

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФГБУН «УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР»
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

**МАТЕРИАЛЫ
XIII ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
“КОМУ-2021”**

18-22 октября 2021 года

ИЖЕВСК

УДК 538.9, 544
ББК 22.3, 24.5

Материалы XIII Школы-конференции молодых ученых “КоМУ-2021”: Ижевск: УдмФИЦ УрО РАН, 2021. – 149 с.

Отв. редактор: Бакиева Ольга Ринатовна

Сборник содержит материалы устных и приглашенных докладов, представленных на XIII Школе молодых ученых “КоМУ-2021” проводимой Удмуртским федеральным исследовательским центром УрО РАН (г. Ижевск, 18-22 октября 2021 г.).

Опубликованные тексты отражают результаты научных исследований по направлениям: физика и химия материалов и наноразмерных систем, теоретическая физика: магнитные явления, газодинамика, неравновесные метастабильные состояния; методики моделирования, искусственный интеллект, спектроскопические методы исследований, и т.д.

Все работы публикуются в авторском издании. Редакторами была проведена только техническая корректура без изменения содержания и смысла текста докладов.

ISBN 978-5-6047339-0-5

© Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ ДЛЯ АЛЮМИНИЙ-ИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА	9
Аблакатов А.М., Валеев Р.Г.	
ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ	11
Александров Н.В., Гостева Е.А., Старков В.В.	
ИЗУЧЕНИЕ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУР С НАНОЧАСТИЦАМИ ЖЕЛЕЗО-КИСЛОРОД НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ ФЕРРИТИНА И КЛЕТОК E.COLI.	13
Беликов Е.А., Праслова Н.В., Паринова Е.В., Коюда Д.А., Пислярук А.К., Чувенкова О.А., Преображенская Е.В., Антипов С.С., Сиваков В., Турищев С.Ю.	
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ОТЖИГА И МАТЕРИАЛА ПРИМЕСИ HfO_2 НА ПРОЦЕССЫ ДИФФУЗИИ АЗОТА И КИСЛОРОДА НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ HfO_2/TiN	15
Бугаев А. В., Конашук А. С., Филатова Е. О.	
НЕАФФИННЫЕ ДЕФОРМАЦИИ И ЛОКАЛЬНО-УПРУГИЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ	16
Конюх Д.А., Семенов А.А., Бельтюков Я.М.	
ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ БОРАТНЫХ СТЕКОЛ ПО ДАННЫМ XANES СПЕКТРОСКОПИИ	18
Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Алексеев Р.О., Тригуб А.Л., Велигжанин А.А., Шахгильдян Г.Ю., Авакян Л.А., Бугаев Л.А., Сигаев В.Н.	
МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖСЛОЕВОЙ ОБЛАСТИ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ Sr/Be В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ СЛОЁВ	19
Фатеева Е.С., Сахоненков С.С., Филатова Е.О.	
ПЛАЗМЕННАЯ ОБРАБОТКА ПОВЕРХНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ КЕРАМИК $\text{Bi}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{FeO}_3$	20
Гаджимагомедов С.Х., Рабаданова А.Э., Алиханов Н.М.-Р., Эмиров Р.М., Палчаев Д.К., Мурлиева Ж.Х., Гаджиев М.Х., Сайпулаев П.М., Ильичев М.В.	
ГАЗОНАПОЛНЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА: ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СПОСОБНОСТЬ К БИОРАЗЛОЖЕНИЮ	22
Григорьева Е.А., Колесникова Н.Н., Попов А.А., Ольхов А.А.	
РАСЧЕТ НАПРЯЖЕНИЙ ДИЛАТАЦИОННОЙ НИТИ В КЛИНЕ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ УГЛОМ РАСТВОРА	24
Гудкина Ж.В., Гуткин М. Ю., Красницкий С. А., Аргунова Т. С.	
ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ДИОДНЫЙ ЛАЗЕР НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 450 НМ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО ГРАФЕНА	26
Хацкевич Л.А., Стяпшин В.М., Михеев К.Г., Зонов Р.Г., Михеев Г.М.	
ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК НА СТЕКЛЕ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ	27
Картапова Т.С., Гильмутдинов Ф.З., Еремина М.А.	
АНАЛИЗ EXELFS СПЕКТРОВ В СИЛЬНО ОГРАНИЧЕННОМ ДИАПАЗОНЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ	28
Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р.	
ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ДЛЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА TiAl И ДЛЯ ЧИСТЫХ Ti И Al	29
Лекомцева А. А., Добышева Л.В.	

ПОВЫШЕНИЕ ПРОЧНОСТИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СПЛАВА Cu-0,5%Cr-0,08%Zr ПОСЛЕ РОТАЦИОННОЙ КОВКИ И СТАРЕНИЯ	31
Мартыненко Н.С., Бочвар Н.Р., Рыбальченко О.В., Просвирнин Д.В., Бодякова А.И., Беляков А.Н., Морозов М.М., Юсупов В.С., Добаткин С.В.	
АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА ПЛЁНКАХ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО ГРАФЕНА	33
Михеев К.Г., Зонов Р.Г., Фатеев А.Е., Булатов Д.Л., Могилева Т.Н., Михеев Г.М.	
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ОСАДКОВ АСФАЛЬТЕНОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В ПРОТОЧНОМ РЕЖИМЕ ПРИ ПРОКАЧКЕ АЦЕТОНА В МИКРОФЛЮИДНОМ УСТРОЙСТВЕ, МЕТОДОМ ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ С МАТРИЧНЫМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ	34
Милованов Е.	
ИССЛЕДОВАНИЕ НУКЛЕАЦИИ CaCO₃ НА БИООРГАНИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЕ В ПРОТОЧНОЙ ЯЧЕЙКЕ	36
Минеев А. М., Рыбин Д. С., Бельтюков А. Н., Болдырева Е. В.	
ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ СТРУКТУР МНОГОСЛОЙНОГО ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ	38
Леньшин А.С., Пешков Я.А., Величко К.Е., Канныкин С.В., Минаков Д.А.	
СТРУКТУРА И ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ АТОМОВ Fe В ИНВЕРСНОМ ПОЛНОМ СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА CoFe₂Si	39
Пешков Я.А., Буйлов Н.С., Ивков С.А., Нестеров Д.Н., Барков К.А., Потуданский Г.П., Сёмов Ю.Г., Базлов А.И., Юраков Ю.А.	
ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В VCo₂	41
Путков А.Е., Тетерин Ю.А., Рыжков М.В., Тетерин А.Ю., Маслаков К.И., Иванов К.Е., Калмыков С.Н., Петров В.Г.	
ТЕРМООБРАБОТКА НАНОПОРОШКОВ СОСТАВА BaZrO₃	43
Гаджимагомедов С.Х., Сайпулаев П.М., Эмиров Р.М., Алиханов Н.М., Магомедов К.Э., Рабданова А.Э.	
АЛЬГИНАТ НАТРИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ НОСИТЕЛЬ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ФИЦИНА ПУТЕМ ВКЛЮЧЕНИЯ В ГЕЛЬ	45
Щеголеватых Е.А., Ольшанникова С.С., Наразина Д.А., Холявка М.Г., Артюхов В.Г.	
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА	47
Созонова Н.М., Бакиева О.Р.	
ПРИМЕНЕНИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК CuSe/Se ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ «БЫСТРОЙ» ОСИ ЧЕТВЕРТЬВОЛНОВЫХ ПЛАСТИНОК	49
Стяпшин В. М. , Когай В. Я. , Михеев Г. М.	
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА НАНЕСЕНИЯ ЦИНКОВЫХ ПОКРЫТИЙ	51
Суксин Н.Е., Петров В.Г.	
ТОКОПРОВОДЯЩЕЕ, ЗАЩИТНОЕ ГИДРОФОБНОЕ ПОКРЫТИЕ	55
Мамаду Тамбура	
ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАСТИН АНТИМОНИДА ИНДИЯ ПОСЛЕ ПРОЦЕССОВ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ	57
Зареченская А.А., Гостица Е.А., Завражин Д.А.	
ОСОБЕННОСТИ РОСТА И СОСТАВА ГЕТЕРОСТРУКТУР ALXGA1-XN/ALN/SI, ВЫРАЩЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БУФЕРНОГО СЛОЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ПА МПЭ	60
Золотухин Д.С., Леньшин А.С., Бельтюков А.Н., Середин П.В., Мизеров А.М.	

ФОРМИРОВАНИЕ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ В ЭЛЕКТРОЛИТ РАЗЛИЧНЫХ ДОБАВОК	61
Матвеева Н. С., Грызунова Н.Н.	
СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ БЕСКИСЛОРОДНОГО ГРАФЕНА И НАНОРАЗМЕРНОГО CeO₂	63
Пономарев И.В., Афзал А.М., Трусова Е.А.	
СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОБИОГИБРИДНОГО МАТЕРИАЛА «КЛЕТКИ ФИБРОБЛАСТЫ МЫШИ – НАНОЧАСТИЦЫ КРЕМНИЯ»	65
Титова С.С., Коюда Д.А., Цурикова У.А., Осминкина Л.А., Какулия Ю.С., Чувенкова О.А., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Паринаова Е.В., Турищев С.Ю.	
КОМПЛЕМЕНТАРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ВКЛЮЧАЮЩИЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В УЛЬТРАМЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ	67
Турищев С.Ю.	
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ МАГНЕТИТА И ЕГО СТРУКТУРНЫЕ И ТЕКСТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ	68
Эмиров Р.М., Гаджимагомедов С.Х., Алиханов Н.М.-Р., Рабаданов М.Х.	
ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ 2,4-ДИНИТРОФЕНОЛА ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА	69
Дорошенко А. В., Куркин Н. А., Волков А. С., Томина Е. В.	
ГРАДИЕНТНО-УСТОЙЧИВЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЯ КАНАХИЛЛАРДА С РЕАЛЬНЫМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ	71
Игнатъев А. Ю.	
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖФАЗНЫХ ОБЛАСТЕЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО НАПЫЛЕНИЯ	73
Каратаев А.В., Гайсин А.У., Соломонов А.В., Филатова Е.О.	
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИЗМЕЛЬЧЕННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ (НА ПРИМЕРЕ ЛЕВЗЕИ САФЛОРОВИДНОЙ) В МНОГОСТУПЕНЧАТОЙ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ-УДАРНОЙ МЕЛЬНИЦЕ НА ПРОЦЕССЫ ЖИЗНЕДЕЯТЕЛЬНОСТИ GALLERIA MELLONELLA	75
Осокина А.С., Жиров Д.К.	
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРОХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ ТВЁРДОГО РАСТВОРА ZN_xPB_{1-x}S	77
Прокопьева Т.В., Аверкиев И.К.	
ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАХ-ФАЗ В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ	80
Аверкиев И. К., Еремина М.А., Бакиева О.Р.	
ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В БИНАРНОМ СПЛАВЕ С ПОМОЩЬЮ ОГРАНИЧЕННОЙ МАШИНЫ БОЛЬЦМАНА	82
Широбокова К.А., Гильмутдинов В.Ф., Тимиргазин М.А.	
ПРОВЕДЕНИЕ СРАВНИТЕЛЬНОЙ ОЦЕНКИ ПОВЕРХНОСТИ ДЕНТАЛЬНЫХ ИМПЛАНТАТОВ РАЗНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ	84
Разбицкая Л.Е., Гостица Е.К., Дымников А.Б.	
СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ И ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЕГИРОВАННЫХ ТИТАНОВЫХ СЛОЕВ, СФОРМИРОВАННЫХ ВНЕВАКУУМНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ НАПЛАВКОЙ, ПОСЛЕ КОРРОЗИОННЫХ ИСПЫТАНИЙ	87
Исаев Д. Д., Кривенцов В. В., Голковский М. Г.	

ПОРИСТЫЕ СПЕЧЁННЫЕ ТЕЛА И ИХ ХАРАКТЕРИСТИКИ.....	89
Барышев О.Б., Гончаров О.Ю., Елькин И.А., Валеев Р.Г., Чулкина А.А.	
АНАЛИЗ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ КОНСОЛИДАЦИЕЙ ПОРОШКА Ta, ПО МИКРОСКОПИЧЕСКИМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ	91
Белослудцева А.А., Елькин И.А., Столбов К.С., Барышев О.Б., Аверкиев И.К.	
ВЫСОКОТОЧНЫЕ СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНО ВЫРАЩЕННЫХ НАНОСЛОЕВ ОЛОВА НА КРЕМНИИ	93
Бойков Н.И., Чувенкова О.А., Тонких А.А., Паринова Е.В., Коюда Д.А., Манякин М.Д., Курганский С.И., Макарова А., Смирнов Д., Овсянников Р., Турищев С.Ю.	
АЛГОРИТМ СЕЛЕКЦИИ ГИДРОАКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО ФАЗОМАНИПУЛИРОВАННОМУ КОДУ	95
Егорова Е.Э., Милич В.Н.	
ФОРМЫ ИМПУЛЬСОВ ФОТОТОКА В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ CUSE/SE ПРИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ.....	96
Фатеев А. Е., Когай В. Я., Могилева Т. Н., Свирко Ю. П., Михеев Г. М.	
ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ ФАЗОВО-ПОЛЕВАЯ МОДЕЛЬ АЛЬФА-ГАММА ПРЕВРАЩЕНИЙ В ЖЕЛЕЗЕ ПРИ СИЛЬНО НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ.....	98
Копытов В.А. Лебедев В.Г.	
ОПИСАНИЕ КИНЕТИКИ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ФАЗ В БИНАРНОМ РАСПЛАВЕ AL-Y МЕТОДОМ ФАЗОВОГО ПОЛЯ	100
Коробейников С. А.	
ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ЦЕОЛИТОВ ТИПА Cu-MOR	102
Курзина Т.И., Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Срабионян В.В., Дурыманов В.А., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.	
ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МОРФОЛОГИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ 3Ti-Si-2C, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СВС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУЛЛЕРИТА И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	103
Ларионова Н.С., Никонова Р.М.	
СПРЕЙ-ПИРОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ФОСФАТА ИТТРИЯ, ДОПИРОВАННОГО Er^{3+} ..	104
Ласточкин Д. А., Мальцев С. А., Томина Е. В.	
КРИЗИСЫ НАУКИ: ЧТО НУЖНО ЗНАТЬ МОЛОДОМУ УЧЁНОМУ	105
Ломаев С.Л.	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ШИРОКОПОЛОСНОГО РАДИОДОСТУПА НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ПАО «УДМУРТНЕФТЬ» ИМЕНИ В.И. КУДИНОВА	107
Мухаметдинова С.Г., Коршунов А.И.	
ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ПЕРОВСКИТНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	110
Нечитайлова И.О., Поносова Е. Е., Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Срабионян В. В., Авакян Л. А., Бугаев Л. А.	
ИССЛЕДОВАНИЯ МОРФОЛОГИИ, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ 3D-РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МАССИВОВ НИТЕВИДНОГО КРЕМНИЯ	111
Пелагина А.К., Паринова Е.В., Коюда Д.А., Сиваков В., Овсянников Р., Смирнов Д., Макарова А., Yermukhamed , Ming T., Турищев С.Ю.	
СИММЕТРИЯ НИЖНЕЙ ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ СЕЛЕНИДА ЦИНКА.....	113
Перевощиков Д.А., Соболев В.Вал., Калугин А.И.	

ОРГАНИЧЕСКИЕ ПЛЁНКИ, СИНТЕЗИРОВАННЫЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖЕЛЕЗА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ АДАМАНТАНА	115
Поздеев В.А., Шаков А.А., Ломаева С.Ф.	
МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ МОНООКСИДА МЕДИ	116
Радина В.Р., Манякин М.Д., Курганский С.И.	
ОЦЕНКА ПРИМЕНЕНИЯ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ С РАЗЛИЧНОЙ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ АМИНОКИСЛОТ.....	118
Рыбакова А.И., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.	
ЗАЩИТА МЕТАЛЛОВ ОТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРОЗИИ КОМПОЗИЦИЯМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ИНГИБИТОРОВ.....	119
Семилетов А.М.	
ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ СМАЧИВАНИЕ ВОДНЫМИ РАСТВОРАМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ..	120
Шаймухаметова И.Ф., Богданова С.А.	
ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИЯ 1,2-ДИ(4-ПИРИДИЛ)ЭТИЛЕНА В РАСТВОРАХ.....	122
Шайдуллина А.Ф., Волков М.Ю., Савостина Л.И., Туранов А.Н.	
КОСМЕЦЕВТИЧЕСКИЕ БИОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ГЕЛЕЙ	123
Шигабиева Ю.А., Богданова С.А., Сысоева М.А.	
ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ МНОГОСЛОЙНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЗЕРКАЛ МО/ВЕ В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА.....	124
Соломонов А.В., Каратаев А.В., Гайсин А.У., Филатова Е.О.	
МЕТОД ПЕРИОДОГРАММНОГО АНАЛИЗА ОТРАЖЁННЫХ ГИДРОАКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ.....	126
Тугбаева А.С., Милич В.Н., Широков В.А.	
ОСОБЕННОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПЛЕНОК ПММА, ДОПИРОВАННЫХ АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ Tb(III) И Eu(III)	128
Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Карякин М.Е., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.	
ПОЛУЧЕНИЕ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЕЛЕВЫХ СИСТЕМ С НЕИОНОГЕННЫМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ.....	130
Абрамов В.А., Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г.	
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ	131
Гостевская А.Н. Маркидонов А.В.	
МОРФОЛОГИЯ, СТРУКТУРА И СОСТАВ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ ВЫРАЩЕННЫХ В ПОРАХ SiO₂ НА КРЕМНИИ	132
Какулия Ю.С., Канюков Е.Ю., Паринова Е.В., Коюда Д.А., Сиваков В., Канныкин С.В., Ляйтнер Т., Овсянников Р., Турищев С.Ю.	
ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ КЕРАМИК YBCO В ЗАВИСИМОСТИ.....	134
Рабданова А.Э., Гаджимагомедов С.Х., Палчаев Д.К., Эмиров Р.М.	
МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ МНОГОСТУПЕНЧАТОЙ МЕЛЬНИЦЕЙ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МЕХАНОАКТИВАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ	136
Жиров Д.К., Благодатский Г.А., Жданов В.С.	
ПЛАЗМОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ.....	138
Бельтюков А.Н., Чукавин А.И.	

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ (БИО)СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ	141
Комкова М.А., Карякин А.А.	
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АСФАЛЬТОСМОЛОПАРАФИНОВЫХ ОТЛОЖЕНИЙ В СКВАЖИНЕ	142
Титова А.В., Макаров С.С.	
АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ	146

СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ ДЛЯ АЛЮМИНИЙ-ИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА

¹Аблакатов А.М., ²Валеев Р.Г.

rishatvaleev@udman.ru

¹ АО «Элеконд», Россия, г. Сарапул, ул. Калинина, 3

² УдмФИЦ УрО РАН, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Алюминиево-ионные батареи представляют собой класс перезаряжаемых батарей, в которых ионы алюминия обеспечивают энергию, протекая от положительного электрода батареи, анода, к отрицательному электроду, катоду (рис. 1).

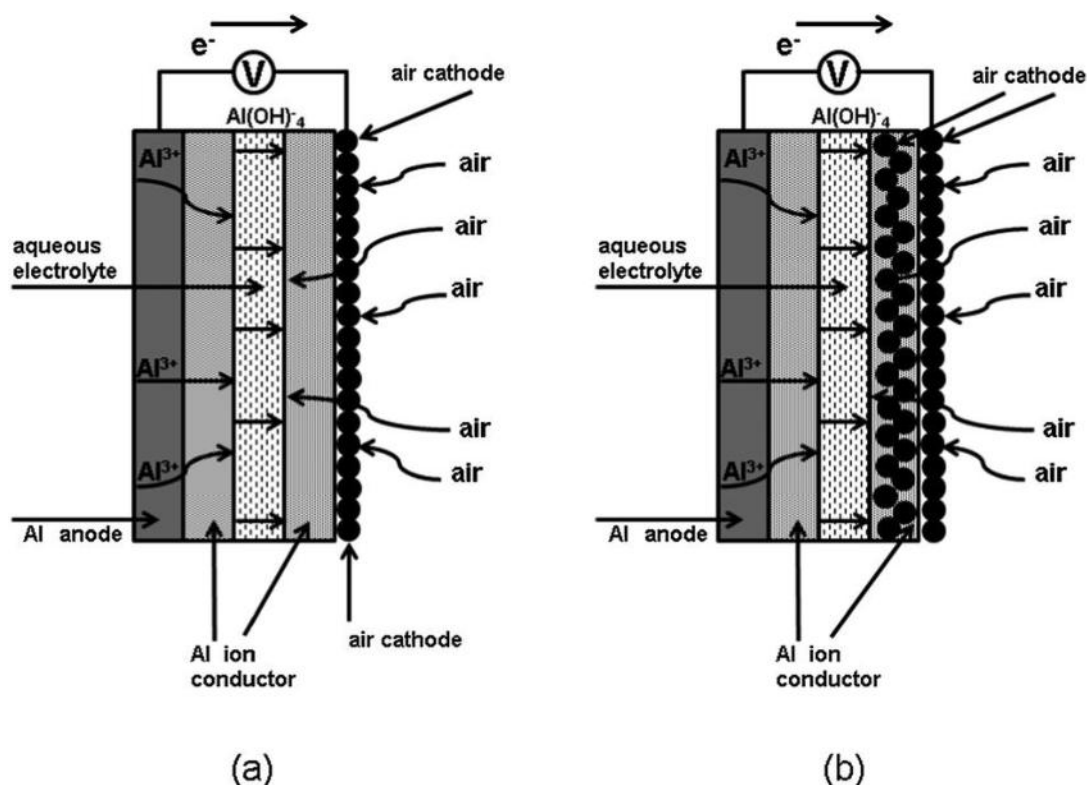


Рис.1. Схема заряда (a) – разряда (b) электрохимического элемента на базе алюминиевого анода и воздушного катода из углерода [1].

При разной толщине фольги и отжиге, было отобрано по 8 образцов.

Анодирование проводилось в 0,3M H₂SO₄ при 25V с получением заряда 500 Кулон, в 0,3M C₂H₂O₄ при 40V с получением заряда 500 Кулон, в 0,1M H₃PO₄ при 120V проводилось в 2 этапа— 1 этап анодирования до заряда 100 кулон, 2 этап до заряда 250 кулон.

Данные образцы были исследованы под микроскопом (Рис. 2), наиболее выраженные поры на образцах которые анодировались в фосфорном электролите.

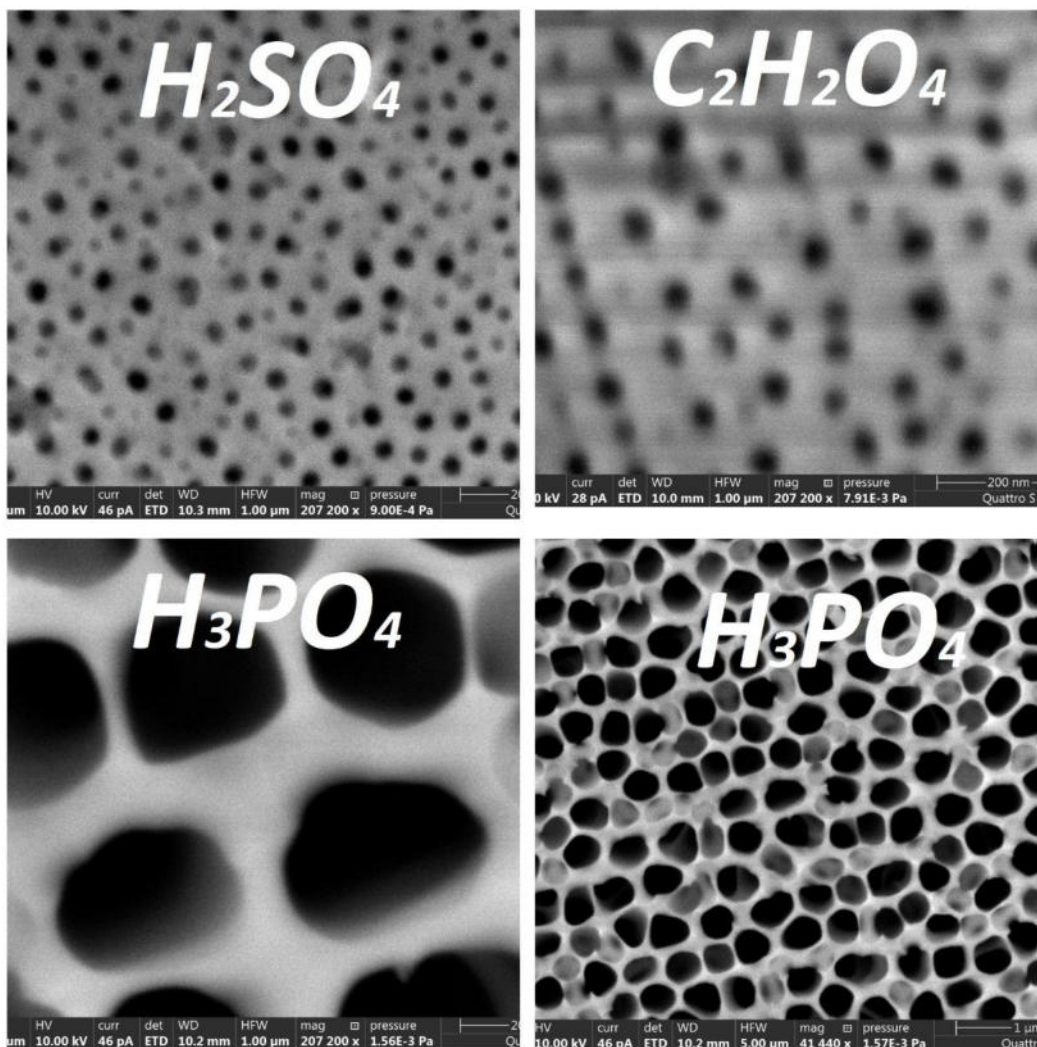


Рис. 2. Электронно-микроскопические изображения поверхности фольг с выращенным слоем пористого оксида.

