нескольких сотен нанометров до нескольких микрометров (вплоть до размера самого ядра), в ядре образуется особая структура полостей (транспортных каналов), описываемая моделью логарифмического фрактала. В классификации МУР на фрактальных объектах, модель объемного фрактала соответствует однородной самоподобной классической фрактальной структуре, характеризующейся хаусдорфовой размерностью  $D_F$  и наблюдается в эксперименте, как убывающая степенная зависимость интенсивности малоуглового рассеяния от вектора рассеяния с показателем  $2 < n < 3$  ( $v=D_F$ ), в то время как модель логарифмического фрактала описывает иерархическую структуру, которая описывается логарифмической мерой и формируется согласно принципу сохранения объема при изменении масштаба. Экспериментально структура логарифмического фрактала наблюдается как кубический закон в интенсивности малоуглового рассеяния.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00188).*

1. Iashina E.G., Velichko E.V., Filatov M.V., Bouwman W.G., Duif C.P., Brulet A., Grigoriev S.V. Additive scaling law for structural organization of chromatin in chicken erythrocyte nuclei // Physical Review E. 2017. V. 96, N.1, P.012411.
2. Iashina E.G., Filatov M.V., Pantina R.A., Varfolomeeva E.Yu., Bouwman W.G., Duif Ch.P., Honecker D., Pipich V., Grigoriev S.V. Small-angle neutron scattering (SANS) and spin-echo SANS measurements reveal the logarithmic fractal structure of the large-scale chromatin organization in HeLa nuclei // J. Appl. Cryst. 2019. V.52. P.844-853.
3. Grigoriev S.V., Iashina E.G., Bairamukov V.Yu., Pipich V., Radulescu A., Filatov M.V., Pantina R.A., Varfolomeeva E.Yu. Switch of fractal properties of DNA in chicken erythrocytes nuclei by mechanical stress // Physical Review E. 2020. V.102. P.032415.
4. Grigoriev S.V., Iashina E.G., Wu B., Pipich V., Lang Ch., Radulescu A., Bairamukov V.Yu., Filatov M.V., Pantina R.A., Varfolomeeva E.Yu. Observation of nucleic acid and protein correlation in chromatin of HeLa nuclei using small-angle neutron scattering with D<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O contrast variation // Physical Review E. 2021. V.104, P.044404.

5. Iashina E.G., Varfolomeeva E.Yu., Pantina R.A., Bairamukov V.Yu., Kovalev R.A., Fedorova N.D., Pipich V., Radulescu A., Grigoriev S.V. Bifractal structure of chromatin in rat lymphocyte nuclei // *Physical Review E*. 2021. V.104, P.064409.
6. Lieberman-Aiden E., Van Berkum N.L., Williams L., Imakaev M., Ragoczy T., Telling A., et.al. Comprehensive mapping of long-range interactions reveals folding principles of the human genome // *Science* 2009. V.326, N5950, P.289-293.
7. Яшина Е.Г., Варфоломеева Е.Ю., Пантина Р.А., Байрамуков В.Ю., Ковалев Р.А., Федорова Н.Д., Пшеничный К.А., Горшкова Ю.Е., Григорьев С.В. Пространственная модель организации хроматина в ядре биологической клетки по данным малоуглового рассеяния // *Письма в ЖЭТФ*, Т. 118, вып. 10, С. 776 – 781.

## Наблюдение корреляции транскрипционной активности хроматина и структуры объемного фрактала в ядре биологической клетки

Е.Г. Яшина<sup>1,2</sup>, Е.Ю. Варфоломеева<sup>2</sup>, Р.А. Пантина<sup>2</sup>, В.Ю. Байрамуков<sup>2</sup>, Р.А. Ковалев<sup>2</sup>,  
Н.Д. Федорова<sup>2</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>3</sup>, С.В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

<sup>3</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

УДК: 538.97

В докладе представлены результаты исследования влияния транскрипционной активности ядра на структуру хроматина с помощью метода малоуглового рассеяния рентгеновского излучения (МУРР).

Лимфоциты являются неделяющимися клетками, и, в неактивированном состоянии, в этих клетках наблюдается слабая транскрипция, т.е. происходит транскрибирование только «генов домашнего хозяйства» для поддержания жизнедеятельности самой клетки. В отличие от своих здоровых аналогов, в раковых лимфоцитах наблюдается высокая транскрипционная активность, поскольку им требуется наработка большого количества белков для осуществления деления. Таким образом, можно заключить, что основным отличием лимфатических клеток от их раковых аналогов является высокая транскрипционная активность последних.

Исследование организации хроматина в ядрах нормальных клеток лимфоцитов крысы (низкая транскрипция) и ядрах раковых клеток лимфоцитов NC-37 (высокая транскрипция) проводилось на установке малоуглового рассеяния рентгеновского излучения Xepox 3.0 (ОИЯИ, Дубна, Россия). Экспериментальные кривые интенсивности малоуглового рассеяния на ядрах крысиных лимфоцитах и ядрах NC-37 в диапазоне переданных импульсов от 0.003 до 0.06 нм<sup>-1</sup> описываются кубическим законом рассеяния (логарифмический фрактал). Нижняя граница, наблюдаемой в рассеянии структуры логарифмического фрактала соответствует 100 нм в обоих типах клеток. Ранее измеренные результаты малоуглового нейтронного рассеяния на установках (KWS-3 и KWS-2, MLZ, Гархинг, Германия) демонстрируют, что кубический закон рассеяния распространяется до масштабов, ограниченных только размерами ядра в обоих типах клеток.

При переданных импульсах, больших 0.06 нм<sup>-1</sup>, в ядрах лимфоцитов наблюдается рассеяние, описываемое законом  $Q^{-n}$   $n=4$  в диапазоне переданных импульсов 0.08 - 0.2 нм<sup>-1</sup>, что соответствует рассеянию на нижней границе логарифмического фрактала (минимальный размер полости транспортной системы 100-60 нм). А при переданных импульсах 0.2 - 1.0 нм<sup>-1</sup> наблюдается закон рассеяния  $Q^{-n}$   $n=1.93(3)$ , что может быть интерпретировано, как плоская структура. В то время, как ядра раковых лимфоцитов линии NC-37 при переданных импульсах, больших 0.06 нм<sup>-1</sup>, наблюдается рассеяние, описываемое законом  $Q^{-n}$   $n=2.56(5)$  в диапазоне переданных импульсов 0.06 - 3 нм<sup>-1</sup>, что соответствует рассеянию на структуре объемного фрактала с размерностью близкой к 2.5.

Такая же корреляция объемно фрактальной структуры с высокой транскрипционной активностью клетки была обнаружена в экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов и рентгеновского излучения на ядрах HeLa и ядрах HeLa с пониженной транскрипционной активностью, осуществленной с помощью культивирования в условиях дефицита питательной среды и с помощью ингибирования транскрипции актиномицином D [1].

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00188).*

1. Яшина Е.Г., Варфоломеева Е.Ю., Пантина Р.А., Байрамуков В.Ю., Ковалев Р.А., Федорова Н.Д., Пшеничный К.А., Горшкова Ю.Е., Григорьев С.В. Пространственная модель организации хроматина в ядре биологической клетки по данным малоуглового рассеяния // Письма в ЖЭТФ. Т. 118. В. 10. с.776 – 781.