Дополнительно были изготовлены образцы для нанесения различными способами, углеродной суспензии, с разной концентрации кислоты, для поиска и применения возможного удаления оксидного слоя между **фольгой** и углеродом для увеличения электропроводности. Так же ведется работа по поиску инновационного метода нанесения углеродного слоя на фольгу.

Список литературы

1. R. Mori. A novel aluminium–air secondary battery with long-term stability. RSC Adv., 4(4), (2014) 1982–1987.

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

^{1,*} Александров Н.В., ¹Гостева Е.А., ²Старков В.В.

*adelsandrov@mail.ru

¹ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва,
Россия

² Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов
Российской академии наук, Черноголовка, Россия

В настоящее время актуальной задачей в области альтернативной энергетики является разработка новых типов протонно-проводящих мембран для топливных элементов [1].

В данной работе для создания пористых структур с разной морфологией пор использовался метод электрохимического травления монокристаллических пластин Si в растворах электролита на основе плавиковой кислоты и различных растворителей [2].

В зависимости от параметров проведения процесса получены структуры с различной морфологией пористого слоя, изображения полученных структур показаны на рисунке 1 (а, б, в).

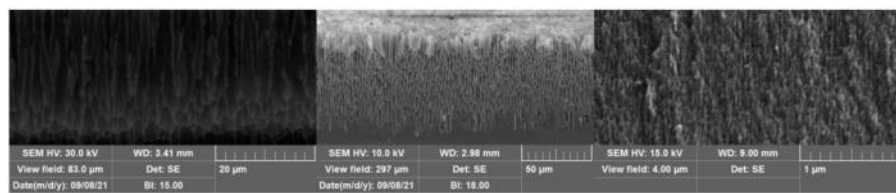


Рис. 1. СЭМ изображения пористых структур: а) ГПК-Вар; б) макропористая структура; в) нанопористая структура.

Так, при травлении кремниевых пластин марки КДБ (100)-8,6 в растворе HF : ISO в соотношении 6 : 1 + STAC (где STAC – хлорид цетилтриметиламмония) при плотности тока $j = 15 \text{ мА/см}^2$ сформирована структура с плавно изменяющимся диаметром пор. В литературе такие структуры носят название ГПК-Вар [3]. При травлении в течение 60 мин глубина полученного пористого слоя составила 43 мкм, диаметр пор изменялся от 120 единиц нм до 4 единиц мкм, согласно проведенному анализу СЭМ на сколах образцов, показанных на рис 1 а.

Для получения макропористой структуры травление проводили с использованием кремния марки КДБ 8,6 (100), в растворе электролита HF : DMF = 1 : 10 при плотности тока $j = 15 \text{ мА/см}^2$ в течение 60 мин. Глубина образца составила 80 мкм при среднем диаметре пор 2 мкм. Скан изображение структуры представлено на рис 1 б.

При использовании электролита $\text{HF} : \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = 1 : 1 + \text{STAC}$, на пластинах кремния марки КДБ 0,005 (100), при плотности тока $j = 80 \text{ mA/cm}^2$ в течение 60 мин, была сформирована нанопористая структура, представленная на рис 1 в. Согласно результатам СЭМ, поры имеют одинаковый диаметр по глубине травления, с размерами порядка 20 нм при глубине пористого слоя порядка 180 мкм.

Для получения мембран на основе полученных образцов проведено удаление непротравленной части пластин кремния путём его шлифовки до проявления пористого слоя (рис. 2).



Рис. 2. Процесс проявления пористого слоя

В результате проведения работы разработана и опробована технология получения мембран на основе пористого кремния; определены основные этапы – предварительное электрохимическое травления монокристаллических пластин кремния и последующая шлифовка непротравленного слоя.

Экспериментально установлено, что:

- увеличение времени травления ведёт к увеличению толщины пористого слоя;
- увеличение концентрации HF в растворе электролита способствует уменьшению размера формируемых пор.

Список литературы

1. Starkov V.V. Preparation, properties and application of porous silicon, All materials, Encyclopedic reference book, 2009, pp. 13–21.
2. Feng Z.C. Porous silicon / Z.C. Feng, R. Tsu. – World Scientific Publishing, – 1994. – 488 p.
3. Starkov V.V., Gosteva E.A. Silicon Structures with Variable Morphology of Pores Methods of Obtaining Physical and Optical Properties, Journal of The Electrochemical Society, 2018, pp. 1-2.

ИЗУЧЕНИЕ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУР С НАНОЧАСТИЦАМИ ЖЕЛЕЗО-КИСЛОРОД НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ ФЕРРИТИНА И КЛЕТОК E.COLI.

¹Беликов Е.А., ¹Праслова Н.В., ¹Паринова Е.В., ¹Коюда Д.А., ¹Пислярук А.К., ¹Чувенкова
О.А., ²Преображенская Е.В., ^{1,3}Антипов С.С., ⁴Сиваков В.,
¹Турищев С.Ю.

E-mail: bp4nth3r@mail.ru

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия,

²Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

³Московский государственный университет технологий и управления, Москва, Россия

⁴Лейбниц институт фотонных технологий, Йена, Германия

Развитие науки и техники происходит очень быстро. Ученые все чаще прибегают к различным способам, которыми улучшают свои технологии. Технологические устройства становятся все меньше с каждым разом, а их функционал увеличивается. Но, в какой-то момент размер может дойти до критического значения, когда ученым нужно будет прибегнуть к новым способам, улучшить производительность устройства. Область электроники не исключение, в ней для улучшения функциональных характеристик используют гибридные материалы. Бактериальные культуры *Escherichia coli* и получаемый из них в процессе синтеза белок DPS являются наглядным примером гибридных структур. Они являются легко воспроизводимыми в лабораторных условиях. Говоря о белке DPS, стоит отметить, что он является уникальным наноразмерным объектом, включающим в себя органическую оболочку и внутреннюю полость, в которой формируется минерализованное ядро, представляющее широкий практический и научный интерес. В его состав входят ионы Fe^{3+} , и технология воспроизводимости таких железосодержащих наночастиц может быть очень востребованной. В качестве источника таких наноструктур выступает клеточная культура *Escherichia coli*, изучение которой является также крайне необходимым. Важно получить информацию об исходной бактерии, ее морфологических особенностях, а именно поверхности – мембраны. Более того, важным является и получение данных о ее атомном и электронном строении. Удобными инструментами для выполнения этих задач являются сканирующая электронная микроскопия (Scanning Electron Microscopy - SEM), которая может быть успешно применена для изучения морфологии различных объектов, в том числе биологического происхождения. Необходимым является получение данных о физико-химическом, а также атомном и электронном строении клеточной культуры, для этого могут быть использованы рентгеноэлектронные методы, например рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS - X-ray photoelectron spectroscopy), которая обладает высокой чувствительностью к локальному окружению атомов

заданного сорта. В данной работе был впервые применен метод фотоэмиссионной электронной микроскопии (PhotoEmission Electron Microscopy - PEEM) являющийся сочетанием двух таких подходов, позволяющих получать "точечную" информацию не только об атомном и электронном строении, а также и о морфологии малых объектов, в том числе клеток, что крайне актуально.

В данной работе представлены результаты PEEM и XPS исследований клеток E.coli K12 MG1665 в сочетании с контролем свойств методами SEM и XPS. При этом SEM исследования проводились до и после измерений XPS и PEEM. Исходные пробы осаждались на чистые подложки кремния и хранились в лабораторных условиях. Измерения XPS проводились при Al Ka возбуждении (1486.61 eV), в ходе контрольных измерений SEM использовалось ускоряющее напряжение от 2,5 до 20 кВ. Получение изображений методом PEEM производилось при излучении ртутной лампы ~5 эВ.

Данные, полученные при SEM исследованиях исходных клеток E.coli показали четко детектируемое распределение клеток по всей подложке и позволили получить изображения поверхности отдельных клеток с высоким разрешением. При проведении контрольные измерения XPS не выявлено каких-либо загрязнений поверхности, а также показано присутствие всех компонентов, свойственных осажденной клеточной культуре, и остаточным следам буферного раствора. Данные PEEM продемонстрировали возможность эффективного получения изображений биообъектов: массива клеток E.coli. Полученные PEEM изображения отдельных клеток хорошо соотносятся с данными, полученными при применении метода SEM. Исследования SEM, проведенные после XPS и PEEM экспериментов, продемонстрировали лишь частичную деградацию мембраны бактерии. Полученные результаты показывают дальнейшую перспективу проведения эффективных синхротронных исследований для химически-селективного микроскопического анализа поверхности массива клеток, например E.coli, вплоть до возможности спектромикроскопии отдельной бактерии.

По данным фотоэлектронных спектров высокого разрешения, снятых с высоким накоплением, гибридные структуры на основе клеток E.coli содержат железо и его оксиды, как известно составляющие "ядер" молекулярных гибридных наноструктур на основе белка ферритина Dps. Следовательно, клетки можно рассматривать как воспроизводимую систему производства гибридных нано- био- структур на основе молекул белка Dps.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20180)

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ОТЖИГА И МАТЕРИАЛА ПРИМЕСИ HfO_2 НА ПРОЦЕССЫ ДИФФУЗИИ АЗОТА И КИСЛОРОДА НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ HfO_2/TiN

Бугаев А. В., Конашук А. С., Филатова Е. О.

bugaev.sasha99@mail.ru

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

Тонкие плёнки диоксида гафния (HfO_2) являются основными кандидатами для использования в энергонезависимых запоминающих устройствах, благодаря возможности получения в них сегнетоэлектрических свойств. Возникновение сегнетоэлектричества в HfO_2 является следствием образования в структуре нецентросимметричной, нестабильной при нормальных условиях, орторомбической кристаллической модификации [1]. Существуют разные пути создания орторомбической модификации в плёнке HfO_2 : 1) путём легирования плёнки примесью; 2) путем создания внутреннего напряжения в плёнке в результате осаждения электродов (TiN или TaN) с последующим высокотемпературным отжигом. Важную роль в образовании орторомбической фазы и результирующих электрофизических свойствах (величина остаточной поляризации и токов утечки, число стабильных циклов переключения) играют процессы на межфазной границе HfO_2/TiN .

Установлено, что перераспределение азота и кислорода между сегнетоэлектриком и электродом, влияет на кристаллическую структуру образца и ведёт к образованию орторомбической фазы в ней [2]. Целью данной работы было обнаружение связи между процессами диффузии азота и кислорода в системе HfO_2/TiN и степенью легирования, а также условиями её отжига. В качестве примесей использовались кремний и алюминий, образцы отжигались при температурах 850°C и 1000°C . Все измерения проводились в центре синхротронного излучения Petra III, на канале вывода синхротронного излучения P22 методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высоких энергий (HAXPES).

В ходе проведённых измерений нами было выявлено, что температурный отжиг уменьшает количество TiN_xO_y на границе HfO_2/TiN , возвращая кислород в HfO_2 , причём с ростом температуры этот эффект проявляется всё сильнее. Также анализ спектров показал, что при увеличении температуры отжига всё больше азота покидает TiN , переходя в нижележащие слои. Наличие алюминия ведёт к образованию алюмината гафния HfAl_xO_y , что, судя по полученным данным измерений рентгеновской дифракции, способствует образованию орторомбической фазы. Образцы с примесью кремния демонстрируют доминирование в кристаллической структуре несегнетоэлектрической тетрагональной фазы.

Список литературы

1. M. Hoffmann, U. Schroeder, T. Schenk et al. "Stabilizing the ferroelectric phase in doped hafnium oxide" J. Appl. Phys. 118, 072006 (2015) (doi: 10.1063/1.4927805)
2. L. Baumgarten, T. Szyjka, T. Mittmann, M. Materano, Y. Matveyev, C. Schlueter, T. Mikolajick, U. Schroeder, M. Müller et al. "Impact of vacancies and impurities on PVD- and ALD-grown HfO₂ films" Appl. Phys. Lett. 118, 032903 (2021); (doi: 10.1063/5.0035686)

НЕАФФИННЫЕ ДЕФОРМАЦИИ И ЛОКАЛЬНО-УПРУГИЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

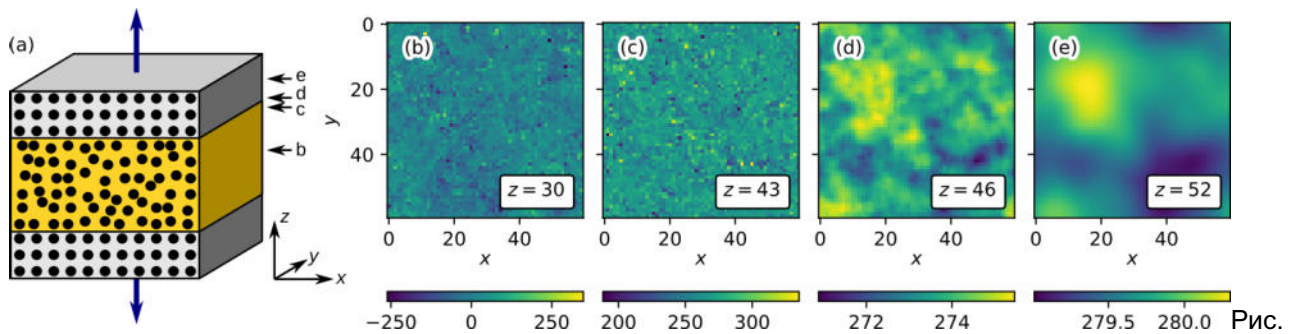
Конюх Д.А., Семенов А.А., Бельтюков Я.М.

E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

В аморфных и полимерных структурах наблюдается существенная неоднородность локальных деформаций на протяжении нескольких нанометров при приложении однородных внешних полей напряжения [1]. На этих масштабах так называемых *неаффинных* деформаций локально однородная теория упругости неприменима. С теоретической точки зрения изучение неаффинных деформаций является одним из востребованных разделов в современной теории конденсированных сред, поскольку наличие сильного локального беспорядка существенно влияет на упругие свойства всей среды [2].

Большой интерес представляет исследование неаффинных деформаций комплексных материалов со слоистой структурой вблизи границы аморфных и кристаллических слоев. Такие структуры могут образовываться, например, в процессе роста полупроводниковых материалов. Также интенсивно исследуется влияние неаффинных деформаций на локально-упругие свойства нанокомпозитов с наночастицами. Экспериментально установлено, что добавление наночастиц в полимерную матрицу в сравнительно небольших концентрациях может приводить к существенному изменению упругих свойств материала [3].



Распределение деформаций слоистой наноструктуры с центральным аморфным слоем и внешним кристаллическими слоями при приложении к ней внешнего однородного напряжения. Толщина аморфного слоя 30 а.е. Наноструктура имеет размер $60 \times 60 \times 60$ а.е.

Для изучения неаффинных деформаций в аморфных твердых телах были применены теоретические подходы, такие как метод анализа локальной флуктуации плотности вещества и некоторые методы теории случайных матриц [2, 4]. Проведенные с помощью этих методов исследования позволяют говорить о том, что вокруг наночастицы образуется "эффективная" упругая оболочка с толщиной порядка масштаба неаффинных деформаций. Наблюдается экспоненциальный спад упругих модулей вблизи жесткой наночастицы в зависимости от расстояния до нее. Эти результаты хорошо согласуются с результатами ранее проведенных расчетов молекулярно-динамической модели полистирола с нановключением SiO_2 . Такая "эффективная" оболочка увеличивает эффективный объем наночастиц, что ведет к увеличению их влияния на неаффинные деформации и макроскопические упругие свойства нанокомпозитов. Экспоненциальный спад упругих модулей на масштабе неаффинности также наблюдается вблизи перехода между аморфными и кристаллическими слоистыми структурами, что является проявлением неоднородности локальных деформаций.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-72-20201.

Список литературы

1. F. Leonforte et al., Phys. Rev. B, 72, 224206 (2005).
2. Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin, Phys. Rev. B, 87, 134203 (2013).
3. О. Москалюк, А. Самсонов, И. Семенова, В. Смирнова, В. Юдин, ЖТФ, 87, 266 (2017).
4. Д.А. Конюх, Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин, ФТТ, 61, 1331 (2019).

ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ БОРАТНЫХ СТЕКОЛ ПО ДАННЫМ XANES СПЕКТРОСКОПИИ

¹Ермакова А.М., ¹Сухарина Г.Б., ²Алексеев Р.О., ³Тригуб А.Л., ³Велигжанин А.А.,
²Шахгильдян Г.Ю., ¹Авакян Л.А., ¹Бугаев Л.А., ²Сигаев В.Н.

E-mail: ermakova.alexandra.bk@mail.ru

¹ЮФУ, г. Ростов-на-Дону,

²РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва,

³Курчатовский институт, г. Москва

Боратные стекла системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-B}_2\text{O}_3$ (LNB) являются перспективными материалами для решения задач оптического приборостроения [1]. Изучение структуры боратных стекол позволит установить ее влияние на оптические свойства материала и разработать состав с наилучшими показателями преломления и плотности.

В данной работе рассмотрены 4 образца с одинаковой концентрацией оксида лантана (22.5%), но с различным содержанием оксида ниобия (от 5% до 30%) и оксида бора (от 72.5% до 47.5%).

Спектры рентгеновского поглощения L_3 -края лантана и K -края ниобия в образцах LNB были измерены на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского источника синхротронного излучения. Теоретическое моделирование спектров XANES было выполнено с использованием методов многократного рассеяния и конечных разностей, реализованных в программном комплексе FDMNES [2]. По результатам проведенного анализа в стеклах системы LNB определено наиболее вероятное ближнее окружение атомов лантана и ниобия. Также установлена тенденция изменения ближнего окружения атомов лантана и ниобия от образца к образцу в зависимости от увеличения в составе образцов LNB оксида ниобия и уменьшения оксида бора.

Список литературы

1. Bengisu M. Journal of materials science. 51(5). 2016. p. 2199-2242
2. Joly Y. Physical Review B, 2001. 63. 125120

МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖСЛОЕВОЙ ОБЛАСТИ В МНОГОСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ Cr/Be В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ СЛОЁВ

Фатеева Е.С., Сахоненков С.С., Филатова Е.О.

E-mail: fateeva.liza@yandex.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

В настоящее время всё большую популярность в рентгенооптике набирает использование многослойных наносистем. Основными кандидатами для получения отражения в коротковолновом диапазоне (3 – 6 нм) являются многослойные рентгеновские зеркала (МРЗ) на основе Cr. Такие зеркала перспективны для применения в приборах элементного анализа материалов, а также могут использоваться для решения различных задач современной физики и техники, таких как создание микроскопов в спектральных областях “окон прозрачности” воды и углерода (2 – 5 нм), что открывает широкий спектр возможностей для изучения углеродосодержащих веществ и биологических структур.

Значительное влияние на величину отражательной способности МРЗ оказывают промежуточные слои, формирующиеся на межфазной границе в результате взаимодиффузии материалов, механического проникновения падающих атомов в процессе напыления зеркал, химических реакций и других факторов. Присутствие таких слоёв в многослойной структуре существенно снижает ее теоретически ожидаемые рентгенооптические параметры. Поэтому целью данной работы было изучение механизма формирования межслоевых областей в зеркалах Cr/Be и выявление их конкретных особенностей строения.

Поскольку фотоэлектронная линия дает интегральную информацию с соответствующей глубины, для изучения отдельного строения межслоевой области между слоями Cr и Be в зависимости от их толщины и порядка напыления были изучены двухслойные прямые и инверсные модельные системы Cr/Be с различной толщиной верхнего слоя. Полученные результаты были использованы при исследовании строения межслоевых областей многослойных структур Cr/Be.

Все исследования проводились с использованием метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высоких энергий. Измерения осуществлялись на лабораторном модуле ЭСХА Курчатовского института, где в качестве возбуждающего излучения использовался монохроматический пучок фотонов с энергией 1486.6 эВ (фотоэмиссионная линия Al K_α).

В результате проведенного исследования было установлено:

(i) На границах раздела Cr и Be формируются бериллиды с различной стехиометрией (CrBe_2 , CrBe_{12}) в зависимости от порядка следования слоёв;

(ii) Под слоем Cr происходит формирование оксида бериллия. Предложен механизм окисления бериллия;

(iii) В многослойных структурах с ультратонкими слоями наблюдается полное перемешивание слоёв хрома и бериллия с образованием бериллидов CrBe_2 и CrBe_{12} .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-20125.

Список литературы

1. Svechnikov, M. V., Chkhalo, N. I., Gusev, S. A., Nechay, A. N., Pariev, D. E., Pestov, A. E., Polkovnikov, V. N., Tatarskiy, D. A., Salashchenko, N. N., Schäfers, F., Sertsu, M. G., Sokolov, A., Vainer, Y. A., Zorina, M. V., Influence of Barrier Interlayers on the Performance of Mo/Be Multilayer Mirrors for next-Generation EUV Lithography, Opt. Express, 2018
2. Sakhonenkov, S.S., Filatova, E.O., Kasatnikov, S.A., Fateeva, E.S., Pleshkov, R.S., Polkovnikov, V.N., Layer intermixing in ultrathin Cr/Be layered system and impact of barrier layers on interface region, Applied Surface Science, 2021

ПЛАЗМЕННАЯ ОБРАБОТКА ПОВЕРХНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ КЕРАМИК



^{1*}Гаджимагомедов С.Х., ¹Рабаданова А.Э., ^{1,2}Алиханов Н.М.-Р., Эмиров Р.М., ¹Палчаев Д.К., ¹Мурлиева Ж.Х., ³Гаджиев М.Х., ¹Сайпулаев П.М.,
³Ильичев М.В.

E-mail: darkusch@mail.ru

¹Дагестанский государственный университет, Махачкала
²Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала
³Объединенный институт высоких температур, Москва

В последнее время при создании материалов с градиентными свойствами используется [1] плазменные технологии, вызывающие широкий спектр химических изменений в контролируемых плазмообразующих средах. Такая плазменная среда обладает достаточной энергией для селективного преобразования поверхностного слоя, не изменяя характеристик в объеме материала.

В настоящей работе приведены результаты исследования структуры поверхности наноструктурированной керамики на основе BiFeO_3 при 5% замещении Bi на La ($\text{Bi}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{FeO}_3$), подвергнутой воздействию плазменным потоком из смеси аргона. Керамические образцы состава $\text{Bi}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{FeO}_3$ с диаметром ~ 6 мм и толщиной ~ 1 мм были изготовлены из нанопорошков того же состава. Нанопорошки синтезировались золь-гель методом согласно рекомендациям [2]. Термообработка исходных порошков осуществлялась при температуре $\sim 450^\circ\text{C}$ в течение 30 мин (обозначение порошка – **P**), а спекались керамики при температуре $\sim 600^\circ\text{C}$ (обозначение керамики – **C1**). Обработка поверхности керамического образца потоком плазмы осуществлялась при температуре $\sim 600^\circ\text{C}$ и длительности ~ 1 минута (керамика после плазменной обработки обозначена – **C2**).

Дифракционный анализ состава образцов проводился на дифрактометре «PANalytical Empyrean series 2». Размер кристаллитов определялся по ширине пиков, используя известную формулу Шеррера. Исследованиями структуры [1] установлено, что при 5% замещении Bi на La содержание примесных фаз ($\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ и $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{39}$) в образцах уменьшается до нуля.

На рисунках 1 и 2 представлены результаты исследования структуры порошка **P**, керамик **C1** и **C2**. Как видно, на рентгенограммах, в основном, присутствуют пики, характерные для искаженной ромбоэдрической структуре перовскита с пространственной группой симметрии $R3c$. Воздействие плазмой привело к снижению доли основной фазы и к росту размеров кристаллитов (на $\sim 60\%$) на поверхности, а также к увеличению интенсивности пика (006) при $\sim 39^\circ$ (см. рис. 1), являющегося индексом ромбоэдрической структуры BiFeO_3 , указывая на изменения в структуре.

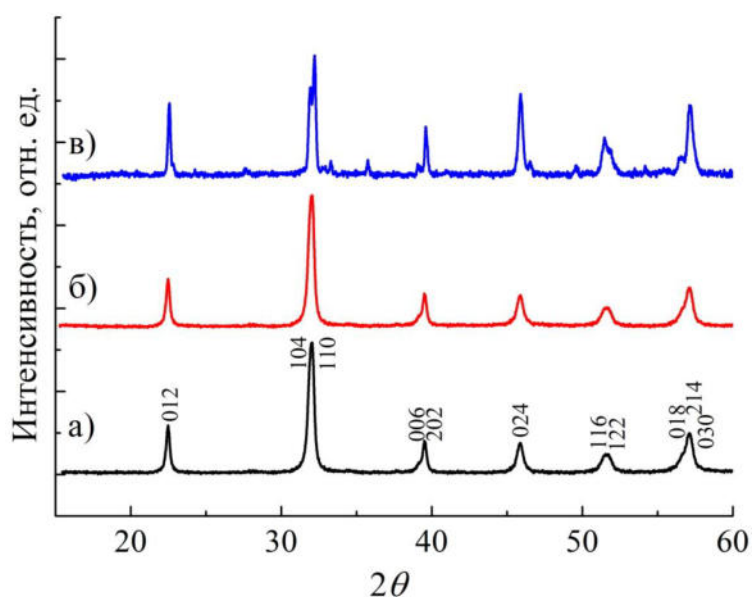


Рис. 1. Дифрактограммы для порошка **P** – а), керамик **C1**– б) и **C2** – в).

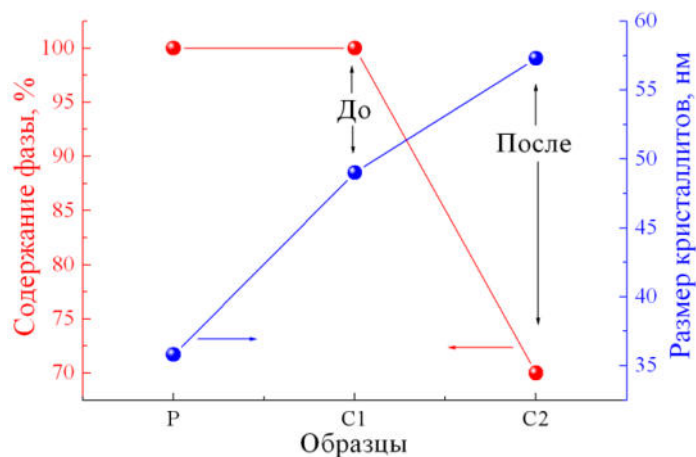


Рис. 2. Доля фазы и размер кристаллитов порошка **Р**, керамик **С1** и **С2**.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-08-00242А, частично ГЗ FZNZ-2020-0002.

Список литературы

1. Rabadanova A. E., Gadzhimagomedov S. Kh., Alikhanov N. M.-R. et al. *Ferroelectrics* 576(1). 2021. P.1-7
2. S. Kh. Gadzhimagomedov, D. K. Palchaev, Gadzhiev M. Kh. *Journal of Physics Conference Series* 1923(1). 2021. 012007.

ГАЗОНАПОЛНЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА: ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СПОСОБНОСТЬ К БИОРАЗЛОЖЕНИЮ

¹Григорьева Е.А., ¹Колесникова Н.Н., ^{1,2}Попов А.А., ^{1,2,3}Ольхов А.А.

E-mail: raraavis171009@rambler.ru

¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, ²Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, ³Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва

В настоящей работе предложено создание биоразлагаемых газонаполненных композиционных материалов на основе полиэтилена низкой плотности путём введения газообразующего агента и природного биоразлагаемого компонента.

Газонаполненные композиционные материалы были получены методом экструзии. В качестве исходных компонентов использовались: полимер — полиэтилен низкой плотности (ПЭ), газообразующий агент — гидрокарбонат натрия (гид) либо микрокапсулы (МК) - полимерные капсулы сферической формы, размером 3-5 мкм, в которые заключён газ изобутан, и природный компонент — в одном случае древесная мука хвойных и лиственных пород (ДМ), в другом — кукурузный крахмал (кр). Обе природные добавки в сыпучем виде (фракция частиц составляла до 100 мкм), вводились в количестве 30% масс. Гидрокарбонат натрия вводился в количестве 1,5 % масс, микрокапсулы — 6 % масс. В качестве контрольного образца был взят полиэтилен.

На начальном этапе исследования оценивали физические свойства полученных материалов: плотность, пористость и средние диаметры пор. Величины плотности приведены в таблице 1. Поры более или менее равномерно распределены по всему объёму материала; имеют сферическую форму, диаметр - до 0,20 мм.

Для определения способности материалов к биоразложению были проведены исследования по определению их водопоглощения и изменения прочностных характеристик после натуральных испытаний в почве открытого грунта. Образцы композиций «ПЭ+1,5%гид+30%ДМ» и «ПЭ+1,5%гид+30%кр» показали увеличенное водопоглощение - 32 — 33 % по массе образца. Максимальное водопоглощение было достигнуто у композиции «ПЭ+6%МК+30%кр» — 93 % по массе образца. По границам раздела фаз полимер - пора и полимер - наполнитель вода проникает в толщу пористого пространства материала. С водой осуществляется проникновение микроорганизмов внутрь матрицы, обеспечивается благоприятная среда для их развития. Под действием ферментов, выделяемых микроорганизмами, может происходить гидролиз и окисление природных наполнителей в материалах. При этом их продукты – низкомолекулярные вещества с более высоким коэффициентом диффузии, чем полимер и наполнители.

Образцы выдерживались в почве открытого грунта в течение шести месяцев, затем направлялись на испытание на растяжение. Результаты показаны в таблице 1.

Из представленных данных видно, что прочность композиционных материалов после испытаний в почве ниже, чем у исходных. Падение прочности у пористых ненаполненных материалов происходит за счёт повышенной реакционной способности перенапряжённых связей на поверхности раздела полимер — пора, что приводит к их окислительной деструкции, сопровождающейся разрывом макроцепей. При наличии добавки природного компонента в материале процесс понижения прочности ускорятся за счёт введения других активных деструктивных соединений. Таким образом, можно утверждать, что газонаполненные композиционные материалы имеют тенденцию к ускоренному разложению в условиях окружающей среды.

Изменение прочности материалов при натуральных испытаниях

Композиция	Плотность, г/см ³	Прочность исходная, σ, МПа (±0,2МПа)	Прочность, σ, МПа (±0,2МПа) после 6 мес. натуральных испытаний	Изменение прочности, %
ПЭ	0,92	7,6	7,4	2,6
ПЭ+1,5гид	0,74	4,1	3,6	11,5
ПЭ+1,5гид+30%ДМ	0,68	3,1	2,6	15,8
ПЭ+1,5гид+30%кр	0,76	2,3	1,7	26,1
ПЭ+5%МК	0,38	2,6	2,1	17,6
ПЭ+6%МК+30%кр	0,37	1,0	0,6	40,6

РАСЧЕТ НАПРЯЖЕНИЙ ДИЛАТАЦИОННОЙ НИТИ В КЛИНЕ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ УГЛОМ РАСТВОРА

^{1, 2}Гудкина Ж.В., ^{2, 3, 4}Гуткин М. Ю., ^{2, 3, 4}Красницкий С. А., ¹Аргунова Т. С.

E-mail: gudkinazhanna@mail.ru

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

²Университет ИТМО, Санкт-Петербург

³СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

⁴Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург

Исследование деформаций и напряжений несоответствия, связанных с полупроводниковыми наногетероструктурами сложной архитектуры, является важной проблемой материаловедения и наномеханики. Эти деформации и напряжения определяются различиями параметров решетки и коэффициентов теплового расширения контактирующих материалов, а также их химическими неоднородностями. Снижение напряжений несоответствия за счет образования различных дефектов часто сопровождается ухудшением функциональных свойств гетероструктур и их последующим разрушением. Поэтому тщательный анализ напряжений несоответствия в

гетероструктурах с учетом их реальной формы огранки имеет большое значение для создания бездефектных полупроводниковых устройств с повышенными характеристиками. С этой целью мы нашли аналитическое решение краевой задачи в классической теории упругости для клиновидного тела, содержащего прямолинейную нить, подверженную трехмерному растяжению собственной деформации, которая является так называемой «дилатационной нитью».

Для определения поля напряжений этого дефекта введем функцию напряжений Эри в виде суммы $\psi = \psi^{el} + \psi^{pl}$, где ψ^{el} - аналитическое решение бигармонического уравнения в упругой задаче для клина, а ψ^{pl} - частное решение, которое соответствует дилатационной нити. Интегральное преобразование Меллина используется для вывода системы уравнений для функции напряжения Эри [1]. В результате желаемые компоненты напряжения находятся в интегральной форме с помощью обратного преобразования Лапласа-Меллина. Анализ полученного решения проводился численно с использованием графиков и карт полей напряжений.

Примеры двух графиков напряжений показаны на рис. 1 для случая $r = 0.5r_0$ и различных значений угла раскрытия клина 2β , где r_0 и φ_0 – полярные координаты дилатационной нити в системе координат (r, φ) с полюсом в вершине клина. Графики показывают, в частности, выполнение граничных условий на свободных поверхностях тела.

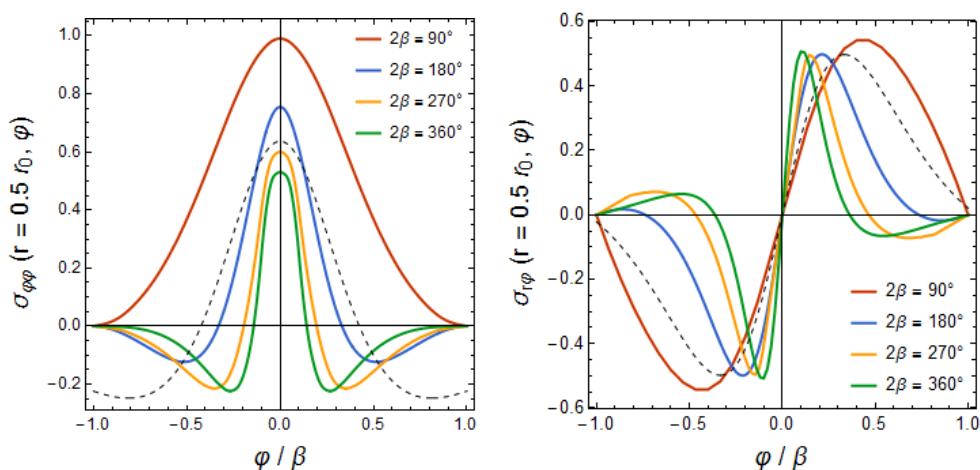


Рис. 1. Распределение компонент напряжений $\sigma_{\varphi\varphi}$ и $\sigma_{r\varphi}$ в случае $r = 0.5r_0$. Пунктирные кривые соответствуют случаю бесконечной упругой среды без свободных поверхностей.

Найденное решение удовлетворяет уравнениям равновесия и граничным условиям на свободных поверхностях клиновидного тела с произвольным углом раствора. Свободные поверхности сильно влияют на распределение поля напряжений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-12041.

Список литературы

1. Gutkin M. Yu., Romanov A. E., Aifantis E. C. Screw dislocation near a triple junction of phases with different elastic moduli. I. General solution // Physica Status Solidi A. V. 153. No. 1. 1996 P. 65-75

ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ДИОДНЫЙ ЛАЗЕР НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 450 НМ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО ГРАФЕНА

Хацкевич Л.А., Стяпшин В.М., Михеев К.Г., Зонов Р.Г., Михеев Г.М.

E-mail: xaczkevich.leonid@mail.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск

Пористый плёночный материал, состоящий из графеноподобных лепестковых структур, получаемый в результате разложения углеродосодержащего материала в воздушной среде посредством лазерного воздействия, называется лазерно-индуцированным графеном (ЛИГ) [1]. Формирование ЛИГ представляет практический интерес с точки зрения создания микросуперконденсаторов и различных датчиков. Обычно для синтеза ЛИГ используется излучение СО₂-лазера на длине волны 10,6 мкм, которое хорошо поглощается органическими материалами. Первоначально в качестве органического материала использовалась полиимидная плёнка. При применении стандартных СО₂-лазеров на поверхности коммерческих полиимидных плёнок можно получить ЛИГ толщиной около 50 мкм, хорошо подходящий для изготовления микросуперконденсаторов. Однако при изготовлении определённых типов датчиков, например, датчиков влажности, требуется формировать ЛИГ в виде тонкой нити с пространственным разрешением и толщиной несколько микрометров [2]. Формирование ЛИГ с такими параметрами с помощью СО₂-лазеров принципиально ограничено. Поэтому для указанных целей следует использовать лазерные источники, генерирующие излучение в более короткой, например, синей или ультрафиолетовой областях оптического спектра.

В данном докладе представлены результаты предварительных исследований по формированию ЛИГ с помощью импульсно-периодического диодного лазера на длине волны 450 нм. Основное внимание уделено исследованиям режимов работы лазера, от которых существенно зависят свойства формируемого ЛИГ.

Выполнено в рамках госзадания (№ гос. рег. АААА-А19-119021890083-0).

Список литературы

1. Mikheev K.G., Zonov R.G., Mogileva T.N. et al. Opt. Laser Technol. 2021. V. 141. P. 107143.
2. Stanford M.G., Zhang C., Fowlkes J.D. et al. ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. V. 12, № 9. P. 10902-10907.

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК НА СТЕКЛЕ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Картапова Т.С., Гильмутдинов Ф.З., Еремина М.А.

e-mail: tskartapova@udman.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр

Уральского отделения РАН, г. Ижевск

Углерод известен человечеству с древнейших времен, прежде всего как уголь и алмаз. Как индивидуальный химический элемент углерод был признан Лавуазье в конце XVIII в. и получил свое название («Carboneum») от латинского «carbo» - уголь. Ни один элемент Периодической системы Менделеева не обладает тем разнообразием свойств, иногда прямо противоположных, которое присуще углероду. Одними из важных свойств являются механические свойства, такие как высокая твердость, высокий модуль упругости, низкий коэффициент трения и низкий износ. Столь уникальные свойства - причина того, что и чистый углерод, и содержащие его материалы служат объектами фундаментальных исследований и применяются в бесчисленных технических процессах. В связи с этим целью данной работы явилось исследование состава и структуры, топографии, измерение электропроводности пленок.

В данной работе тонкие углеродные пленки напылялись на поверхность стекла методом магнетронного распыления углеродной мишени в среде рабочего газа Ar с последующей бомбардировкой ионами азота и аргона. В процессе варьировалась доза облучения. Толщина пленок была перепроверена методом АСМ путем измерения царапин пленки. На уровне ошибки измерения на исходной пленке значения толщины коррелируют с расчетными данными при напылении.

На электронном микроскопе Quattro S проведен анализ химического состава углеродной мишени. Показано, что неконтролируемые примеси в мишени отсутствуют, в

различных точках анализа обнаруживаются примеси кислорода менее 1 %, что связано с пребыванием пористой мишени на воздухе.

По данным АСМ и сканирующей электронной микроскопии углеродные пленки являются сплошными и «островковый» характер не выявлен.

Результаты измерений электропроводности показали, что облучение ионами азота приводит к увеличению исходного электросопротивления в 10-15 раз, после облучения ионами аргона в той же дозе - более чем в 30 раз. Прослеживается корреляция изменения электросопротивления углеродных пленок до и после облучения с данными АСМ по среднему размеру элементов топографии

В связи с этим была предпринята попытка определения различий в составе и структуре методами Раман-спектроскопии и РФЭС.

По данным РФЭС, существенных различий в пленках нет. Сателлитная структура в области π и σ плазмонов, а также увеличение ширины основных пиков $C1s$ свидетельствуют о том, что мы изначально имеем дело с пленками преимущественно разупорядоченного углерода (не графита). Из обзорных РФЭС спектров также видно, что ионная бомбардировка пленок аргоном приводит к «диффузии» натрия из стекла в пленку. Чем больше доза, тем больше интенсивность спектра натрия. Кремний и его оксиды не наблюдаются, т.е. пленки в целом являются сплошными, и стекло сквозь пленку не просматривается.

АНАЛИЗ EXELFS СПЕКТРОВ В СИЛЬНО ОГРАНИЧЕННОМ ДИАПАЗОНЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

^{1,2}Хаметова Э.Ф., ²Бакиева О.Р.

E-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

¹Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

²Удмуртский федеральный исследовательский центр

Уральского отделения РАН, г. Ижевск

EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure) – протяженная тонкая структура спектров энергетических потерь электронов протяженностью до 500 эВ и периодом осцилляций 15-20 эВ. Для анализа локальной атомной структуры EXELFS спектры используются давно, первые упоминания в 1978 году [1]. В настоящее время этот вид спектроскопии активно используется для исследования локального окружения легких

элементов. Однако на сегодняшний день существует проблема анализа спектров энергетических потерь электронов, содержащих несколько сигналов от возбуждения разных внутренних уровней, расположенных в одном энергетическом диапазоне (т.е. сигналы нескольких химических элементов в одном диапазоне кинетических энергий электрона). Диапазон, переведенный в обратное пространство, недостаточен для корректной обработки методом Фурье-преобразования.

В настоящей работе предлагается решение данной проблемы для экспериментальных спектров, снятых в геометрии эксперимента «на просвет». Предложенная методика позволяет из одного диапазона энергий выделять сигналы нескольких химических элементов. Апробация метода была проведена на EXELFS спектре диоксида титана TiO₂ – рутила.

Список литературы

1. Ertl G and Küppers J 1974 Low Energy Electrons and Surface Chemistry Analysis (Weinheim: Verlag Chemie) p 193

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ДЛЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА TiAl И ДЛЯ ЧИСТЫХ Ti И Al

¹Лекомцева А. А., ²Добышева Л.В.

E-mail: a.lekomtseva5@gmail.com

¹Удмуртский Государственный Университет, г. Ижевск

²Удмуртский федеральный исследовательский центр

Уральского отделения РАН, г. Ижевск

Актуальность работы связана с необходимостью разработки физических основ формирования конструкционных материалов на основе интерметаллидов. Интерметаллиды, как химические соединения металлов, по своей структуре занимают промежуточное положение между металлами и керамикой.

За счёт низкой плотности и текучести сплавы на основе Ti-Al являются альтернативой никелевым и другим сплавам на основе жаропрочных металлов, используемым в аэрокосмической отрасли. Деформационные свойства зависят от кристаллической структуры, элементного состава и особенностей межатомного

взаимодействия, в формировании их важную роль играет электронная структура, поэтому необходимо её исследовать с помощью современных расчётных методов [1].

В настоящей работе изучается возможность теоретического предсказания энергии внутренних электронных уровней в системе Ti-Al при изменении состава и кристаллической структуры. Эти величины связаны с химическим сдвигом, измеряемым с помощью неразрушающего метода рентгено-фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Химическим сдвигом называют изменение энергии связи электрона на внутреннем уровне атома при изменении его ближайшего окружения. По положениям и интенсивностям рентгеноэлектронных пиков можно судить об элементном составе образцов, а химические сдвиги могут помогать в оценке фазового состава образцов и определении особенностей химических связей.

Целью данной работы является определение возможности предсказания величин химических сдвигов для системы Ti-Al и определение правильного способа их расчёта для интерпретации экспериментальных рентгено-фотоэлектронных спектров образцов с неизвестным фазовым составом.

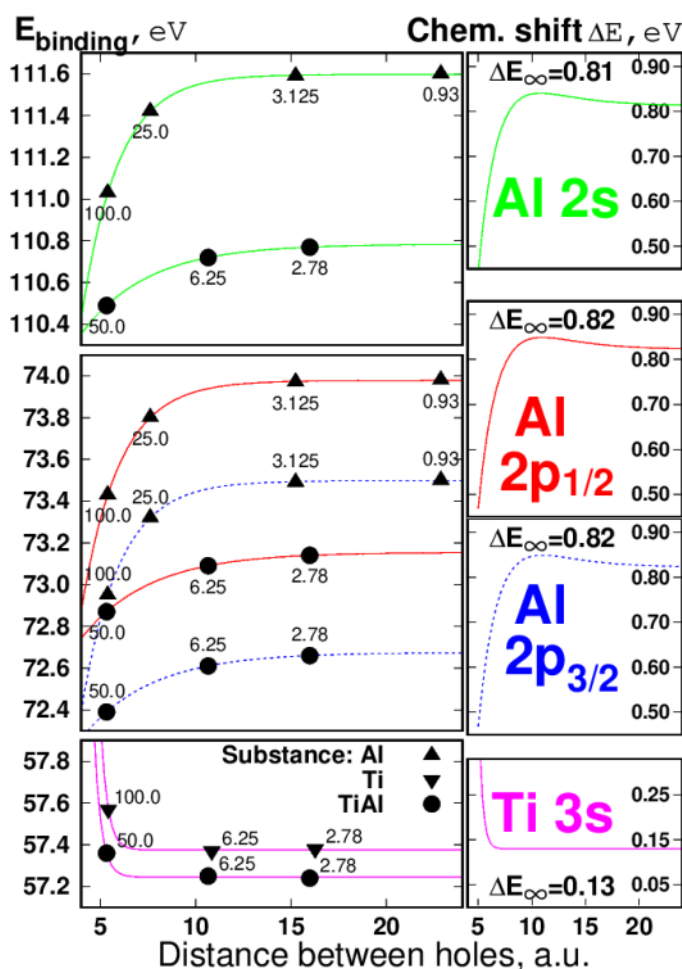


Рис. 1. Зависимость энергии внутренних уровней и химического сдвига от расстояния между дырками (числа у точек в левой половине показывают концентрацию дырок).

В работе проведены первопринципные расчёты электронной структуры для чистых титана и алюминия и для интерметаллида γ -TiAl. Изучены особенности межатомного взаимодействия в интерметаллиде по сравнению с чистыми компонентами. Проведены расчёты энергий внутренних электронных уровней Al 2s, Al 2p_{1/2}, Al 2p_{3/2} и Ti 3s с учётом дырки на уровне по методу Слэтера. Зависимость энергии внутренних уровней и химического сдвига от расстояния между дырками показана на рис. Для сравнения рассчитанных энергий связи и получения химических сдвигов необходимо было провести интерполяцию данных, так как расстояние между дырками различается в разных соединениях. Исследован способ расчёта химических сдвигов в этой системе и проведено сравнение результатов с экспериментальными данными РФЭС.

Численные расчеты проводились с использованием суперкомпьютера «Уран» ИММ УрО РАН. Работа выполнена в рамках гос. задания ФАНО России, № гос. регистрации НИР АААА-А17-117022250038-7.

Список литературы

1. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids / P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran [et al.] // The Journal Chemical Physics. – 2020. – Vol. 152, iss. 7. – P. 1-30.

ПОВЫШЕНИЕ ПРОЧНОСТИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СПЛАВА Cu-0,5%Cr-0,08%Zr ПОСЛЕ РОТАЦИОННОЙ КОВКИ И СТАРЕНИЯ

¹Мартыненко Н.С., ¹Бочвар Н.Р., ¹Рыбальченко О.В., ¹Просвирнин Д.В.,

²Бодякова А.И., ²Беяков А.Н., ¹Морозов М.М., ¹Юсупов В.С., ^{1,3}Добаткин С.В.

E-mail: nataliasmartynenko@gmail.com

¹Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет (НИУ «БелГУ»), Белгород

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

Низколегированные медные сплавы системы Cu-Cr-Zr являются прекрасными материалами для электротехнической промышленности благодаря их высокой термо- и электропроводности [1 – 2]. Однако такие материалы должны обладать высокой прочностью, в том числе и циклической, для работы при высоких нагрузках. Таким образом, повышение прочности (без снижения электропроводности) электротехнических

медных сплавов является важной задачей. Поэтому в данной работе были изучены возможности повышения механических характеристик и электропроводности сплава Cu-0,5%Cr-0,08%Zr путем сочетания ротационной ковки (РК) с последующим старением.

В настоящем исследовании сплав Cu-0,5%Cr-0,08%Zr, выплавленный в дуговой вакуумной печи и предварительно закаленный, был подвержен РК при комнатной температуре до достижения суммарной накопленной степени деформации равной 2,77 (подробнее см. [3]). Проводилось исследование влияния РК на структуру, поведение при старении, механические характеристики (в том числе усталостную прочность) сплава.

Исследования показали, что РК приводит к сильному измельчению зерна. Так в закаленном состоянии структура сплава состоит из зерен пересыщенного твердого раствора со средним размером $71,67 \pm 5,01$ мкм и двойников отжига шириной $5,95 \pm 0,50$ мкм. РК привела к формированию зеренно-субзеренной структуры с размером структурных элементов $\sim 300 - 400$ нм и полос сдвига шириной $500 - 600$ нм. Исследование процессов старения проводили путем построения зависимостей микротвердости и электропроводности от температуры и времени нагрева. Исследование показало, что оптимальное сочетание микротвердости и электропроводности в сплаве достигается при старении при 500 °С в течение 2 часов. При этом повышение прочности и электропроводности сплава, как закаленного, так и деформированного, обусловлено распадом пересыщенного твердого раствора и выделением мелкодисперсных частиц фаз Cr и Cu_5Zr . После старения предел прочности на разрыв закаленного сплава вырос с 227 ± 9 МПа до 442 ± 19 МПа при падении пластичности с $61,0 \pm 1,5\%$ до $24,3 \pm 3,2\%$, соответственно. В случае сплава после РК предел прочности вырос с 433 ± 5 МПа до 557 ± 18 МПа, в то время как пластичность не изменилась ($16,2 \pm 0,6\%$ и $17,1 \pm 2,6\%$, соответственно). При этом электропроводность сплава после старения составила $81,2 \pm 1,6$ %IACS (исходно закаленное состояние) и $83,4 \pm 1,8$ %IACS (после РК). Дополнительным преимуществом применения РК стало повышение предела усталости сплава со 140 МПа до 265 МПа (рисунок 1).

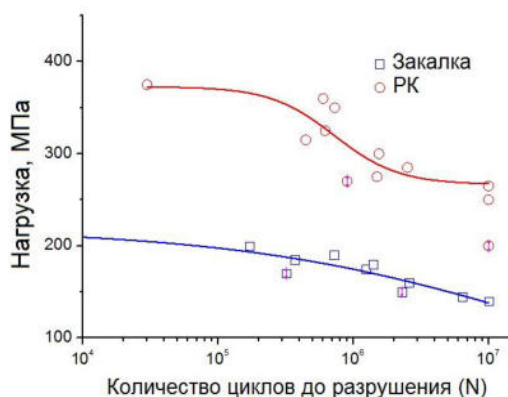


Рис. 1. Усталостная прочность сплава Cu-0,5%Cr-0,08%Zr до и после РК

Список литературы

1. Huang F.X., Ma J.S., Ning H.L. et al. Geng. Analysis of phases in a Cu-Cr-Zr alloy. Scripta Materialia. V. 48. 2003. Pp. 97 – 102.
2. Meng A., Nie J., Wei K. et al. Optimization of strength, ductility and electrical conductivity of a Cu–Cr–Zr alloy by cold rolling and aging treatment. Vacuum. V. 167. 2019. Pp. 329 – 335.
3. Estrin Y., Martynenko N., Lukyanova E. et al. Effect of rotary swaging on microstructure, texture, and mechanical properties of a Mg-Al-Zn alloy. Advanced Engineering Materials. V. 22. 2020. #1900506.

АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА ПЛЁНКАХ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО ГРАФЕНА

Михеев К.Г., Зонов Р.Г., Фатеев А.Е., Булатов Д.Л., Могилева Т.Н., Михеев Г.М.

E-mail: k.mikheev@udman.ru

Институт механики УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

Лазерно-индуцированный графен (ЛИГ) – это пористый материал, получаемый прямым воздействием лазерного излучения на углеродсодержащие материалы, например, полиимидную (ПИ) плёнку. ЛИГ имеет высокую прикладную ценность при изготовлении микросуперконденсаторов, различных датчиков, мембран и фильтров. Процесс синтеза ЛИГ представляет собой построчное сканирование пучка лазера по поверхности углеродсодержащего материала по заданной программе, в результате чего образуются нитевидные пористые структуры. При осмотре плёнок ЛИГ невооружённым глазом можно заметить, что в зависимости от угла падения, свет от неё отражается по-разному. Такая особенность этих плёнок ранее никем не изучалась, между тем, учитывая огромное количество областей применения ЛИГ, исследование этого эффекта представляет большой фундаментальный интерес.

В данном докладе приводятся результаты исследования диаграмм рассеяния маломощного линейно поляризованного излучения на поверхности плёнок ЛИГ, полученного путем построчного сканирования лучом непрерывного CO₂ лазера по поверхности ПИ пленки. Объясняется механизм возникновения оптической анизотропии на полученных плёнках. Помимо этого раскрывается зависимость морфологии нитевидных пористых структур ЛИГ от диаметра лазерного луча и расстояния между строками сканирования. Полученные результаты могут помочь в анализе синтезированных методом

построчного лазерного сканирования ЛИГ и в формировании плёночных структур на основе ЛИГ для технологии холодной эмиссии электронов.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект №19-72-00071). Эксперименты выполнялись с использованием оборудования центра коллективного пользования УдмФИЦ УрО РАН.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ОСАДКОВ АСФАЛЬТЕНОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В ПРОТОЧНОМ РЕЖИМЕ ПРИ ПРОКАЧКЕ АЦЕТОНА В МИКРОФЛЮИДНОМ УСТРОЙСТВЕ, МЕТОДОМ ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ С МАТРИЧНЫМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ

Милованов Е.

E-mail: milovanov_2013@mail.ru

НГУ, ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Метод ИК-Фурье спектроскопии широко применяется для анализа различных материалов и химических соединений. Одним из направлений развития современной ИК-Фурье спектроскопии является применение матричного детектирования, что позволяет получать спектральные картины с пространственным разрешением по всей площади образца. Это в свою очередь дает возможность для изучения быстропротекающих процессов, процессов массопереноса и абсорбции, гетерогенных систем.

Ярким примером гетерогенной системы является природная нефть. Данное сырье представляет собой ключевой ресурс не только как ископаемое горючее, но и как источник углеводородов для химической промышленности. Высокий спрос на нефть во всем мире приводит к активному использованию тяжелых сортов сырья. Они содержат разнообразные смолы и асфальтеновые фракции, осложняющие добычу, транспортировку и переработку.

Асфальтены имеют склонность к агрегации и образованию отложений при изменении температуры, давления и прочих окружающих условий. Данные особенности выходят на первый план, потому что они приводят к экономическим потерям из-за выхода из строя оборудования. Исследование свойств тяжелых нефтей и их асфальтеновых фракций является ключом к пониманию процессов происходящих в ходе переработки тяжелой нефти [1,2].

В основной части работы методом ИК-Фурье спектроскопии с матричным детектированием в режиме пропускания изучен процесс образования осадков

асфальтенов в проточном микрофлюидном устройстве. Полученные данные, в том числе картины химической визуализации процесса и сформированных осадков, демонстрируют наличие неоднородности химического состава, что позволяет уточнить механизм коагуляции и агрегации асфальтенов [3].

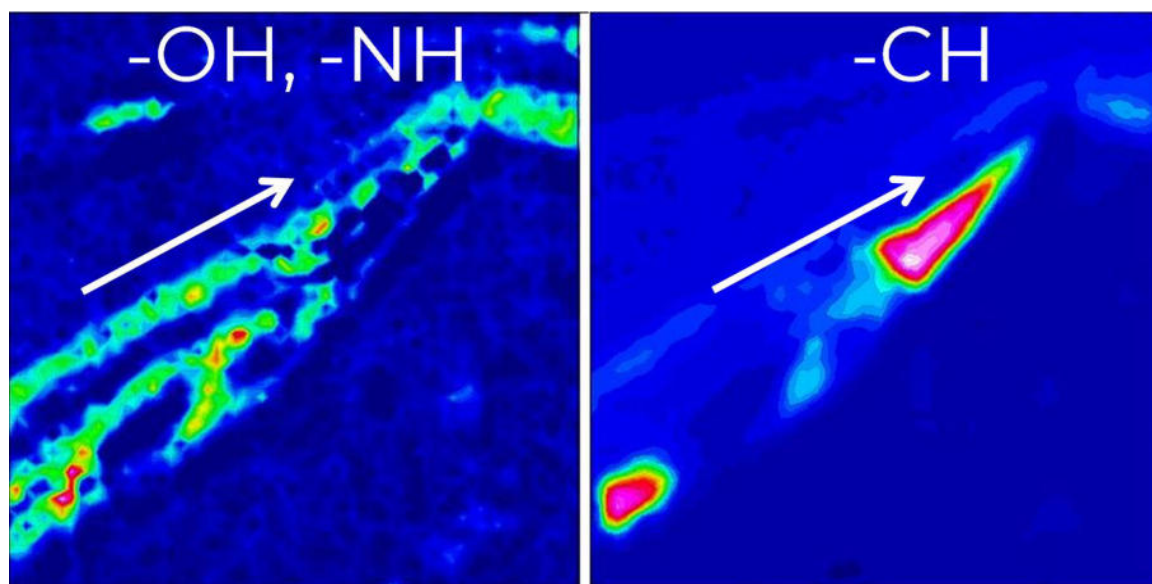


Рис. 1. Картины химической визуализации осадка асфальтенов в потоке ацетона, построенные в диапазонах характерных частот колебаний для $-OH$ ($3600 - 3000 \text{ см}^{-1}$) и для $-CH$ ($3000 - 2800 \text{ см}^{-1}$). Стрелка указывает направление потока ацетона в эксперименте.

Список литературы

1. Gabrienko A.A. et al. Chemical Visualization of Asphaltenes Aggregation Processes Studied in Situ with ATR-FTIR Spectroscopic Imaging and NMR Imaging // J. Phys. Chem. C. 2015. Vol. 119, № 5. P. 2646–2660.
2. Shalygin A.S. et al. Spectroscopic imaging of deposition of asphaltenes from crude oil under flow // J. Pet. Sci. Eng. Elsevier B.V., 2019. Vol. 181, № March. P. 106205.
3. Shalygin A.S. et al. Chemical Heterogeneity of Deposits Formed in the Flocculant Flow From Crude Oil, According to FTIR Microscopy and Chemical Imaging // Pet. Chem. 2021. Vol. 61, № 9. P. 1011–1018.

ИССЛЕДОВАНИЕ НУКЛЕАЦИИ CaCO_3 НА БИООРГАНИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЕ В ПРОТОЧНОЙ ЯЧЕЙКЕ

^{1,2,3}Минеев А. М., ³Рыбин Д. С., ³Бельтюков А. Н., ^{1,2}Болдырева Е. В.

E-mail: mineev.a.m@yandex.ru

¹Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск

²Институт катализа им. Борескова СО РАН, г. Новосибирск

³Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск

Биоминерализация – процесс образования минералов в живых организмах, формирующий неорганическую составляющую костной ткани, защитных оболочек животных (раковин моллюсков и яичной скорлупы), различных частей растений [1]. Благодаря наличию органических включений и особой микроструктуре биоминералы обладают уникальным сочетанием механических свойств – высокой пластичностью и прочностью. Поэтому изучение процессов биоинтерализации представляет значительный интерес при разработке технологий создания композитных материалов. Формирование биоминералов также играет важную роль при возникновении различных патологий: подагры, мочекаменной болезни, кальциноза сосудов и др., – что демонстрирует важность изучения биоинтерализации в медицинских целях.

Образование биоминералов происходит на органической матрице. Нуклеация на биологическом темплате и последующий рост с участием биомолекул приводят к образованию ориентированных микроструктур с разнообразной морфологией [2]. В случае с карбонатом кальция биополимеры и малые органические молекулы играют значительную роль как в ориентированном росте кристаллов, так и в стабилизации аморфного карбоната кальция [3], который, в свою очередь, может трансформироваться в различные полиморфные модификации кристаллической фазы [4]. Однако какие структурные особенности биологического темплата имеют значение при формировании конкретной полиморфной модификации – на этот вопрос еще предстоит ответить.

В настоящей работе проведены исследования процессов нуклеации карбоната кальция на биоорганическом темплате в проточной ячейке. В качестве модельного темплата была выбрана яичная мембрана (имеющая белковую волокнистую структуру) ввиду ее относительно хорошей изученности [5]. Известно, что нуклеация происходит на органических агрегатах мембраны, однако строение центров нуклеации и её механизм до сих пор изучены недостаточно.

Состав поверхностных функциональных групп и фазовый состав исходных темплатов, а также полученных образцов охарактеризован методами ИК-спектроскопии и

рентгеновской дифракции. С помощью сканирующей электронной спектроскопии изучена морфология образцов, определен элементный состав органической матрицы, кристаллов и интерфейсной зоны *in situ*. Для более детального изучения поверхностных слоев полученных композитов использована атомно-силовая микроскопия.

В результате проведенных исследований обнаружено, что нуклеация происходит не только на органических агрегатах, как это описывается в литературе [3], но также и на участках фибрилл, расположенных между агрегатами. При осаждении карбоната кальция образуются ромбоэдрические кристаллы и равноосные минеральные образования (рис. 1а). Рост кристаллов происходит не только в направлении нормали к фибриллам, но и вокруг них, включая волокна в кристалл (рис. 1б). Обнаружены когерентные интерфейсные границы переменного состава, что говорит о формировании бионеорганических слоев на начальной стадии минерализации.

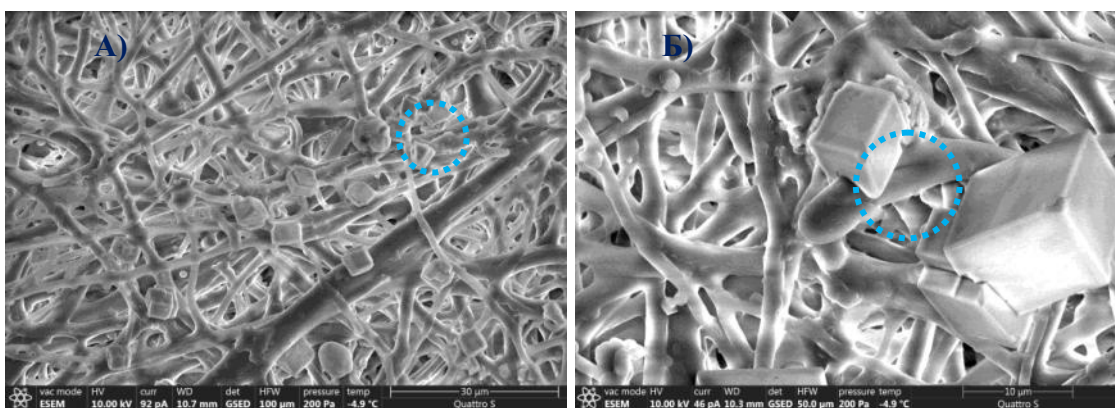


Рис. 1. CaCO₃ на поверхности мембраны, осаждаемый в течение а) 3 минут б) 20 минут

Исследование поддержано Министерством науки и высшего образования (госзадания АААА-А21-121011390011-4 (АМ и ЕБ) и АААА-А17-117022250038-7 (ДР и АБ).

Список литературы

1. Bäuerlein E. Handbook of Biomineralization: Biological Aspects and Structure Formation // Handbook of Biomineralization: Biological Aspects and Structure Formation. Wiley-VCH, 2008. Vol. 1–3. 1–1252 p.
2. Marin F., Le Roy N., Marie B. The formation and mineralization of mollusk shell // Frontiers in Bioscience. 2012. Vol. 4. 1099 p.
3. Gautron J. et al. Avian eggshell biomineralization: an update on its structure, mineralogy and protein tool kit // BMC Mol. Cell Biol. Springer Science and Business Media LLC, 2021. Vol. 22, № 1. P. 11.

4. Cartwright J.H.E. et al. Calcium carbonate polymorphism and its role in biomineralization: How many amorphous calcium carbonates are there? // *Angewandte Chemie - International Edition*. John Wiley & Sons, Ltd, 2012. Vol. 51, № 48. P. 11960–11970.
5. Baláž M. Eggshell membrane biomaterial as a platform for applications in materials science // *Acta Biomaterialia*. Elsevier Ltd, 2014. Vol. 10, № 9. P. 3827–3843.

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ СТРУКТУР МНОГОСЛОЙНОГО ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

^{1,2}Леньшин А.С., ¹Пешков Я.А., ¹Величко К.Е., ¹Канныкин С.В., ¹Минаков Д.А.

E-mail: tangar77@mail.ru

¹Воронежский государственный университет, г. Воронеж

²Воронежский государственный университет инженерных технологий,
г. Воронеж

В данной работе были изучены особенности строения поверхности образцов многослойного пористого кремния, полученных при одностадийном и двухстадийном электрохимическом травлении, методами ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии, рентгеновской рефлектометрии, ИК и люминесцентной спектроскопии.

Образцы пористого кремния были получены при различных плотностях тока в растворе плавиковой кислоты. Средний диаметр основного вида пор в образцах макропористого кремния составил 150–200 нм. Рентгеновские эмиссионные USXES Si $L_{2,3}$ спектры образцов были получены на уникальном лабораторном рентгеновском спектрометре-монохроматоре «PCM-500». Данная методика чувствительна к локальной парциальной плотности состояний атомов определенного сорта, благодаря чему возможна полуколичественная оценка относительного содержания фаз в данном материале. В случае пористого кремния USXES Si $L_{2,3}$ спектры отражают распределение Si $3s$ + Si $3d$ состояний с преобладанием Si $3s$. Анализ фазового состава методом USXES показывает, что содержание оксидной фазы в образцах спустя два месяца после получения образцов не превышает 15% ($\text{SiO}_x/\text{SiO}_2$). Определенная методом рентгеновской рефлектометрии величина пористости поверхностного слоя образцов макропористого кремния составляла около 30%. Исследование фотолюминесценции образцов пористого кремния показали её отсутствие у образцов с пористостью менее 30%

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007. Часть работы выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № FZGU-2020-0036 в рамках Государственного задания вузам.

СТРУКТУРА И ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ АТОМОВ Fe В ИНВЕРСНОМ ПОЛНОМ СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА CoFe_2Si

¹Пешков Я.А., ¹Буйлов Н.С., ¹Ивков С.А., ¹Нестеров Д.Н., ¹Барков К.А.,
¹Потуданский Г.П., ¹Сёмов Ю.Г., ^{2,3}Базлов А.И., ¹Юраков Ю.А.

E-mail: tangar77@mail.ru

¹Воронежский государственный университет, г. Воронеж

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва

³Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург

С момента открытия полуметаллического ферромагнетизма в половинном сплаве Гейслера NiMnSb , сплавы Гейслера привлекают значительный интерес благодаря теоретически предсказанной 100% спиновой поляризации на уровне Ферми и относительно высокой температуре Кюри. Такие уникальные свойства создают большой потенциал в использовании сплавов Гейслера в устройствах спинтроники. Особое внимание уделяют сплавам Гейслера на основе Co из-за их большого полного спинового магнитного момента и температуры Кюри более 1000 К. В данной работе исследуется инверсный полный сплав Гейслера CoFe_2Si , который имеет 29 валентных электронов и, согласно правилу Слейтера-Поулинга [1], обладает магнитным моментом около $5 \mu_B$.

Объёмный поликристаллический сплав CoFe_2Si был получен дуговой плавкой в атмосфере аргона. Слиток переплавляли пять раз, для обеспечения однородности образца. Атомный состав, однородность и кристаллическая структура образца были исследованы методами энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и рентгеновской дифракции. Магнитоструктурные исследования проводились ⁵⁷Fe мессбауэровской спектроскопией в геометрии пропускания с использованием спектрометра CM 1101 в режиме постоянного ускорения.

Инверсный полный сплав Гейслера CoFe_2Si кристаллизуется в инверсную X структуру (тип CuHg_2Ti , F43m, 216), в которой атомы Fe занимают $4a$ (0 0 0) и $4d$ ($3/4$ $3/4$ $3/4$) позиции. Результаты мессбауэровской спектроскопии образца при комнатной

температуре показаны на рисунке 1. Наблюдаемый спектр, состоящий из двух секстетов, типичен для магнитоупорядоченной системы.

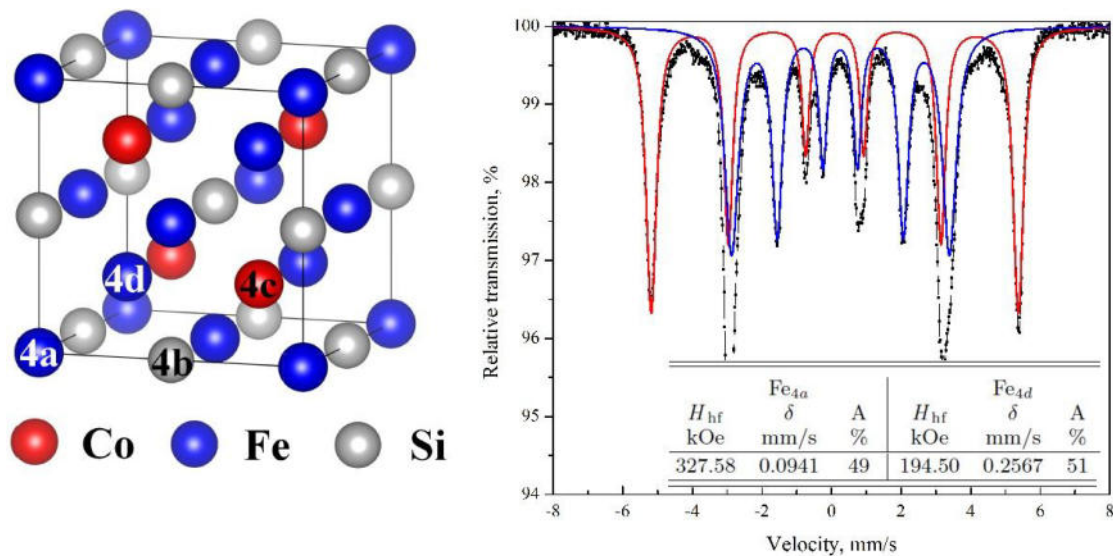


Рис. 1. Кристаллическая структура и, разложенный на ферромагнитные субкомпоненты, ^{57}Fe мессбауэровский спектр сплава CoFe_2Si . Атомы обозначены соответствующими позициями Вайкоффа.

Значения изомерного сдвига δ , сверхтонкого поля H_{hf} и относительной площади A для субкомпонент $\text{Fe}(4d)$ и $\text{Fe}(4a)$ были получены с помощью разложения спектра (синяя и красная линии, соответственно). Для сплава CoFe_2Si площадь $4d$ и $4a$ областей спектров почти равна, что подтверждает его инверсную структуру X. Это говорит о том, что атомы Fe заменяют половину атомов Co в $4d$ узлах решётки, по сравнению с полным сплавом Гейслера Co_2FeSi . Наличие двух секстетов в спектре CoFe_2Si указывает на различное локальное окружение атомов железа. Атом Fe в положении $4a$ демонстрирует большее значение сверхтонкого поля по сравнению с атомом на позиции $4d$.

В нашей работе показано, что мессбауэровская спектроскопия может служить полезным инструментом для изучения структуры и локального окружения атомов Fe в сплавах Гейслера. Это особенно важно при исследовании таких перспективных для использования в спинтронике нестехиометрических соединений, как $\text{Co}_{2-x}\text{Fe}_{1+x}\text{Si}$ и $\text{Ni}_{3-x}\text{Fe}_x\text{Si}$.

Список литературы

1. Felser C. and Hirohata A., Heusler Alloys: Properties, Growth, Applications, Springer Series in Materials Science Vol. 222, Springer International Publishing, Cham, 2016.

ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В VcO_2

^{1,2}Путков А.Е., ^{1,2}Тетерин Ю.А., ³Рыжков М.В., ²Тетерин А.Ю., ¹Маслаков К.И.,

²Иванов К.Е., ¹Калмыков С.Н., ¹Петров В.Г.

E-mail: andrei.putkov@mail.ru

¹Химический факультет Московского государственного университета имени М. В.

Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», 123182, Москва,

пл. Акад. Курчатова, д. 1.

³Институт химии твердого тела УрО РАН, 620990, Екатеринбург, ГСП, ул.

Первомайская, 91.

На основании проведенного впервые расчета полностью релятивистским методом дискретного варьирования кластера VcO_8 , дана интерпретация структуры экспериментального рентгеновского фотоэлектронного спектра диоксида берклия в диапазоне энергий связи от 0 до 50 эВ, полученного в работе [1] с использованием АИКа возбуждающего излучения. Построена фундаментальная схема молекулярных орбиталей (МО). Найдено, что сложная структура в спектрах РФЭС валентных электронов VcO_2 возникает в основном из-за образования внешних (ВМО) и внутренних валентных молекулярных орбиталей (ВВМО). Они включают в свой состав кроме $\text{Vc } 6s, 6p, 5f, 6d, 7s$ и $\text{O } 2s, 2p$ атомных орбиталей (АО) также и частично заполненные $\text{Vc } 7p$ АО. Из результатов расчета кластера VcO_8 установлено, что $\text{Vc } 5f$ АО в основном принимают участие в образовании ВМО, а $\text{Vc } 6p$ АО не являются основными, а наряду с $6d$ АО участвуют в образовании как ВМО, так и ВВМО, тогда как $\text{Vc } 6s$ АО практически не участвуют в химической связи. Найдено, что в диоксиде берклия населенность $\text{Vc } 5f$ -состояний за счет ковалентных эффектов возрастает по сравнению с диоксидами легких актиноидов [2-5], а структура $\text{Vc } 6d$ -, $7s$ - и $7p$ - уровней в VcO_2 мало меняется по сравнению с UO_8 [2] и другими кластерами легких актиноидов. Эти уровни вместе с $\text{O } 2s$ - и $\text{O } 2p$ -уровнями образуют «жесткий каркас», в котором перемещаются $\text{An } 5f$ -состояния в соответствии со степенью их заполнения.

Из-за высокой ковалентности связи в VcO_2 , заселенности атомных орбиталей и заряд берклия оказались иными, чем принимаемые в ионном приближении. С учетом валентной ионной конфигурации $\text{Vc}^{n+} 6s^2 6p^6 5f^{7.93} 6d^{1.56} 7s^{0.26} 7p^{0.52}$ ($Q_{\text{Vc}}^{n+} = +0.73 e^-$) для кластера VcO_8 определен эффективный заряд берклия, который равен +0.73 электрона. Эта величина существенно меньше значения +4 e^- (электрона), ожидаемого в ионном приближении ($\text{Vc}^{4+} 6s^2 6p^6 5f^7 6d^0 7s^0$, $Q_{\text{Vc}}^{4+} = +4 e^-$). Участие $\text{Vc } 6d$ - и $5f$ – электронов в

химической связи характеризует определяющую роль ковалентных эффектов в диоксиде берклия.

Также в настоящей работе оценен вклад электронов отдельных МО в прочность химической связи. Для этого использовались величины заселенностей перекрывания по Малликену для различных пар атомных орбиталей берклия и кислорода. Из оценки вклада валентных электронов в химическую связь найдено, что электроны ВМО на 28% ослабляют связь, обусловленную электронами ВМО.

Таким образом, впервые полученная нами фундаментальная схема МО ВкО₂, построенная с учетом экспериментальных и расчетных данных, позволяет не только понять природу формирования химической связи в этом диоксиде, но и лежит в основе расшифровки тонкой структуры других рентгеновских спектров ВкО₂.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-03-00333

Список литературы

1. B.W. Veal, D.J. Lam, H. Diamond, H.R. Hoekstra, X-ray photoelectron-spectroscopy study of oxides of the transuranium elements Np, Pu, Am, Cm, Bk, and Cf. *Phys. Rev. B* 15(6), 2929-2942 (1977).
2. Yu.A. Teterin, A.Yu. Teterin. X-ray spectral methods in investigation of the UO₂ electronic structure. *Radiochemistry* 47 (2005), pp. 440-446.
3. Yu.A. Teterin, A.Yu. Teterin, K.E. Ivanov, M.V. Ryzhkov, K.I. Maslakov, St.N. Kalmykov, V.G. Petrov, D.A. Enina. X-ray photoelectron spectroscopy structure and chemical bond nature in NpO₂. *Phys. Rev. B* 89 (2014), pp. 035102.
4. Yu.A. Teterin, K.I. Maslakov, A.Yu. Teterin, K.E. Ivanov, M.V. Ryzhkov, V.G. Petrov, D.A. Enina, St.N. Kalmykov. Electronic structure and chemical bonding in PuO₂. *Phys. Rev. B* 87 (2013), pp. 245108.
5. Y.A. Teterin, K.I. Maslakov, M.V. Ryzhkov, A.Y. Teterin, K.E. Ivanov, S.N. Kalmykov, V.G. Petrov. X-ray photoelectron spectra structure and Chemical bonding in AmO₂. *Nuclear Technology & Radiation Protection*. 30(2) 83-98 (2015).

ТЕРМООБРАБОТКА НАНОПОРОШКОВ СОСТАВА $BaZrO_3$

*Гаджимагомедов С.Х., Сайпулаев П.М., Эмиров Р.М., Алиханов Н.М., Магомедов К.Э.,
Рабаданова А.Э.*

E-mail: sultan.khan@mail.ru

Дагестанский государственный университет, г. Махачкала

Соединения на основе цирконатов бария ($BaZrO_3$), являются самыми современными протонопроводящими электролитными материалами для топливных элементов на основе оксидов, обладающих высокой протонной проводимостью и стабильностью (химической и механической). Среди основных недостатков таких материалов можно привести: высокое сопротивление границ зерен, сложность получения плотной керамики из-за медленного роста зерна при рекристаллизации, высокие температуры спекания (до $\sim 2000^\circ C$) и др. Для улучшения свойств материала предпринимаются попытки не только допирования [1], но и получения в наноструктурированном виде [2]. В данной работе методом нитрат - органических прекурсоров синтезированы нанопорошки состава $BaZrO_3$. Для формирования необходимой дисперсности частиц проводили соответствующую термическую обработку порошков. Использовались следующие режимы обработки с длительностью 30 мин: по отдельности при температурах $500^\circ C$, $600^\circ C$, $700^\circ C$, $800^\circ C$ и $900^\circ C$ (обозначения – режимы №1-№5); в четыре этапа один и тот же порошок (режимы №6 -№9) – в один этап при $600^\circ C$ (№6), в два этапа при $600^\circ C$ и $700^\circ C$ (№7), в три этапа при $600^\circ C$, $700^\circ C$ и $800^\circ C$ (№8), в четыре этапа при $600^\circ C$, $700^\circ C$, $800^\circ C$ и $900^\circ C$ (№ 9). Скорости подъема и охлаждения до фиксированных температур составляли $\sim 5^\circ C/мин$ и $\sim 3^\circ C/мин$. Процесс получения нанопорошка состава $BaZrO_3$ и морфология приведены на рис. 1. Как видно, порошок состоит из сильно агломерированных наночастиц в виде «хлопьев».

Согласно структурному анализу, изготовленные порошки преимущественно обладали фазой $BaZrO_3$ со структурой перовскита с пространственной группой $Pm-3m$ и побочной фазой карбида бария (фаза BaC_2). Результаты фазового анализа для всех порошков подробно представлены на рис. 2. Как видно, содержание (в %) фазы $BaZrO_3$ меняется от $\sim 84\%$ до $\sim 90\%$. При этом одноэтапная обработка в течение 30 мин при температуре $500^\circ C$ привела к формированию $\sim 87\%$ фазы $BaZrO_3$. Максимальное содержание фазы $BaZrO_3$ ($\sim 90\%$) и минимальное – фазы BaC_2 ($\sim 10\%$) присутствуют в порошке после обработки согласно режиму №8 (четыре этапа обработки, см. выше).



Рис. 1. Процесс синтеза нанопорошка $BaZrO_3$ (а и б) и его морфология (в) при небольшом увеличении

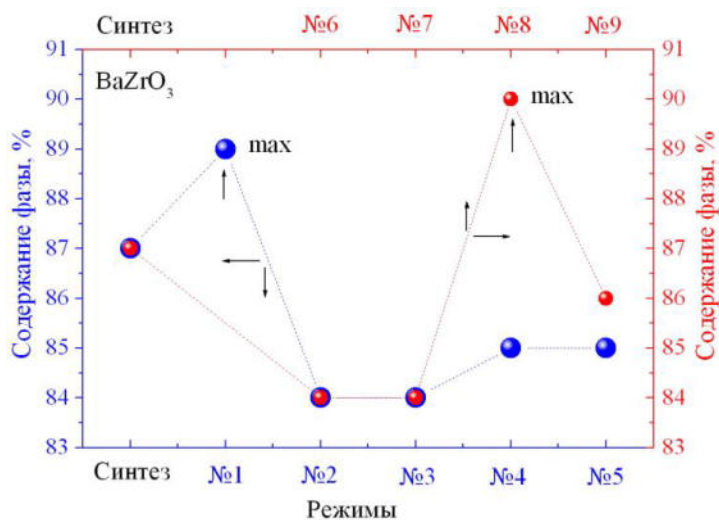


Рис. 2. Результаты фазового анализа нанопорошка $BaZrO_3$ до (синтез) и после различных режимов термообработки

Итак, методом нитрат - органических прекурсоров возможно изготовление нанопорошков с максимальным содержанием фазы $BaZrO_3$ в один этап. Для формирования заданной структуры и доли основной фазы необходима соответствующая термическая обработка порошков.

Работа выполнена в рамках проекта УМНИК (Договор 16504ГУ/2021 от 31.05.2021) и частично Гос. задания FZNZ-2020-0002.

Список литературы

1. Hossain M. K., Yamamoto T., Hashizume K. *Ceramics International*. V.47 (19). 2021. P. 27177-27187.
2. Antončík F., Lojka M., Hlášek T. et al. *Materials Chemistry and Physics*, V. 259, 2021. P. 124047.

АЛЬГИНАТ НАТРИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ НОСИТЕЛЬ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ФИЦИНА ПУТЕМ ВКЛЮЧЕНИЯ В ГЕЛЬ

Щеголеватых Е.А., Ольшанникова С.С., Наразина Д.А., Холявка М.Г., Артюхов В.Г.

E-mail: letyagina_kat@mail.ru

ФГБОУ Воронежский государственный университет, 394018, г. Воронеж,

ул. Университетская площадь, 1

Ферменты выступают в качестве уникальных биокатализаторов различных биохимических процессов. Они обладают ценными свойствами, обуславливающими их практическое значение. Биокатализаторы могут сохранять свои свойства даже вне клеток, что представляет возможность использования их в различных отраслях промышленности [1].

Фицин (КФ 3.4.22.3) – протеолитический фермент, обладающий противовоспалительными, ранозаживляющими, противовоспалительными и противораковыми свойствами. Энзим перспективен для улучшения качества мяса [2].

На сегодняшний день многие исследователи с интересом относятся к созданию препаратов на основе иммобилизованных ферментов. Особое место среди многообразия носителей занимает альгинат натрия. Его уникальность заключается в широком спектре свойств, среди которых необходимо отметить биосовместимость, нетоксичность, гидрофильность и полифункциональность [3,4].

Целью исследования была разработка методики получения гетерогенного биокатализатора на основе фицина, иммобилизованного в геле альгината натрия.

В качестве объекта исследования был выбран фицин («Sigma-Aldrich»), субстратом для гидролиза служил азоказеин («Sigma-Aldrich»), носителем для иммобилизации – альгинат натрия. В качестве иммобилизационной среды использовали следующие буферные системы: 0.05 М боратный с добавлением 0.1 М KCl с pH 8.0-10.0, 0.05 М ацетатный с pH 4.0-5.8, 0.05 М глициновый с pH 8.6-10.5, 0.05 М трис-глициновый с pH 8.5-9.0, 0.05 М фосфатный с pH 5.8-7.5.

Иммобилизацию фицина осуществляли следующими образом: к 1 г альгината натрия добавляли 20 мл раствора фермента в концентрации 3 мг/мл, инкубировали в течение 2 часов. После окончания инкубации образовавшийся осадок (в виде геля) промывали 0.05 М трис-HCl буфером (pH 7.5) до отсутствия в промывных водах белка (контроль осуществляли на спектрофотометре СФ-2000 при $\lambda = 280$ нм).

Протеазную активность фицина рассчитывали по скорости гидролиза субстрата азоказеина [5]. Содержание белка в иммобилизованных образцах фермента определяли методом Лоури [6].

Анализ содержания белка в гетерогенных препаратах показал, что наибольшее количество фицина (в мг на г носителя), иммобилизованного путем включения в гель альгината натрия, наблюдается при использовании 0.05 М трис-глицинового буфера с pH 9.0 и 0.05 М фосфатного буфера с pH 7.5. Общая активность (в ед на мл раствора) иммобилизованного фицина оказалась выше при использовании 0.05 М ацетатного буфера с pH 5.0 и 5.8. Наибольшую удельную активность (в ед на мг белка) показали препараты фицина, иммобилизованные путем включения в гель альгината натрия при использовании 0.05 М ацетатного буфера с pH 4.0-5.0, 0.05 М фосфатного буфера с pH 5.8 и 7.0, 0.05 М боратного буфера с добавлением 0.1 М KCl с pH 10.0.

Таким образом, нами были подобраны условия иммобилизации фицина путем его включения в гель альгината натрия. Оптимальное соотношение содержания белка (мг на г носителя), общей активности (в ед на мл раствора) и удельной активности (в ед на мг белка) получено при иммобилизации фицина путем включения в гель альгината натрия при использовании 0.05 М ацетатного буфера с pH 5.0. Представленные результаты могут быть использованы в медицине, пищевой и фармацевтической промышленности, а также в сельском хозяйстве.

Работа выполнена при финансовой поддержке в форме гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук МД-1982.2020.4. Соглашение 075-15-2020-325.

Список литературы

1. Загоскина Н.В. Биотехнология: теория и практика: учебное пособие для вузов. М.: Оникс, 2009. 496 С.
2. Холявка М.Г., Наквасина М.А., Артюхов В.Г. Практикум по биотехнологии: иммобилизованные биологические объекты в системе лабораторных работ. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017. 161 С.
3. Холявка М.Г., Артюхов В.Г. Иммобилизованные биологические системы: биофизические аспекты и практическое применение: учебное пособие. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017. 261 С.
4. Tischer W. Immobilized Enzymes: Methods and Applications. V.200. 1999. P. 95-126.
5. Sabirova A.R., Rudakova N.L., Balaban N.P., Ilyinskaya O.N., Demidyuk I.V., Kostrov S.V., Rudenskaya G.N., Sharipova M.R. A novel secreted metzincin metalloproteinase from *Bacillus intermedius* // FEBS Lett. V. 584 (21). 2010. P. 4419–4425.
6. Lowry O.H., Rosebrough N.J., Faar A.L., Randall R.J. Protein measurement with folin-phenol reagent // J. Biol. Chem. V.193. 1951. P. 265–275.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА

Созонова Н.М., Бакуева О.Р.

E-mail: sozonova@udman.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск

В работе рассматривается изменение ближней структуры поверхности металла при облучении ионами аргона с энергией 30 кэВ. Моделирование выполнено на программном пакете LAMMPS для молекулярной динамики. Исследованы процессы формирования атомной структуры ближнего порядка поверхностных слоев железа при ионном облучении аргоном. Для выявления изменений структуры при ионном воздействии была создана область, заполненная атомами железа. Ее облучали ионами аргона с начальной энергией 30 кэВ. Для описания взаимодействия атомов был использован гибридный потенциал, состоящий из потенциала погруженного атома и ZBL-потенциала. Построены парные корреляционные функции через одинаковые промежутки времени для отслеживания изменений, происходящих в ходе облучения. Наблюдается распыление атомов с поверхности и образование точечных дефектов в моделируемой области.

Данные моделирования сравнивались с результатами экспериментальных исследований локальной атомной структуры в пределах первой координационной сферы. Экспериментальные данные получены с поверхности железа после облучения ионами аргона.

Образцы железа представляли собой пластины 10×10×2 мм. Облучение проводили в ионно-лучевой установке УСУ-4 с источником ионов «Пион-1М» в импульсно-периодическом режиме. Параметры облучения: энергия 30 кэВ, $D = 10^{17}$ ион/см². Выбранные параметры ионной модификации позволили максимально воздействовать на структуру железа, не вызывая при этом термодинамический отжиг. Спектры энергетических потерь электронов были получены в геометрии обратного рассеяния вторичных электронов от поверхности образца на Оже-микроанализаторе JAMP-10S(JEOL). Анализ полученных экспериментальных данных проведен методом решения обратной задачи, результат показан на рисунке (сплошная линия) в сравнении с данными, полученными в ходе моделирования (пунктирная линия).

Поскольку кристаллическая решетка железа является ОЦК, мы наблюдаем два пика функции радиального распределения, которые находятся на расстоянии $R = 2,48 \text{ \AA}$ и $R = 2,87 \text{ \AA}$ с координационными числами 8 и 6 соответственно. Результат анализа экспериментальных данных показывает уменьшение координационного числа до 6,9 при

сохранении межатомного расстояния. При этом происходит уширение пиков, что может быть следствием повышения дисперсии межатомных расстояний. Сравнивая результаты компьютерного моделирования с табличными и экспериментальными данными видно, что максимумы пиков совпадают, а уменьшение координационного числа, возможно связано с тем, что расчет произведен на глубине 80 Å.

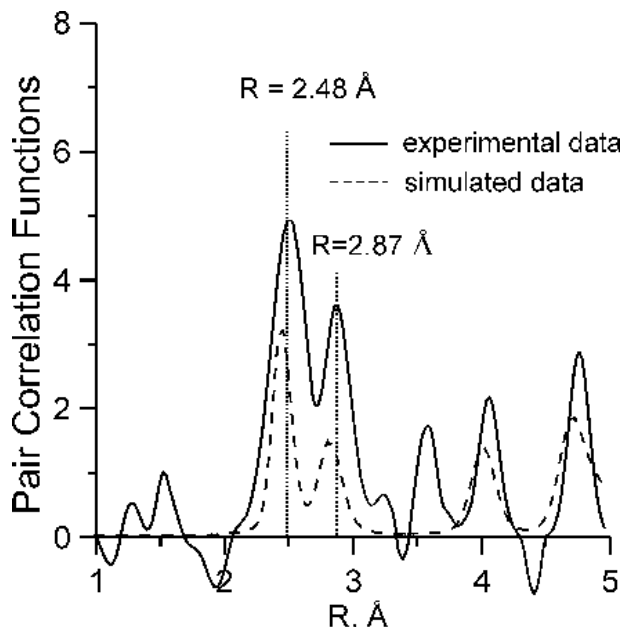


Рисунок 1. Парная корреляционная функция железа после облучения ионами аргона (сплошная линия) и вычисленная по результатам моделирования (пунктирная линия)

Таким образом, результаты моделирования с использованным потенциалом и заданными параметрами облучения хорошо описывают эксперимент по радиационному воздействию на поверхность железа.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ № 121030100002-0. При выполнении исследований использовалось оборудование ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

ПРИМЕНЕНИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК CuSe/Se ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ «БЫСТРОЙ» ОСИ ЧЕТВЕРТЬВОЛНОВЫХ ПЛАСТИНОК

Стяпшин В. М. , Козай В. Я. , Михеев Г. М.

E-mail: vms@udman.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск

Действие четвертьволновых пластинок основано на эффекте двойного лучепреломления. Обычно такие пластинки вырезают из одноосных кристаллов параллельно их оптической оси. В плоскости рабочей грани полученной пластинки выделяют две взаимно перпендикулярные оси: обыкновенную и необыкновенную, совпадающую с оптической осью кристалла. В практическом приложении вместо обыкновенной и необыкновенной осей различают соосные им, в зависимости от материала пластинки, «быструю» и «медленную» оси. Основным назначением четвертьволновых пластинок является превращение линейно поляризованного света в эллиптически или циркулярно поляризованный и наоборот. При этом направление вращения вектора электрического поля в прошедшем излучении, определяется взаимным расположением «быстрой» и «медленной» осей пластинки и плоскости поляризации падающего излучения. Как правило, на готовом изделии указывают «быструю» ось, однако известны случаи, когда происходила путаница в обозначении или оно могло отсутствовать. В связи с этим при проведении чувствительных к знаку циркулярной поляризации экспериментов возникает потребность в простом методе для самостоятельного определения осей четвертьволновой пластинки.

Обычно для определения «быстрой» оси четвертьволновых пластинок используются оптические приспособления, чьи поляризационные характеристики однозначно известны: другая четвертьволновая пластинка, ромб Френеля или металлическое зеркало. Вместе с ними применяются оптические анализаторы и соответствующие фотоприёмники. Поляризационные элементы имеют ограничения по ширине рабочего спектра и могут нуждаться в определённой юстировке при применении. В то же время существуют физические явления, позволяющие отказаться от использования поляризационных оптических элементов. Одно из таких явлений – поверхностный фотогальванический эффект (ПФГЭ). ПФГЭ проявляется в виде фототока, который возникает в материале под действием наклонно падающего света. При этом генерация фототока происходит без образования пар свободных носителей заряда и является результатом комбинации двух процессов: анизотропии распределения фотовозбуждённых электронов по импульсам при

их переходе из валентной зоны в зону проводимости и диффузного рассеяния этих электронов поверхностью [1].

Возникновение ПФГЭ, в частности, было обнаружено нами при исследовании фотоотклика в нанокompозитных плёнках CuSe/Se [2], которые изготавливались путём последовательного нанесения слоёв селена и меди методом вакуумно-термического напыления на диэлектрическую подложку. Процесс напыления осуществлялся в едином вакуумном цикле. Подложка имела комнатную температуру и располагалась перпендикулярно направлению движения напыляемых частиц. Горячие пары и кластеры меди вступали в химическую реакцию с селеном, образуя поверх него слой селенида меди. Вдоль коротких сторон подложки на плёнку наносились два параллельных тонкоплёночных измерительных электрода из золота. Готовые плёнки имели толщину около 100 нм и сопротивление постоянному току между измерительными электродами в пределах 30-100 Ом.

При воздействии на CuSe/Se-плёнку наклонно падающего импульсного циркулярно поляризованного лазерного излучения на разных длинах волн между измерительными электродами, расположенными параллельно плоскости падения, регистрировался фототок, объясняемый нами в рамках теории циркулярного ПФГЭ. Полярность данного фототока определялась знаком циркулярной поляризации падающего излучения.

Поскольку знак циркулярной поляризации прошедшего четвертьволновую пластинку излучения зависит от взаимного расположения осей пластинки и плоскости поляризации входящего в неё излучения, это позволяет применять нанокompозитные плёнки CuSe/Se для определения «быстрой» оси четвертьволновых пластинок без использования поляризационных оптических элементов, чему посвящён данный доклад.

Выполнено при частичной финансовой поддержке государственного задания (№ гос. рег. АААА-А19-119021890083-0) и РФФИ (проект № 19-02-00112).

Список литературы

1. Альперович В. Л., Белиничер В. И., Новиков В. Н., Терехов А. С. ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 2298-2311.
2. Mikheev G. M., Kogai V. Y., Mikheev K. G. et al. Materials Today Communications. 2019. V. 21. P. 100656(1-6).

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА НАНЕСЕНИЯ ЦИНКОВЫХ ПОКРЫТИЙ

Суксин Н.Е., Петров В.Г.

nutrelun@mail.ru, petrov@udman.ru

УдмФИЦ УрО РАН, г.Ижевск

Загрязнение объектов окружающей среды индустриально развитых регионов соединениями тяжелых металлов является актуальной проблемой для РФ. Одной из главных причин загрязнения являются отходы гальвано-химических производств, в частности отходы производств нанесения цинковых покрытий. Такие отходы образуются на предприятиях при нейтрализации промывных вод гальванических производств, а также при нейтрализации отработанных электролитов. Образующиеся осадки сушатся и вывозятся на полигоны твердых бытовых отходов, откуда могут попадать в окружающую среду. При этом теряется значительное количество ценных компонентов, которые можно было бы вернуть в хозяйственный оборот [1]. Переработка подобного вида отходов позволит предотвратить утилизацию потенциально полезных материалов.

Для исследования процессов утилизации были предоставлены твердые отходы гальванического производства нанесения цинковых покрытий, полученные при нейтрализации гидроксидом натрия смешанных кислотно-щелочных стоков с последующей сушкой образовавшихся осадков. Состав отхода приведен в табл.1. Отходы были отнесены к III классу опасности [2].

Таблица 1

Состав твердых отходов гальванического производства по нанесению цинковых покрытий

Компонент	Содержание, % масс
Цинк, в пересчете на гидроксид цинка	46,0
Железо, в пересчете на гидроксид железа (II)	34,0
Хром, в пересчете на гидроксид хрома (III)	9,4

На первом этапе разработки технологии были определены кинетические характеристики процесса с целью установления эффективности применения серной кислоты для разложения такого вида отходов [3].

Исследование проводили в специальной лабораторной установке с термостатированием реакционной смеси. Перемешивание реакционной смеси

осуществляли сжатым воздухом с использованием миникомпрессора. Для разложения отхода использовали раствор серной кислоты, приготовленный путем разбавления дистиллированной водой концентрированной 98% кислоты. Определение кинетических характеристик осуществляли при расчете степени превращения серной кислоты в зависимости от времени. Содержание кислоты в растворе определяли следующим образом: отбирали аликвоту из реакционной смеси через определенные промежутки времени; затем разбавляли ее в 20 раз и оттитровывали 0,1н раствором NaOH в присутствии индикатора фенолфталеина. Соотношение твердой фазы (Т) к жидкой (Ж) в реакционной смеси составляло Т : Ж = 1 : 5 по массе [4].

На основании проведенных исследований кинетические характеристики реакции разложения твердого отхода серной кислотой составляют:

$$E = 33,59 \text{ кДж/моль}$$

$$k_0 = 3,01, \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$$

Установлено, что растворы серной кислоты могут эффективно использоваться для разложения подобного вида отходов.

На втором этапе исследования была разработана схема переработки отходов гальвано-химических производств с последующим выделением ценных компонентов из раствора и их утилизацией.

Навеску шлама растворяли в 1М растворе серной кислоты при нагревании. При этом растворимые соединения цинка, железа и хрома переходили в раствор в виде сульфатов. По окончании процесса значение pH составило 1,0–1,5 ед.

Отделение железа от хрома и цинка проводили переводом его в Fe⁺³ с последующим осаждением. Для перевода железа в трёхвалентное состояние в раствор, полученный после вскрытия отхода, добавляли последовательно 15-20 % суспензии хлорной извести и гидроксида кальция до значений pH = 3-3,5. При этом образуется легкофильтруемая смесь гидроксида железа(III) и сульфата кальция.

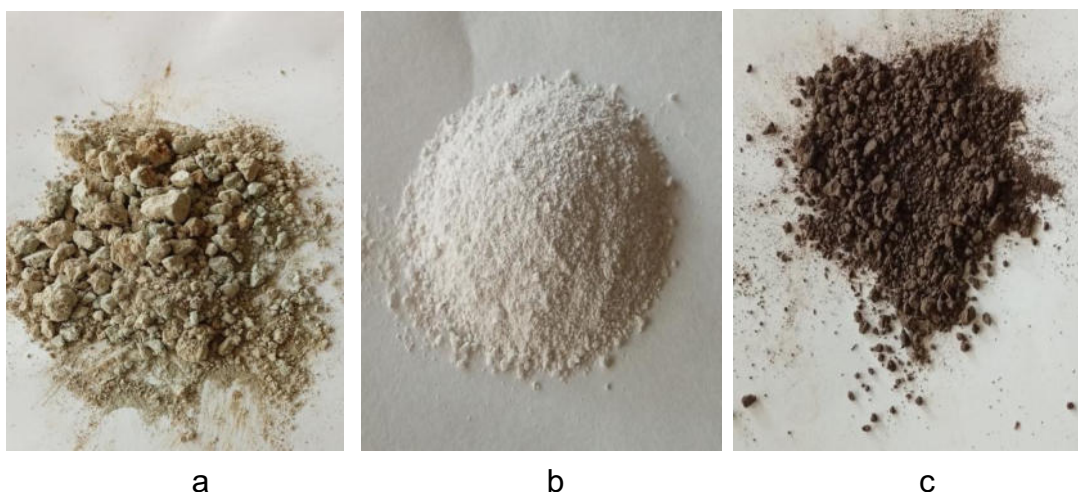
Полученный осадок, состоящий из сульфата кальция и гидроксида железа(III), отфильтровывали, промывали и высушивали. После этого осадок выдерживали в течении 1 ч. в муфельной печи при температуре 150–180 °С для получения полугидрата сульфата кальция. Полученный материал имеет свойства гипсового связующего, который может использоваться в строительстве в качестве добавок, из него могут быть получены различные изделия (рис.1) [5].



Рис. 1. Вид материала на основе гипсового связующего, полученного при утилизации отходов нанесения цинковых покрытий

Фильтрат со значением pH 3,0–3,5 ед. после отделения осадка гидроксида железа (III) и сульфата кальция смешивали с промывным фильтратом и добавляли 10% раствор гидроксида натрия. При этом происходило выпадение осадка гидроксидов хрома, цинка и части недоокислившегося железа (II). Осаждение осадка проводили до значений pH в фильтрате 8–9 ед. Полученный осадок отфильтровывали, промывали и сушили.

Для разделения цинка, хрома и остатков железа был проведён ещё один гидрометаллургический передел. В результате были получены концентраты хрома и цинка. На последней стадии цинк из раствора осаждали 5% раствором карбоната натрия. При этом образуется легкофильтруемый осадок гидрокарбоната цинка. Вид полученных при утилизации отходов показан на рисунке 2 [6].



а

б

с

Рис. 2. Вид материалов, полученных при утилизации твёрдого отхода гальванического производства по нанесению цинковых покрытий: а – смесь оксида железа и сульфата кальция; б – концентрат цинка; с – концентрат хрома

Определены кинетические характеристики процесса разложения твердого отхода гальванического производства растворами серной кислоты. Разработан способ утилизации твёрдого отхода гальванического производства по нанесению цинковых покрытий. В результате гидрометаллургического передела отхода получены концентраты цинка и хрома в виде оксидов. Также при утилизации был получен материал в виде смеси оксида железа и сульфата кальция, который может использоваться как компонент строительных материалов на основе гипсового связующего. Технология может использоваться на производственно технологических комплексах по обезвреживанию опасных промышленных отходов [7].

Список литературы

1. Виноградов С.С. Экологически безопасное гальваническое производство. - М. : Глобус, 1998. – 302 с.
2. Паспорт отходов I–IV классов опасности. Ижевск: ООО «Галс», 2020. 3 с.
3. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. - М. : Высш. шк., 1984. – 463 с.
4. Суксин Н.Е. Кинетические характеристики разложения твердых отходов гальванического производства получения цинковых покрытий / Н.Е. Суксин, В.Г. Петров // Химическая физика и мезоскопия. 2021. Т.23, №2. С.237-243.
5. Суксин Н.Е. Получение компонента строительных материалов на основе гипсового связующего при утилизации отходов гальванического производства / Н.Е. Суксин, В.Г. Петров // Материалы XVI Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Экология родного края: проблемы и пути их решения» (Киров, 27-28 апреля 2021). - Киров, 2021. - V. 1. - С. 325-328.
6. Петров В.Г. Утилизация твердых отходов гальванического производства по нанесению цинковых покрытий / В.Г. Петров, Н.Е. Суксин. DOI: 10.25750/1995-4301-2020-4-106-110 // Теоретическая и прикладная экология. - 2020. - № 4.- С. 67-72.
7. Петров В.Г., Альес М.Ю., Шумилова М.А. Производственно-технологический комплекс «Камбарка» по переработке промышленных отходов, как важный элемент устойчивого развития межрегионального индустриального комплекса// Материалы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Утилизация отходов производства и потребления: инновационные подходы и технологии», Киров, 2019. С.53-56.

ТОКОПРОВОДЯЩЕЕ, ЗАЩИТНОЕ ГИДРОФОБНОЕ ПОКРЫТИЕ

Мамаду Тамбура

E-mail: mamadoutamboura@yahoo.fr

НИТУ МИСиС, Москва

Солнечная энергия сегодня является важной альтернативой ископаемым источникам энергии. Африка и ближний восток - интересные области для развития этого источника энергии, благодаря оптимальному географическому положению и наличию большого количества солнечной радиации. Однако, препятствием к развитию в этих регионах является отложение пыли на поверхности фотоэлектрических модулей которое приводит к значительному снижению их эффективности (от 2 до 12%). Существуют инновационные решения для преодоления этой проблемы [1].

Одним из способов является метод очистки поверхности с помощью электростатического поля, который изначально был разработан НАСА для космических аппаратов. Покрытие состоит из оксида индия и олова. Этот же материал является основой датчиков и отвечает за обнаружение наличия пыли и примесей. После превышения предельной концентрации загрязнения на поверхности эти датчики, генерируют электрический сигнал, который, как «волна», поднимет частицы пыли и вытесняет их с поверхности [1].

Другим способом является технология, использующая покрытие PHOTOCAL SC основано на принципе фотокатализа, разработанная швейцарскими и французскими учеными. Это покрытие получается путем добавления наночастиц диоксида титана. Оно уничтожает атмосферные загрязнители и превращает их в углекислый газ и воду. Кроме того, очистка осуществляется благодаря гипергидрофобному эффекту за счёт конденсации воды из воздуха. Поэтому он не очень эффективен в жарком и сухом климате.

Одной из разработок японской компании Sketch Co., Ltd., Токио, Япония является инновационное покрытие на основе диоксида кремния, оксида олова, оксида титана, платины, метанола и воды. Это фотокатализатор, антистатическое и супергидрофильное покрытие, идеально подходящее для солнечных батарей. На рисунке 1 показана структура и состав данного покрытия [2].

Антистатический эффект достигается за счет содержания оксида олова и платины. Оксид олова имеет много свободных электронов и, таким образом, снижает электрическое сопротивление, которое предотвращает притяжение и прилипание мелкой пыли и частиц, находящихся в воздухе. Покрытия такого вида можно также эффективно использовать для

уменьшения неорганических загрязнений которые не могут быть разложены фотокатализатором [2].

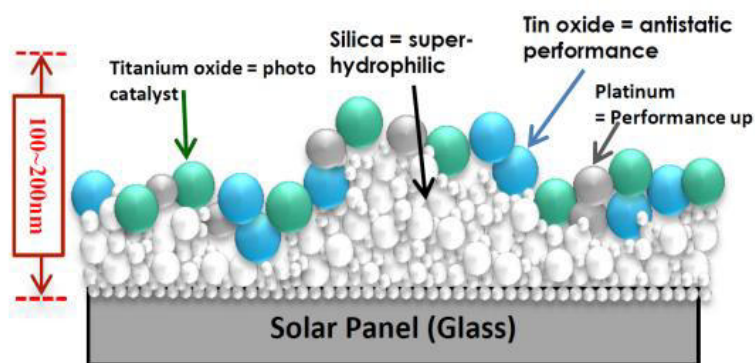


Рис. 1: Структура покрытия на поверхности солнечного модуля [2]

В литературы встречаются работы, посвященные разработке покрытий с включением магнитных наночастиц [3] или углеродных нанотрубок. К тому используются гипергидрофобные покрытие, которые упрощают очистку фотоэлектрических элементов. Однако этот метод, требует постоянного источника воды, и неприменим к странам с долгим засушливым периодом.

Наша работа состоит в разработке покрытий с использованием не только антистатических и супергидрофильных технологий, но и токопроводящих, имеющих низкую себестоимость производства. Эти покрытие могут быть получены введением проводящих полимеров в полимерную матрицу для достижения достаточно высоких антистатических эффектов для предотвращения осаждения пыли. Покрытия, полученные этими методами, следует сравнивать, чтобы они имели лучшие адгезионные свойства, оптимальную термостойкость и низкий показатель преломления.

Список литературы

1. DIALLO, Etude de l'Influence de dépôts de poussière sur les modules photovoltaïques, 2011.
2. S. Pedrazzi, G. Allesina и A. Muscio, «Are Nano-Composite Coatings the Key for Photovoltaic Panel Self-Maintenance: An Experimental Evaluation.,» Energies, т. 12, p. 11, 2018.
3. G.Becka, S.Barcikowskib и V.S.K.Chakravadhanulac, «An approach for transparent and electrically conducting coatings: A transparent plastic varnish with nanoparticulate magnetic additives,» Thin Solid Films, т. 595, pp. 96-107, 2015.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАСТИН АНТИМОНИДА ИНДИЯ ПОСЛЕ ПРОЦЕССОВ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Зареченская А.А., Гостева Е.А., Завражин Д.А.

a.zarechenskaya@yandex.ru

НИТУ МИСиС, Москва

АО «Гиредмет», Москва

Применение монокристаллических подложек антимонида индия (InSb) в качестве основы для создания приборов оптоэлектроники подразумевает высокие требования не только к структурному совершенству и однородности распределения электрофизических свойств, но и к качеству поверхности. От качества поверхности пластины и ее геометрии существенно зависит однородность выращенных на ней эпитаксиальных слоёв и их свойств. Технология изготовления полированных пластин высокого качества – это многостадийный процесс, включающий в себя следующие основные этапы: разделение монокристалла на пластины, механическое шлифование, химическое травление, химико-механическое полирование и отмывка пластин. На сегодняшний день этап механической обработки является узким местом полного цикла технологии изготовления полированных пластин InSb. Цель механического шлифования – выравнивание поверхности отрезанных пластин, уменьшение разброса их толщин, формирование однородной поверхности. Для эффективной реализации данного процесса необходимы объективные знания глубины и структуры нарушенного слоя поверхности пластины до и после проведения процесса, а также исследования механических свойств InSb для анализа процессов обработки. Значительную роль играет выбор абразивного материала, его размер, доли компонентов и состав шлифовальной суспензии, оптимально подобранные режимы проведения технологического процесса: рабочее давление, скорость шлифовального стола.

Целью работы является исследование дефектной структуры пластин InSb до и после проведения процесса механического шлифования, анализ полученных параметров с целью достижения высококачественной механически обработанной поверхности, перед химико-механической полировкой, и минимально нарушенным приповерхностным слоем при механическом воздействии.

Для проведения экспериментов подготовлены пластины монокристаллического нелегированного InSb (100) n-типа, выращенного в АО «Гиредмет». Шероховатость пластин после резки составляет: Ra 0,55 мкм, Rz 2,7 мкм. Сканирующей электронной микроскопией исследован скол резаной пластины (толщина 940 мкм) с целью получения информации о развитости поверхности и глубине трещеноватого слоя. Скол пластины

производился путем вдавливания инструмента возле кромки пластины. Изображения скола стороны 1 приведено на рисунке 1.

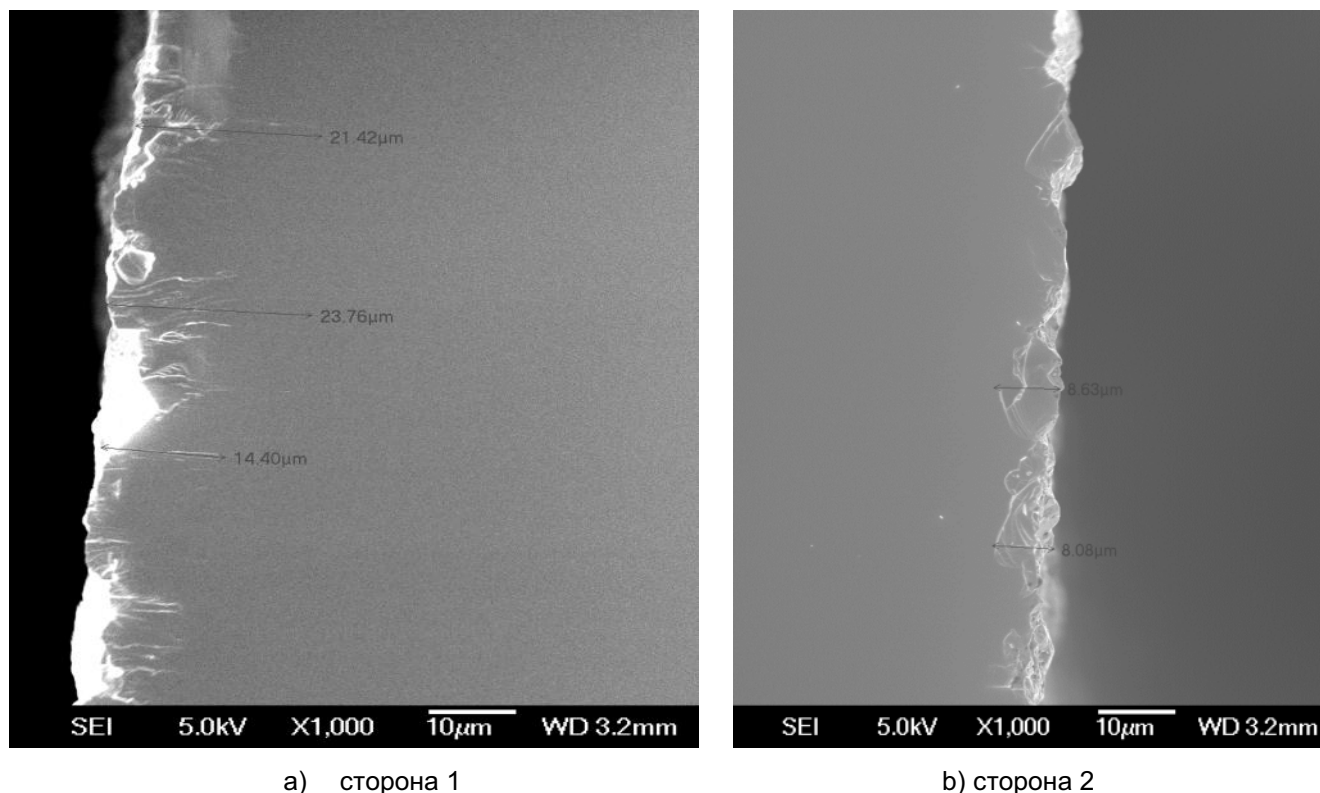


Рис. 1. Скол пластины InSb, увеличение x1000, а) сторона 1, б) сторона 2

Сравнивая полученные в СЭМ изображения 1 и 2 стороны одного скола видно, что со стороны 1 трещины выходящие на поверхность пластины значительно больше. Со стороны 1 глубина выявленных повреждений методом СЭМ составляет $\bar{d}(1) = 19,86$ мкм, а со стороны 2 глубина выявленных повреждений составляет $\bar{d}(2) = 8,36$ мкм. Такая значительная разница в глубине трещиноватых слоёв разных сторон одного скола может быть связана с вносимыми в пластину напряжениями в момент ее скалывания.

В дальнейшем для формирования поверхности с низкой шероховатостью проводилось механическое шлифование пластин с использованием микропорошков (50/50 ~ окись алюминия Al_2O_3 / диоксид циркония ZrO_2) с разной крупностью зерна. Равномерное распределение абразивных частиц по шлифовальному столу достигается за счет связующего компонента – деионнизированной воды и стабилизирующего суспензионного носителя. После двухстадийного механического шлифования пластина имеет следующую шероховатость R_a 0,2 мкм, R_z 1,16 мкм.

На этапе одностороннего механического шлифования проведены две серии экспериментов для выявления зависимости влияния разных величин рабочего давления

на скорость обработки пластин InSb с целью снижения минимальновозможной скорости съёма материала. Время процессов, состав и доли компонентов шлифовальной суспензии, температура оставались неизменными. В таблице 1 приведены параметры величин рабочего давления и скоростей обработки пластин InSb при скоростях шлифовального стола 21 обр/мин и 15 обр/мин.

Таблица 1

Зависимость скорости съёма InSb от удельного рабочего давления

Давление на пластину, г/см ²	Скорость шлифовального стола $u_{\text{стола}}$, обр/мин	
	21	15
	Скорость съёма InSb $u_{\text{съёма}}$, мкм/мин	
48,01	11,8	10,00
40,7	12,23	8,00
34,34	9,57	7,11
26,55	7,60	5,7

Результаты проведенных экспериментов подтверждают уменьшение скорости съема материала с падением давления. Такая зависимость обусловлена в основном двумя причинами: снижением числа одновременно работающих зерен и уменьшением глубины внедрения их в обрабатываемую поверхность.

Список литературы

1. Воротынцев В.М., Скупов В.Д. Базовые технологии микро-и наноэлектроники.: учебное пособие. – М.: Проспект, 2017.- 520.
2. Перевощиков В.А., Скупов В.Д. Особенности абразивной и химической обработки поверхности полупроводников. – Н. Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 1992.
3. Antimonide based infrared materials: Developments in InSb and GaSb substrate technologies / M.J. Furlong, R. Martinez, S. Amirhaghi e.a. //2010 22nd International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM). – IEEE. - 2010. – С. 1-5.

ОСОБЕННОСТИ РОСТА И СОСТАВА ГЕТЕРОСТРУКТУР $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{Si}$, ВЫРАЩЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БУФЕРНОГО СЛОЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ПА МПЭ

Золотухин Д.С., Леньшин А.С., Бельтюков А.Н., Середин П.В., Мизеров А.М.

E-mail: zolotukhinspb@gmail.com

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет», Воронеж

Использование подложек кристаллического кремния для эпитаксии гетероструктур AlGaIn является достаточно перспективным вариантом из-за их технологичности и относительно невысокой стоимости. Однако при этом достаточно серьезной проблемой, сдерживающей развитие технологии роста гетероструктур нитридов III группы на кремнии, является сильное рассогласование параметров кристаллических решеток этих материалов и различие коэффициентов термического расширения AlGaIn и Si . Это может приводить к возникновению большого количества различных дефектов и дислокаций, к неконтролируемым флуктуациям состава твердых растворов, отслаиванию гетероструктур [1-3]. Для решения этих проблем в последние годы предпринимаются попытки введения в структуру различных переходных буферных слоев $\text{A}_3\text{N}/\text{Si}$.

В данной работе была оценена эффективность внедрения в технологию роста $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{Si}$ в качестве буфера - дополнительного слоя нанопористого кремния и его влияние на морфологические параметры и состав поверхности гетероструктур.

Наноструктуры типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{Si}/\text{por-Si}/\text{Si}$ с использованием буферного слоя пористого кремния были сформированы методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота [4]. С привлечением методов сканирующей электронной и атомно – силовой микроскопии, а также рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии было показано, что формирование буферного слоя пористого кремния способствует более однородному распределению по размерам наноколонн гетероструктуры по сравнению с аналогичными структурами, выращенными на монокристаллическом кремнии при тех же условиях, а также небольшому изменению их состава (~ 5 % в сторону Al), связанного, очевидно, с различиями в процессе роста и коалесценции наноколонн в этих структурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007.

Список литературы

1. V.X. Ho, T.M. Al Tahtamouni, H.X. J.Y. Jiang, Lin, J.M. Zavada, N.Q. Vinh. ACS Photonics, 5, 1303 (2018). DOI: 10.1021/acsp Photonics.7b01253
2. T. Laurent, J.-M. Manceau, E. Monroy, C.B. Lim, S. Rennesson, F. Semond, F.H. Julien, R. Colombelli. Appl. Phys. Lett., 110, 131102 (2017). DOI: 10.1063/1.4979084
3. A. Ajay, C.B. Lim, D.A. Browne, J. Polaczynski, E. Bellet-Amalric, M.I. den Hertog, E. Monroy. Phys. Status Solidi B, 254, 1600734 (2017). DOI: 10.1002/pssb.201600734
4. A.M. Mizerov, S.N. Timoshnev, M.S. Sobolev, E.V. Nikitina, K.Yu.. Shubina, T.N. Berezovskaia, I.V. Shtrom, A.D. Bouravleuv, Semiconductors, 52(12), 1529, (2018). DOI: 10.1134/S1063782618120175

ФОРМИРОВАНИЕ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ ПРИ ВВЕДЕНИИ В ЭЛЕКТРОЛИТ РАЗЛИЧНЫХ ДОБАВОК

Матвеева Н. С., Грызунова Н.Н.

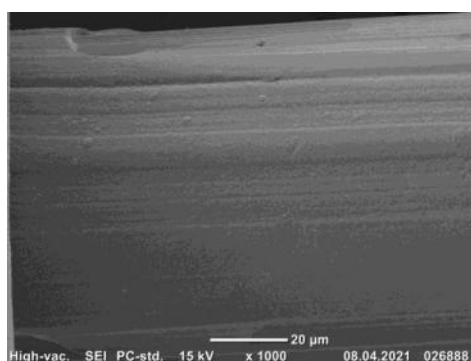
E-mail: mad.matveeva96@mail.ru

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти

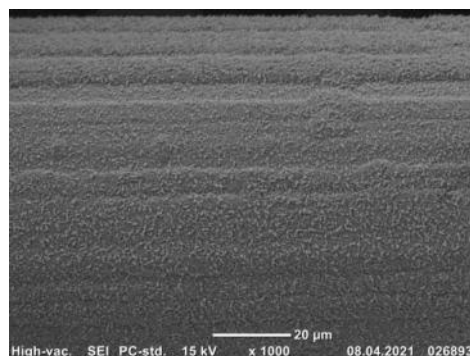
В последние годы одним из объектов исследований являются кристаллы никеля и покрытия из них, которые применяются в микроэлектронике, катализе и оптике [1, 2]. Особый акцент при этом делается на морфологию их поверхности, которая порой играет значительную роль в проявлении тех или иных свойств всего покрытия. Морфологией формирующейся поверхности можно управлять на этапе получения кристаллов и покрытий. Для этих целей широко применяется метод электроосаждения металлов и их сплавов. Поэтому в данной работе никелевые покрытия были получены методом электроосаждения из растворов электролита различного состава. Целью работы являлось определить влияние добавок в электролите на морфологию формирующегося покрытия.

Электроосаждение проводилось в двухстадийном режиме с плотностью тока $5\text{mA}/\text{cm}^2$ и $40\text{mA}/\text{cm}^2$ в течение 10 минут при поддержании температуры электролита 60°C . В качестве катода использовалась микросетка из нержавеющей стали, в качестве анода пластина из 99,99% никеля. За основу был взят электролит на водной основе с добавлением $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. Затем, в получившийся раствор по отдельности в одинаковой пропорции вводились добавки CaCl_2 , NaCl .

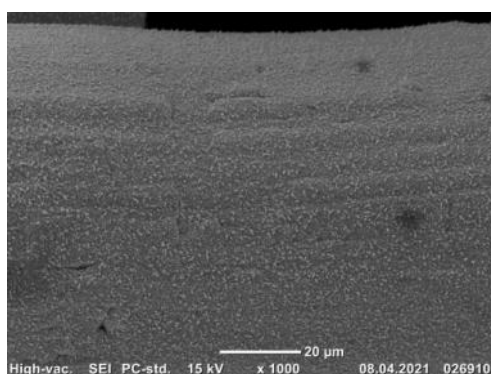
В результате электроосаждения были получены никелевые покрытия с различной морфологией поверхности. При электроосаждении в исходном электролите $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (рис. 1а) формируется плотное равномерное покрытие без ярко выраженных особенностей морфологии поверхности. При добавлении в электролит добавок в виде CaCl_2 (рис. 1б) и NaCl (рис. 1в,г) формируется однородное мелкокристаллическое покрытие с явными признаками изменения морфологии поверхности. Детальные микроскопические исследования показали, что при введении в электролит исследуемых хлоридов формируются покрытия с явно выраженной анизотропией роста кристаллов, имеющих конусообразный габитус (рис. 1г). Средние размеры конусообразных кристаллов в покрытии у основания не превышают 0,5 мкм, а при вершине кристаллов порядка 10-30 нм. Это может говорить о том, что добавки, вводимые в электролит, способствуют преимущественному развитию определенных кристаллографических граней кристаллов никеля из которых состоит покрытие.



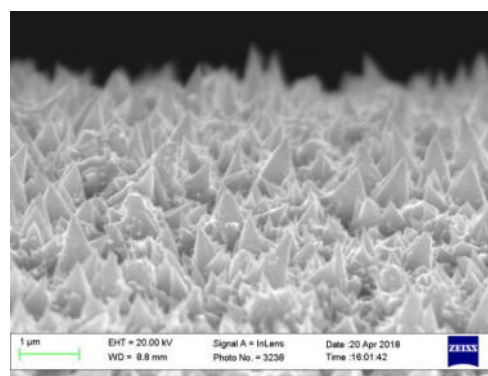
а



б



в



г

Рисунок 1. Морфология поверхности никелевых покрытий: а) исходный электролит без добавок; б) с добавлением CaCl_2 ; в, г) с добавлением NaCl

Полученные образцы показали повышенную каталитическую активность в реакции разложения аммиака. Исследования продолжаются для выявления других физико-механических свойств покрытий.

Список литературы

1. Н.И. Останин, А.А. Трофимов, Т.Н. Останина, Е.А. Шнайдер Электроосаждение никелевых покрытий с развитой поверхностью в диффузионном режиме // *Фундаментальные исследования*. 2017. №5. С. 61 – 65.
2. Матвеева Н.С. Никелевые покрытия при двухстадийном режиме электроосаждения // *XVL Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физика-химия и технология неорганических материалов»*. Москва, 1-4 октября 2019 / *Сборник трудов*, - М: ИМЕТ РАН, 2019. С.60-62.

СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ БЕСКИСЛОРОДНОГО ГРАФЕНА И НАНОРАЗМЕРНОГО CeO_2

^{1,2}Пономарев И.В., ²Афзал А.М., ²Трусова Е.А.

E-mail: IvanGforce@mail.ru

¹*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва*

²*ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова, Москва*

В химической, космической, военной, медицинской и других областях востребованы церий-содержащие материалы [1,2]. Особый интерес представляют наноструктурированные композиты на основе листов графена и диоксида церия, которые необходимы при производстве электродов литий-ионных батарей, электропроводящих и антикоррозионных покрытий, (фото)катализаторов, суперконденсаторов, газовых сенсоров и медико-биологических материалов [3-5]. Однако получение таких материалов сопряжено с рядом проблем. Существующие способы производства композитов на основе графена и оксидов металлов включают в себя получение оксида или восстановленного оксида графена – форм, не обладающих всем комплексом уникальных электронных свойств бескислородного графена. В большинстве известных подходов использованы «жесткие» условия.

В работе представлены результаты проводимого в ИМЕТ РАН исследования путей синтеза наноструктурированного композита графен- CeO_2 , в основу которого положено сочетание золь-гель и сонохимического методов [6-8]. Церий-содержащий золь соединяют с графеновой суспензией, полученной в смеси N,N-диметилноктиламин-вода (ДМОА-вода) при pH = 3. Синтез проводят так, чтобы золь→гель переход протекал на листах графена, а кристаллизация при термообработке происходила на изолированных друг от друга

центрах. Синтезированные образцы были охарактеризованы с помощью комплекса инструментальных методов анализа, включающего рентгеновскую дифракцию, просвечивающую электронную микроскопию, дифракцию электронов, спектроскопию комбинационного рассеяния света (КРС) и элементный анализ.

По данным элементного анализа, содержание углерода в композите не превышало 1 мас.%. Анализ результатов КРС спектроскопии и рентгеновской дифракции позволяет сделать предположение о том, что графеновый лист выполняет функции «направляющего фактора», в результате чего на поверхности кристаллитов образуется большее количество дефектов, чем при кристаллизации чистого CeO_2 . Листы графена формируют слоистую структуру агломератов, в которой нанокристаллы CeO_2 включены в разноориентированные слои толщиной 2-5 нм. В результате, графеновые листы ограничивают рост кристаллитов CeO_2 , изолированно диспергированных в листах графена.

Представленный в работе способ позволяет получить наноструктурированный порошок композита графен- CeO_2 с контролируемой на молекулярном уровне дисперсностью кристаллитов диоксида церия (менее 10 нм). Результаты КРС-исследования указывают на отсутствие в композите химического взаимодействия между графеном и CeO_2 , т.е. он является ван-дер-ваальсовой системой, что позволяет защитить графен от окисления и при этом сохранить его уникальные электронные свойства. Предлагаемый лабораторный способ получения порошков является технологически перспективным, а также доступным для реализации в условиях отечественного производства, так как не требует сложного и дорогостоящего оборудования. Задействованные в синтезе недорогие и практически безопасные для окружающей среды реагенты обеспечивают экономичность и экологическую приемлемость предлагаемой технологии.

Работа выполнена в ИМЕТ РАН по государственному заданию 075-00328-21-00 при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-03-00554_a).

Список литературы

1. Reed K., Cormack A., Kulkarni A., et al. *Environmental Science: Nano*. V. 1(5). 2014. P. 390-405.
2. Bharathi R.N., Sankar S. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*. V. 28. 2018. P. 1829-1838.
3. Kumar R., Agrawal A., Nagarale R.K., et al. *The Journal of Physical Chemistry C*. V. 120(6). 2016. P. 3107-3116.
4. Ahn C.H., Kalubarme R.S., Kim Y.H., et al. *Electrochimica Acta*. V. 117. 2014. P. 18–25.
5. Ni X., Zhang J., Hong L., et al. *Colloids and Surfaces A*. V. 567. 2019. P. 161-170.

6. Trusova E.A., Kotsareva K.V., Kirichenko A.N., et al. Diamond and Related Materials. V. 85. 2018. P. 23-26.
7. Trusova E.A. Materials Science and Engineering. Conference Series. V. 47. 2013. 6 P.
8. Trusova E.A., Kotsareva K.V., Kirichenko A.N., et al. Advances in Materials Science and Engineering. V. 2018. 2018. P. 1-11.

СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОБИОГИБРИДНОГО МАТЕРИАЛА «КЛЕТКИ ФИБРОБЛАСТЫ МЫШИ – НАНОЧАСТИЦЫ КРЕМНИЯ»

*¹Титова С.С., ¹Коюда Д.А., ²Цурикова У.А., ²Осминкина Л.А., ¹Какулия Ю.С., ¹ЧувакOVA О.А.,
³Чумаков Р.Г., ³Лебедев А.М., ¹Паринова Е.В., ¹Турищев С.Ю*

E-mail: titova@phys.vsu.ru

*¹Воронежский государственный университет, физический факультет, Воронеж,
Россия*

²Московский государственный университет, физический факультет, Москва, Россия

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В силу разнообразия своих неординарных свойств наночастицы пористого кремния могут быть успешно интегрированы с биологическими структурами. Такие материалы, имеющие биологическую основу, но содержащие в себе неорганические наноразмерные структуры называют нанобиогибридными. Физические процессы, происходящие в таких материалах актуальны для изучения различными методами. Несомненно, методы, которыми должны изучаться биогибридные наноматериалы, должны быть точными, поверхностно чувствительными и неразрушающими. Одним из таких методов, чувствительных к локальному атомному окружению, электронному строению и составу является использованный в данной работе метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray Absorption Near Edge Structure).

Для получения нанобиогибридного материала необходимы два типа объектов: биологические и наноразмерные неограниченные внедряемые объекты - наночастицы пористого кремния. Путем размалывания пленки пористого кремния, полученной в результате травления исходной подложки кремния c-Si (100) в течение часа в HF:C₂H₅OH=1:1 (плотность тока 50 mA/cm²), в планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7

были получены наночастицы кремния в виде суспензии. Суспензия наночастиц пористого кремния была интегрирована в клетки культуры 3T3 NIH (фибробласты мыши), выращенной на поверхности золота. Спустя 72 часа взаимодействия наночастиц и клеток их рост останавливался, питательная среда вымывалась, клетки фиксировались формальдегидом, который удалялся с поверхности образцов после закрепления.

Для получения спектров XANES (возбуждения основного $L_{2,3}$ уровня атомов кремния или K уровня атомов кислорода) используется высокоинтенсивное излучение синхротронных источников, что позволяет варьировать энергию квантов рентгеновского излучения без потерь в интенсивности. Данные спектроскопии XANES в данной работе были получены на станции НАНОФЭС синхротрона НИЦ "Курчатовский институт". Глубина информативного слоя составляла ~ 5 нм для Si $L_{2,3}$ спектров и ~ 10 нм для O K спектров.

Анализ данных XANES $L_{2,3}$ - края поглощения кремния показал значительное изменение тонкой структуры внедряемых частиц при их совмещении с клеточной культурой. Для образца биогибридного материала в области, относимой к элементарному кремнию, наблюдается резкое падение, провал интенсивности, в отличие от плавно возрастающего в этой области спектра суспензии. Такое резкое падение с характерной для кристаллического кремния тонкой структурой (соответствующем спин-дублетному расщеплению основного 2p уровня кремния $\sim 0,6$ эВ), наблюдалось ранее, названо нами эффектом «обращения интенсивности» и может быть связано с взаимодействием синхротронного излучения с наноразмерной структурой. Такая структура может быть свидетельством наличия в биогибридном образце значительного количества неокисленных атомов кремния.

Абсолютная интенсивность XANES K - края поглощения кислорода, экспериментального биогибридного образца по крайней мере в 4 раза выше абсолютной интенсивности тонкой структуры для суспензии в этом же диапазоне энергий. Такой результат свидетельствует о значительно превосходящем вкладе кислорода в спектр нанобиогибридного материала, что является пусть и косвенным, но свидетельством наличия биологических структур в образце. Из сопоставления спектров XANES Si $L_{2,3}$ и O K можно заключить, что значительное количество кислорода не связано с атомами кремния, и, как следствие, является компонентом органических соединений.

Таким образом, можно сказать, что наночастицы кремния, внедренные в клеточную культуру, подвержены изменениям, характер которых определяют дальнейшие исследования и перспективы их использования в биомедицине.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20180).

КОМПЛЕМЕНТАРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ВКЛЮЧАЮЩИЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В УЛЬТРАМЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ

Турищев С.Ю.

E-mail: tsu@phys.vsu.ru

Воронежский государственный университет, Воронеж

Разработки в области функциональных материалов и структур уже давно невозможно представить без высокоточной диагностики позволяющей восстановить фундаментальные свойства изучаемой системы на атомном или субатомном уровне. Методы электронной микроскопии, такие как просвечивающая и растровая электронная микроскопия являются обязательными для диагностики материалов и структур пониженной размерности. Важными являются и методы, чувствительные к структуре вещества, такие как дифракция рентгеновских лучей или электронов.

С другой стороны применение синхротронного излучения чрезвычайно высокой интенсивности, коллимированности и вариабельности длины волны в современных приложениях методов рентгеновской и электронной спектроскопии и микроскопии крайне востребовано. В самом деле, такие взаимодополняющие друг друга методы, как спектроскопия рентгеновского поглощения и фотоэлектронная спектроскопия обладают высокой чувствительностью к локальному атомному окружению, химической связи даже в случае малых количеств изучаемого материала. Это безусловно важно для понимания фундаментальных причин проявления свойств изучаемых структур, оптимизации их функционального назначения и отработке технологических аспектов формирования.

С точки зрения диапазона энергий квантов (длин волн) ультрамягкое рентгеновское излучение крайне важно для материалов, особые свойства которых продиктованы или находятся в прямой зависимости от чрезвычайно развитой поверхности - материалов нанометрового диапазона и структур на их основе. Использование синхротронного излучения в этом диапазоне привело к усовершенствованию и существенному расширению возможностей методов рентгеноэлектронной спектроскопии, в том числе в связке с методами, реализуемыми в лабораторных условиях.

Будут приведены примеры совместного использования синхротронных и лабораторных методов рентгеноэлектронной спектроскопии и их расширений для диагностики функциональных наноматериалов включая бионаногибридные.

Доклад будет представлен в рамках реализации гранта по соглашению 15.СИН.21.0005 Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и

нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы, проекта Российского научного фонда 19-72-20180, проектов Российского фонда фундаментальных исследований 21-53-12042 НИИО_а и 20-03-00901, государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы по проекту № FZGU-2020-0036.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ МАГНЕТИТА И ЕГО СТРУКТУРНЫЕ И ТЕКСТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Эмиров Р.М., Гаджимагомедов С.Х., Алиханов Н.М.-Р., Рабаданов М.Х..

E-mail: aderron@mail.ru

*ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет имени»,
367000, г. Махачкала, Россия*

Электрохимическим методом синтезирован наноразмерный магнетит. В качестве электродов были использованы: катод из титана и аноды из железа и платины. А в качестве электролита был использован раствор хлорида натрия.

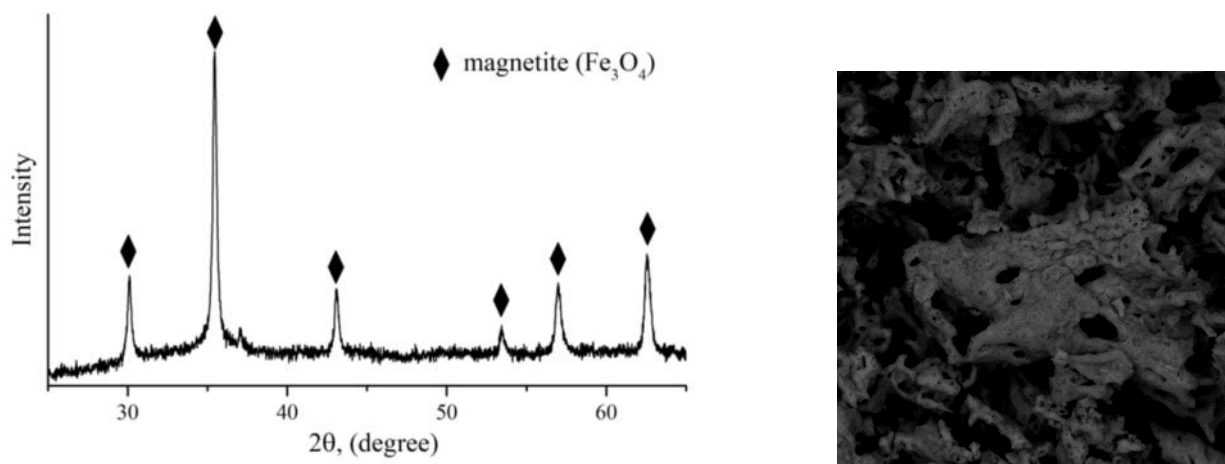


Рис. 1. Дифрактограмма и морфология нанопорошка, полученного электрохимическим трехэлектродным методом.

Из рисунка 1 видно, что все пики соответствуют кубической фазе магнетита. Средний размер кристаллитов, вычисленный по формуле Шеррера, равен ~ 25 нм. Ниже в таблице 1 представлены текстурные характеристики полученного магнетита.

Текстурные характеристики магнетита

Текстурные характеристики	Значение
Величина удельной поверхности, м ² /г	19.5
Удельный объем монослоя, НТД/г	4.48
Константа БЭТ	37
Удельная поверхность мезопор м ² /г	36.0
Размер кристаллитов, нм	25,5

Удельная поверхность, полученного нанопорошка равна 19.5 м²/г, что во много раз больше (1.78 м²/г) природного магнетита [1].

Работа выполнена в рамках гранта Главы Республики Дагестан 2020 г.

Список литературы

1. Salazar-Camacho C., Villalobos M., de la Alatorre J., Alcaez-Cienfuegos J., Gutierrez-Ruiz M.E. // Gem. Geol., 2013, vol. 347, p. 233.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ 2,4-ДИНИТРОФЕНОЛА ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА

¹Дорошенко А. В., ¹Куркин Н. А., ¹Волков А. С., ^{1,2}Томина Е. В.

E-mail: al.doroschenko2016@yandex.ru

¹ Воронежский государственный университет, Россия, Воронеж

² Воронежский государственный лесотехнический университет имени

Г. Ф. Морозова, Россия, Воронеж

Наличие 2,4-динитрофенола в сточных водах ингибирует протекание процесса фотосинтеза и является токсичным по отношению к водной микрофлоре и теплокровным. Самым эффективным способом его деструкции до нетоксичных веществ считается глубокое окисление экологически чистым окислителем – пероксидом водорода. Однако окислительный потенциал Н₂О₂ недостаточен для окисления многих устойчивых загрязнителей; в связи с этим возникает необходимость активации пероксида водорода.

Наиболее изученной системой с высоким окислительно-восстановительным потенциалом является реактив Фентона – пероксид водорода в сочетании с ионами железа (II) [1].

В настоящей работе изучались каталитические свойства феррита кобальта в процессе деструкции 2,4-динитрофенола в Фентон-процессе. Нанопорошок феррита кобальта синтезировали цитратным методом [2]. Для исследования каталитических свойств феррита кобальта готовили реакционный раствор, содержащий 0,03 г/л 2,4-динитрофенола и 10 масс.% перекиси водорода. Для поддержания pH на постоянном уровне 4.5 в ходе реакции в раствор добавляли ацетатный буфер. Масса катализатора феррита кобальта составляла 0,2500 г.

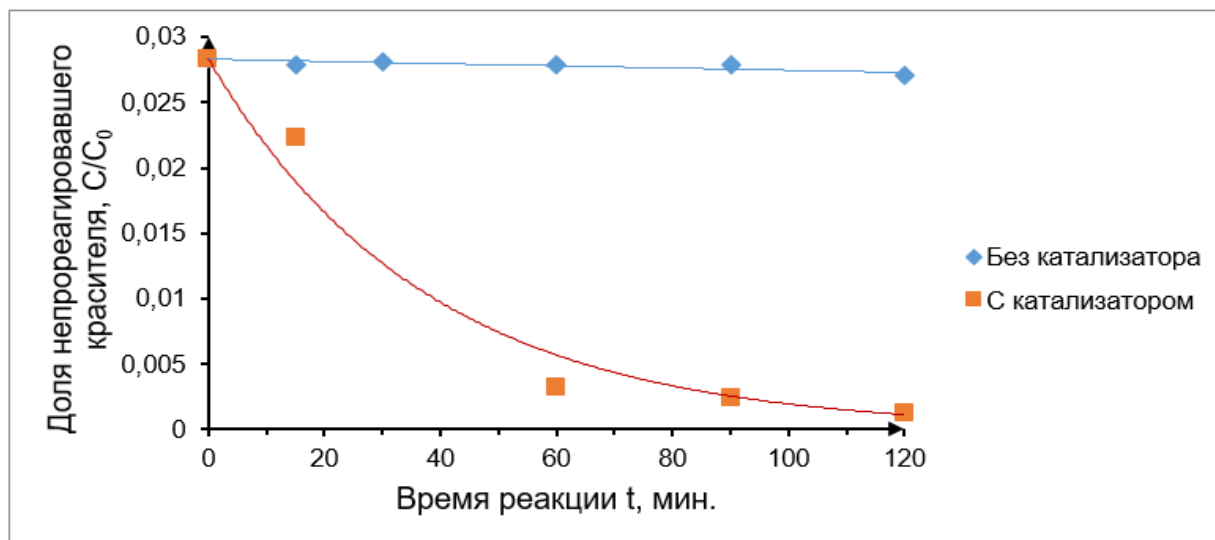


Рис. 1. Кинетические кривые окисления 2,4-динитрофенола.

Измерение концентрации 2,4-динитрофенола после начала реакции проводили на спектрофотометре КФК-2. Перед измерением оптической плотности реакцию останавливали, удаляя из реакционной смеси катализатор. Кинетические кривые приведены на рисунке 1.

Таким образом, продемонстрировано, что наноразмерный феррит кобальта является эффективным катализатором реакции разложения пероксида водорода с образованием радикалов, выступающих активными окислителями органических красителей, в том числе, и 2,4-динитрофенола. Это открывает перспективы использования наноразмерных ферритов в качестве катализаторов фентон-процессов окисления различных токсичных и загрязняющих веществ в сточных водах, таких как формальдегид, фенол и т.п.

Результаты исследований частично получены на оборудовании Центра коллективного пользования Воронежского государственного университета. URL: <http://ckp.vsu.ru>

Список литературы

1. Конькова Т.В., Иванцова Н.А., Алехина М.Б., Канделаки Н.И. Вода: химия и экология. Т. 76. Вып. 10. 2014. С. 38-43.
2. Shashank D. B., Rakesh K. S., Vivek K., Nishant K., Shambhu K. Materials Today: Proceedings. Volume 46. Part 15. 2021. P. 6527-6533.

ГРАДИЕНТНО-УСТОЙЧИВЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЯ КАНА-ХИЛЛАРДА С РЕАЛЬНЫМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Игнатъев А. Ю.

E-mail: aleksandr83296@gmail.com

ФГБОУ ВО “Удмуртский государственный университет”,

Институт математики, информационных технологий и физики, Ижевск, Россия

Изучение такого неустойчивого процесса, как спинодальный распад, в рамках структурообразования является актуальной задачей материаловедения. В данном явлении проявляются качественно новые физические свойства материалов. Использование компьютерного моделирования всегда являлось наименее затратным способом прогноза поведения системы. При его реализации возникает сложность связанная с неустойчивостью самого процесса и с неустойчивостью численных методов. Решение данной проблемы заключается в использовании градиентно-устойчивых методов[1,2], которые положены в основу данной работы.

Целью данной работы является построение градиентно-устойчивого решения для модифицированного уравнения Кана-Хилларда.

Модифицированное уравнение имеет вид:

$$\tau_c \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = \nabla \cdot \left[M_c \nabla \left(\frac{\partial f(\varphi)}{\partial \varphi} - \varepsilon^2 \varphi \right) \right],$$

где ε^2 - коэффициент корреляции. В данном уравнении фигурирующей величиной является параметр порядка φ (концентрация компоненты бинарного раствора) и зависящий от него потенциал $f(\varphi)$. В рамках данной работы рассматривается термодинамический потенциал для системы CoCu[3]:

$$f(\varphi) = \varphi G_A(T) + (1 - \varphi) G_B(T) + RT(\varphi \ln \varphi + (1 - \varphi) \ln (1 - \varphi)) + \varphi(1 - \varphi) \sum_k J_k (1 - \varphi)^k.$$

Первые два слагаемых дают собственный вклад в свободную энергию от каждой компоненты. Слагаемое содержащее произведение газовой постоянной на температуру подчеркивает свойство системы, т.е. бинарный раствор является идеальным. Последнее слагаемое представляет собой избыточную энергию Гибса и описывает отклонение раствора от идеального.

Полученная разностная схема проверяется на устойчивость по фон Нейману. Для численного решения применяется метод пятиточечной прогонки[4]. Результат численных расчетов представлен на рисунке 1. Исходя из тестовых расчетов был сделан вывод, что алгоритм применяемый в данной работе является эффективным в широком диапазоне временных и сеточных шагов. Проверка по фон Нейману показала устойчивость полученной схемы.

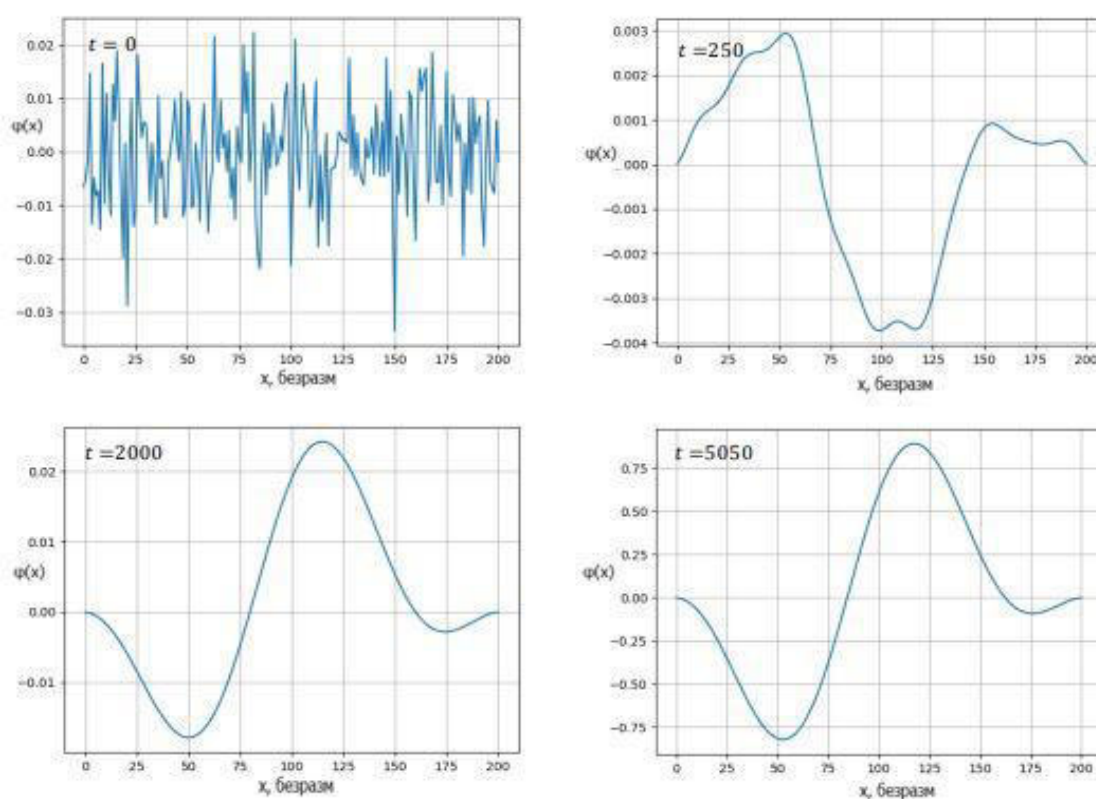


Рис. 1. Динамика изменения концентрации бинарного раствора с течением времени (время безразмерно)

Список литературы

1. Eyre D.J. Unconditionally gradient stable time step marching the Cahn Hilliard equation. *Comput. and Math. Models of Microstructural Evolution*. 1998. - P. 39-60.
2. Галенко П. К., Лебедев В.Г., Сысоева А.А. Градиентная устойчивость численных алгоритмов в локально-неравновесных задачах критической динамики. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2011. -Т. 51, - вып. 6, - с. 1148–1165.

3. Palumbo M. Thermodynamic analysis of the stable and metastable co-cu and co-cu-fe phase diagrams. Calphad. 2006. – Т. 30, - n. 2, - P. 171-178
4. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», М, 1978.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖФАЗНЫХ ОБЛАСТЕЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО НАПЫЛЕНИЯ

Каратаев А.В., Гайсин А.У., Соломонов А.В., Филатова Е.О.

farif123@mail.ru

*Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1,
Петродворец, Санкт-Петербург, Россия*

Исследования многослойных структур, синтезированных методом магнетронного напыления, указывают на зависимость состава их межфазной границы от порядка нанесения слоев. Согласно проведенным исследованиям, формируются асимметричные слои одного состава, но разной протяженности [1] или разной протяженности и/или разной стехиометрии [2,3].

Для объяснения возникающей асимметрии границ раздела был проведен теоретический анализ процесса обмена между атомами пленки и атомами подложки во время роста пленки и создана модель синтеза многослойной структуры методом магнетронного напыления. Формирование переходных слоев в результате перемешивания соседних слоев можно рассматривать как результат двух механизмов, возникающих при осаждении слоев: механического проникновения падающих атомов в слой и обмена позициями поверхностных и подповерхностных атомов, вызванного минимизацией поверхностной свободной энергии. Первый механизм вызван баллистическими столкновениями между падающими атомами и поверхностными атомами подложки и зависит от энергии падающего атома пленки, энергии связи, атомной массы, координационного числа и межатомного расстояния. Этот механизм особенно важен для методов осаждения с высокой энергией налетающих атомов (от единиц до десятков эВ).

Были рассчитаны энергии распыленных из мишени атомов и глубины их проникновения в подложку в процессе осаждения при использовании программного пакета Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) [4] для многослойных систем Mo/Si и Mo/Be

без/с барьерными слоями (B_4C и Si). Данная программа основана на приближении бинарных столкновений (BCA) и включает следующие приближения: мишень полностью аморфна, динамические изменения состава в материале не учитываются, рекомбинация выбитых атомов (междоузлий) с вакансиями не учитывается. Несмотря на ограничения, заложенные в программе, она позволяет установить основные факторы, влияющие на результирующую асимметрию межфазных зон в слоистых системах. Расчеты были проведены для различных значений энергии ионов аргона (от 50 эВ до 400 эВ).

Установлено, что глубина формирования интерфейса сопоставима с глубиной проникновения атомов при синтезе и слабо зависит от энергии ионов. Проанализировано влияние введения буферных слоев на формирование межфазной границы. Установлено, что стехиометрия бериллида, формирующегося на границе раздела в системе Mo/Be во время магнетронного распыления в основном определяется кинетической энергией падающих атомов. Результаты теоретических расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными нами ранее.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-72-20125.

Список литературы

1. Sakhonenkov, S., Filatova, E. O., Gaisin, A. U., Kasatikov, S. A., Konashuk, A., Pleshkov, R. S., & Chkhalo, N. I. (2019). Angle resolved photoelectron spectroscopy as applied to X-ray mirrors: In depth study of Mo/Si multilayer systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*.
2. Kasatikov S.A. et al. Study of Interfaces of Mo/Be Multilayer Mirrors Using X-ray Photoelectron Spectroscopy // *J. Phys. Chem. C*. 2019. Vol. 123, № 42.
3. S.S. Sakhonenkov, E.O. Filatova, S.A. Kasatikov, E.S. Fateeva, R.S. Pleshkov, V.N. Polkovnikov, Layer intermixing in ultrathin Cr/Be layered system and impact of barrier layers on interface region, *Applied Surface Science*, Volume 570, 2021, 151114, ISSN 0169-4332
4. Biersack J.P., Ziegler J.F. (1982) The Stopping and Range of Ions in Solids. In: Ryssel H., Glawischnig H. (eds) *Ion Implantation Techniques*. Springer Series in Electrophysics, vol 1

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИЗМЕЛЬЧЕННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ
(НА ПРИМЕРЕ ЛЕВЗЕИ САФЛОРОВИДНОЙ) В МНОГОСТУПЕНЧАТОЙ
ЦЕНТРОБЕЖНОЙ-УДАРНОЙ МЕЛЬНИЦЕ НА ПРОЦЕССЫ ЖИЗНЕДЕЯТЕЛЬНОСТИ
GALLERIA MELLONELLA**

Осокина А.С., Жиров Д.К.

e-mail: Anastasia.osokina2017@yandex.ru, zhirov_dmitriy@mail.ru

Удмуртский ФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

На сегодняшний день в пищевой промышленности активно развивается направление использования насекомых в качестве недорого, экологически чистого источника протеина. К таким перспективным насекомым можно отнести черную львинку (*Hermetia illucens*), сверчка домашнего (*Achetus domesticus*), большую восковую моль (*Galleria mellonella*). Перечисленные насекомые относятся к числу беспозвоночных, способных круглогодично развиваться в чистой культуре в замкнутом пространстве искусственных условий, что позволяет использовать вид в биотехнологических целях [1]. Для получения однородного сырья необходимо четко соблюдать технологические условия выращивания и кормления. Существует более 20 рецептов искусственных питательных сред для большой восковой моли. Для интенсивного выращивания в корм добавляют лекарственные травы, что повышает биомассу насекомых, увеличивает их выживаемость [2]. Лекарственные травы в основном измельчают с помощью мельницы для дробления комбикормов МРС-2. Вероятно, с увеличением площади частиц лекарственных растений повышается их проницательная способность. В качестве исследуемого лекарственного растения была выбрана левзея сафлоровидная (*Rhapónticum carthamoídes*), которая является мощным адаптогеном и биостимулятором [3].

Цель исследований – изучение влияния диаметра частиц лекарственных растений (на примере левзеи сафлоровидной) разного помола на рост и развитие личинок *Galleria mellonella*.

Методика исследований. Исследования проводились на базе Удмуртского НИИСХ Удмуртского УдмФИЦ УрО РАН. Опыт ставился в трехкратной повторности. Левзею растирали в многоступенчатой центробежной-ударной мельнице до нужного размера частиц.

Схема исследований

Название группы	Диаметр частиц, мкм	Питательная среда
Контроль (n=30)	-	Пчелиная сушь
1 опытная (n=30)	меньше 140	Пчелиная сушь+10% левзеи
2 опытная (n=30)	140-250	
3 опытная (n=30)	250-315	
4 опытная (n=30)	315-500	
5 опытная (n=30)	более 500	

Для улучшения консистенции питательной среды в ступке полученный порошок растирали с пчелиной сушью с добавлением 5 мл воды. Для определения процессов жизнедеятельности личинок в устройствах применяли следующие методы измерения массы личинок, по методике S. Beck (1960); длина личинки измерялась по методике J. D. Ellis, J. R. Graham, A. Mortensen (2013). Определение возраста личинок проводился по методике H.G. Dyar (1890) Продолжительность проведения опыта с личинками составляла 15 дней, после чего личинки замораживали в морозильной камере холодильника при температуре не меньше -15°C . Полученные данные подвергались статистической обработке методами вариационной статистики с проверкой достоверности результатов с помощью критерия Стьюдента и уровня значимости (P).

Предварительные результаты исследований показали, что масса личинок в контроле составила 0,11 г. В 1 опытной группе, масса личинок достоверно составила 0,15 мкг, что на 36% выше, чем в контроле. Наименьшая масса личинок выявлена в 4 опытной группе – 0,04 г. По длине разница опытных групп с контролем в среднем составила на 17,5% меньше, чем в контроле ($1,94 \pm 0,08$ мм). Головная капсула личинок, выращенных в опытных группах, составила 1,52 мм, что на 15% меньше контрольных значений ($1,77 \pm 0,04$ мм). Следует продолжить изучение данного вопроса с перспективой разработки методики подготовки питательной среды для стандартизированного культивирования личинок и дальнейшего получения качественного сырья.

Список литературы

1. Восканян О.А., Котова Н.А. Особенности и перспективы использования черной льявники // Научные исследования молодых ученых, 2020. С. 22-23.

2. Осокина А.С. Ресурсный потенциал применения личинок большой восковой моли (*Galleria mellonella* L.) при выращивании в лабораторных условиях...автореферат, Москва, 2016 – 23 с..

3. Тимофеев Н.П. Левзея сафлоровидная – источник для конструирования высокоактивных экидистероидсодержащих биостимуляторов / Нетрадиционное растениеводство. Экологичные селекция и биотехнологии. Медицина и геронтология. - Алушта, Изд-во ООО "ФОРМА", 2016,. С. 470-472.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРОХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ ТВЁРДОГО РАСТВОРА $Zn_xPb_{1-x}S$

¹ Прокопьева Т.В., ²Аверкиев И.К.

E-mail: prokopevatatyana7@gmail.com

¹Удмуртский государственный университет, Ижевск,

² Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск,

В последнее время тонкие пленки применяются в качестве функциональных, упрочняющих, светоотражающих материалов, проводящих, полупроводниковых и диэлектрических материалов при формировании контактов, создании светофильтров, материалов для возобновляемой энергетики. Широкое применение тонких пленок обусловлено благодаря экспериментальным и теоретическим исследованиям в разработке технологии их получения, которые позволили получать тонкие пленки из различных соединений [1,2]. На данный момент существуют множество физических и химических методов осаждения тонких пленок сульфидов металлов [3]. Особое место занимает химическое осаждение из водных растворов.

Данный метод нашел широкое практическое применение в современной промышленности и приборостроении. Преимущества данного метода – это высокая производительность и экономичность, простота технологического оформления, возможность нанесения пленок на поверхности сложной формы и различной природы, а также легирования осаждаемого слоя органическими ионами или молекулами, не допускающими высокотемпературный нагрев. Но несмотря на большие успехи в разработке данного метода он остается рецептурно-экспериментальным методом. Большинство работ по гидрохимическому осаждению сульфидов металлов имеют сведения общего характера, т. е. не рассматриваются ни химические процессы, ни

термодинамические расчеты, ни связь с концентрациями исходных веществ. Поэтому определение граничных условиях осаждения из термодинамических расчетов, а также исследования влияния концентрации исходных веществ на конечный результат является актуальной проблемой. Таким образом, целью настоящей работы является оценка возможности гидрохимического синтеза твердого раствора на основе сульфидов цинка (ZnS) и свинца (PbS), при использовании двух различных халькогенизаторов.

В ходе работы были получены уравнения для расчета условий образования твердой фазы сульфида металла при использовании в качестве халькогенизатора тиомочевина (1) и тиаоацетамида (2):

$$pC_H = \frac{1}{m} pPR_{Me_m X_n} - p\alpha_{Me^{n+}} - \frac{n}{m} \cdot (pk_{H^2X}^{1,2} - 2pH_H + \frac{1}{2} pK_c + \frac{1}{2} p[XГ]_H + \frac{1}{2} p\frac{\beta_{ц}}{\beta_x}) \quad (1)$$

$$pC_H = \frac{1}{m} pPR_{Me_m S_n} - p\alpha_{Me^{n+}} - \frac{n}{2} (pk_{H^2S}^{1,2} + \frac{1}{3} (pK_c - pK_w - 2pH + p[TAA]_H + p\beta_{нас} + p\beta_{NH} + 2p\beta_s)) \quad (2)$$

где p – отрицательный десятичный логарифм; m и n – стехиометрические числа атомов халькогена и металла в соединении; $PR_{Me_m X_n}$ – произведение растворимости твердой фазы халькогенида металла (постоянная величина); $\alpha_{Me^{n+}}$ – долевая концентрация свободных ионов металла; $k_{H^2X}^{1,2}$ – константы ионизации сероводородной кислоты; K_c – константа равновесия процесса; $[XГ]_H$ – начальная концентрация халькогенизатора; $[TAA]_H$ – начальная концентрация тиаоацетамида; β_x и $\beta_{ц}$ – показатели, которые связывают константы ионизации H_2X и H_2CN_2 соответственно.

Тиомочевина

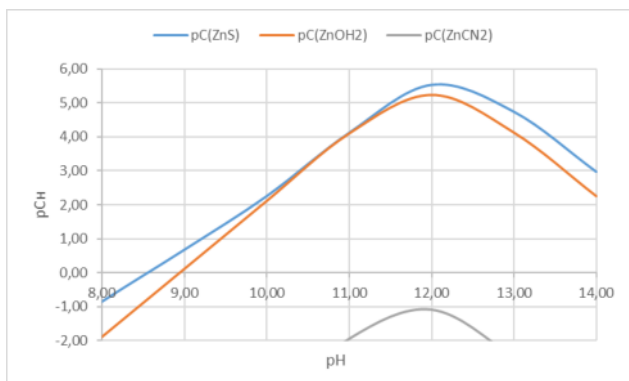


Рис. 1 Граничные условия образования твердых фаз ZnS, $Zn(OH)_2$ и $ZnCN_2$ в системе $Zn(NO_3)_2 - NH_4OH - Na_3C_6H_8O_7 - N_2H_4CS$ при 298 К.

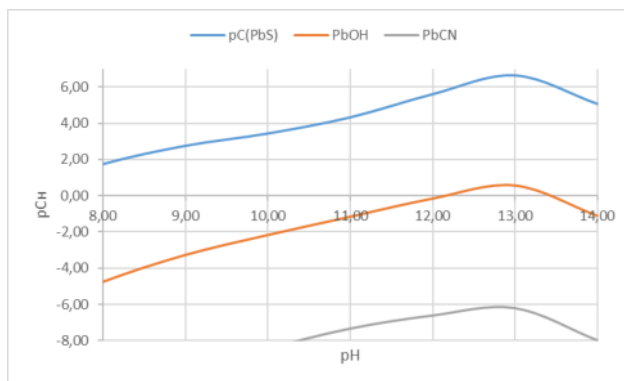


Рис. 2 Граничные условия образования твердых фаз PbS, $Pb(OH)_2$ и $PbCN_2$ в системе $Pb(CH_3COO)_2 - NH_4OH - Na_3C_6H_8O_7 - N_2H_4CS$ при 298 К.

Теоацетамид

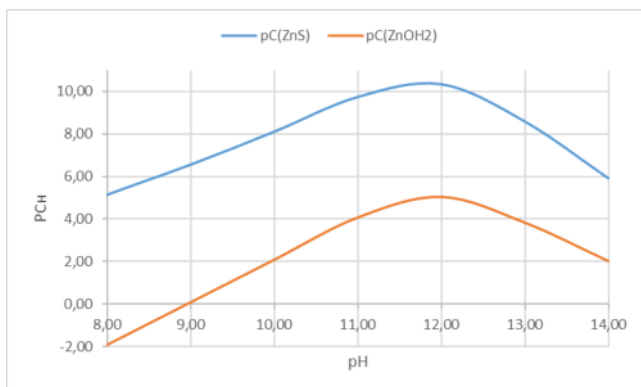


Рис. 3. Граничные условия образования твердых фаз ZnS, Zn(OH)₂ в системе Zn(NO₃)₂ – NH₄OH– Na₃C₆H₈O₇– CH₃CSNH₂ при 298 К

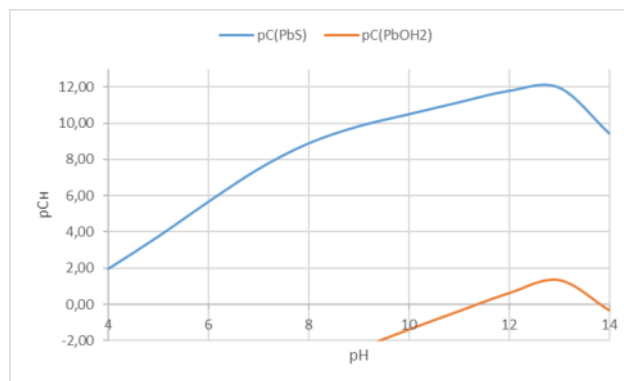


Рис. 4. Граничные условия образования твердых фаз PbS (1), Pb(OH)₂ в системе Pb(CH₃COO)₂– NH₄OH– Na₃C₆H₈O₇– CH₃CSNH₂ при 298 К.

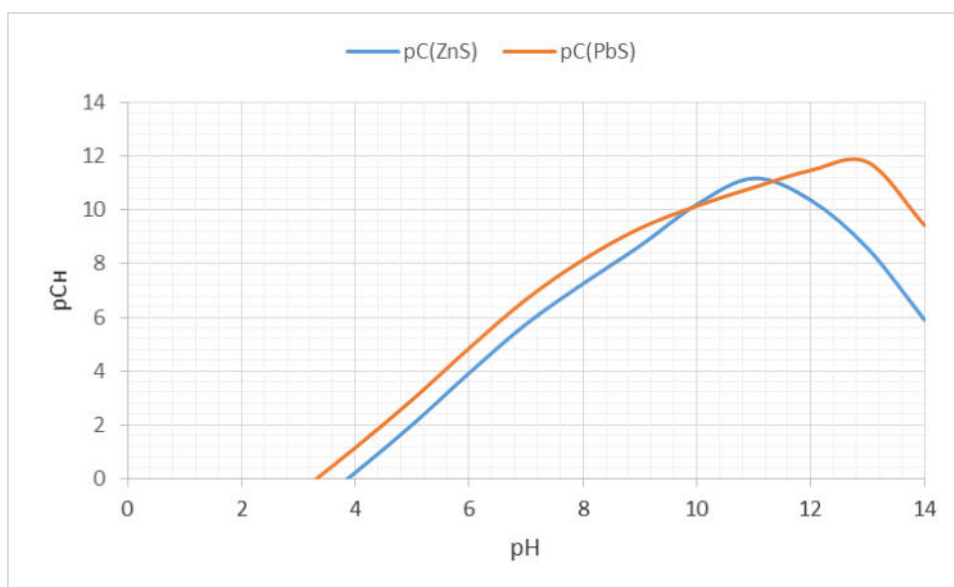


Рис. 5. Граничные условия совместного образования твердых фаз ZnS, PbS, при использовании теоацетамида. Расчет выполнен для реакционной смеси, содержащей [Zn(NO₃)₂]=0.04 моль/л, [Pb(CH₃COO)₂]=0.04 моль/л, [CH₃CSNH₂] = 0.8 моль/л, [Na₃C₆H₈O₇]= 1 моль/л, [NH₄OH] = 0.01 моль/л.

На рисунках 1,2 показаны рассчитанные граничные условия для образования ZnS и PbS с использованием тиомочевины (1). Если рассматривать область pH от 8 до 12 (рис.1), то видно, что сульфид и гидроксид цинка осаждаются одновременно, и в результате осаждается твердый раствор, состоящий из ZnS и Zn(OH)₂, что является недопустимым. Для случая осаждения сульфида свинца в области pH от 8 до 12 гидроксиды и цианамиды свинца не будут препятствовать образованию сульфида свинца.

На рисунках 3,4 показаны рассчитанные граничные условия для образования ZnS и PbS с использованием теоацетамида (2). Использование теоацетамид в роли халькогенизатора позволяет осаждасть чистые твердые растворы как сульфида цинка, так и

сульфида свинца, а также твердые растворы состава $Zn_xPb_{1-x}S$. На рис. 5 показаны граничные условия совместного осаждения сульфида цинка и свинца и область образования твердого раствора состава Zn_xPb_{1-x} с использованием тиацетамида, где наиболее оптимальное осаждение возможно при pH от 10 до 11.

В результате данной работы было показано, на примере сульфидов цинка (ZnS) и свинца (PbS), что гидрохимический метод синтеза твердых растворов сульфидов металлов возможен. При этом теоретическая оценка граничных условий образования сульфидов позволяет на стадии планирования выбирать наиболее оптимальные халькогенизаторы, которые позволяют осаждать сульфиды различных металлов в ходе одного эксперимента. Также остается немаловажным тот факт, что возможно контролировать содержание ненужных соединений таких как гидроксиды и цианамиды в ходе теоретических расчетов, а в дальнейшем использовать полученные результаты для проведения эксперимента. Работа выполнена по плану НИР №121030100002-0.

Список литературы

1. Андриевский Р. А. Основы наноструктурного материаловедения: Возможности и проблемы М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 252 С.
2. Антоненко С. В. Технология тонких пленок: учеб. Пособие М.: МИФИ, 2008. 104 с.
3. Popescu V., Naşcu H. I., Darvasi E. Optical properties of PbS – CdS multilayers and mixed (CdS + PbS) thin films deposited on glass substrate by spray pyrolysis // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. V. 8. 2006. P. 1187–1193.

ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАХ-ФАЗ В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Аверкиев И. К., Еремина М.А., Бакиева О.Р.

E-mail: averkiev1997@mail.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск

Вопрос исследования двумерных систем стал особенно актуальным с появлением первых работ по синтезу графена и позднее MXenes ($Mn+1XnTx$, где M - переходный металл, X - C и/или N, Tx - функциональная группа краевых и поверхностных атомов -OH, =O, -F) [1]. Впервые о MXenes начали говорить в 2011 году, эти материалы привлекли к себе внимание благодаря уникальным свойствам сочетать в себе металлическую

проводимость карбидов переходных металлов и гидрофильную природу их поверхностей с гидроксильными или кислородными концевыми группами [2, 3]. На данный момент известно огромное количество полученных MXenes различных составов [4] которые получены из различных MAX- фаз (где А - элемент А-группы, в основном IIIA и IVA группы) и количество их растет с каждым годом.

На сегодняшний день используют различные методы синтеза MAX-фаз, включая химическое осаждение из газовой фазы, горячее изостатическое прессование, самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), электрохимические реакции в солевом расплаве, механоактивация, замещение элементов в расплаве, искровое плазменное спекание (ИПС) и прочие методы синтеза. При этом в основе каждого синтеза лежит использование высоких температур или последующая термическая обработка образцов, в результате которых происходит существенное изменение физико-химических параметров MAX- фаз. Подробное исследование эволюции физико-химических параметров MAX- фаз в результате термического воздействия предоставит возможность прогнозировать и получать MXenes с заданными параметрами и свойствами.

В связи с этим, целью данной работы было исследование изменение физико-химических параметров MAX- фазы Ti_2AlC в результате термического воздействия, которое приводит к слоистой системе.

Объектом исследования являлись порошки состава Ti_2AlC , с размерами частиц от 1 до 10 мкм до и после термической обработки в атмосфере аргона при 1000 °С в течении 1 часа. Порошки были изготовлены методом механоактивации в шаровой мельнице с использованием прекурсоров в виде порошков титана, алюминия и углерода.

Исследование изменений химической связи и элементного состава проведено методами рентгено-фотоэлектронной спектроскопии и энергодисперсионной спектроскопии. Методом рентгеноструктурного анализа проведено исследование изменения структуры образцов в результате термического воздействия. Методом сканирующей электронной микроскопии исследованы изменения морфологии образцов. Исследования изменений в электронной структуре MAX- фазы Ti_2AlC в результате термического воздействия были проведены методом анализа спектров энергетических потерь электронов.

Работа выполнена по плану НИР №121030100002-0.

Список литературы

1. Naguib, M., Kurtoglu, M., Presser, V. et.al. Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti_3AlC_2 . // *Advanced Materials*. 2011. V. 23 № 37. P. 4248–4253.

2. Lukatskaya, M. R. et al. Cation intercalation and high volumetric capacitance of two-dimensional titanium carbide. // Science. 2013. V. 341. P. 1502–1505
3. Naguib, M., Mochalin, V. N., Barsoum, M. W., Gogotsi, Y. 25th Anniversary Article: MXenes: A New Family of Two-Dimensional Materials. // Advanced Materials. 2014. V. 26. № 7. P. 992–1005.
4. Sokol, M., Natu, V., Kota, S., Barsoum, M. W. On the Chemical Diversity of the MAX Phases. Trends in Chemistry. 2019. V. 1. Is. 2. P. 210-223

ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В БИНАРНОМ СПЛАВЕ С ПОМОЩЬЮ ОГРАНИЧЕННОЙ МАШИНЫ БОЛЬЦМАНА

¹Широбокова К.А., ²Гильмутдинов В.Ф., ²Тимургазин М.А.

Email: Kris290100@yandex.ru

¹ФГБОУ ВО УдГУ, г. Ижевск, Россия

²ФГБУН УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск, Россия

В последнее время растет популярность искусственных нейронных сетей (НС) как инструмента научных исследований, связанных с классификацией, идентификацией, оптимизацией и прогнозированием. Самым важным свойством НС является их способность обучаться на основе данных окружающей среды и в результате обучения повышать свою производительность. Одним из популярных видов НС является машина Больцмана [1], которая является стохастическим вариантом сети Хопфилда. Возможности обучения машины Больцмана могут быть ограничены на практике, но эту проблему можно решить при помощи ограниченной машины Больцмана (ОМБ), в архитектуре которой связи существуют только между скрытыми и видимыми нейронами, но при этом отсутствуют между нейронами одного класса. Архитектура ОМБ позволяет применить при обучении сети метод градиентного спуска с контрастивной дивергенцией (КД), алгоритм которой использует семплирование по Гиббсу.

Недавно НС были использованы для определения фаз с традиционными и нетрадиционными параметрами порядка [2], а также определения точек фазовых переходов с высокой точностью [3]. В связи с этим актуальным является вопрос о том, можно ли применить НС для других сложных проблем, таких, как, например, воспроизведение статистико-механических распределений классических гамильтонианов в обучении без учителя.

Цель данной работы заключалась в исследовании возможности описания ближнего порядка с помощью ОМБ. В бинарном сплаве (состоящем из атомов двух типов: А и В) атому данного сорта может быть энергетически выгодно находиться в окружении атомов другого, так в системе возникает ближний порядок за счет короткодействующих сил взаимодействия между атомами. Для описания межатомных взаимодействий в бинарном сплаве можно использовать аппарат модели Изинга [4].

В нашем исследовании были проведены расчеты параметра ближнего порядка Уоррена-Каули, средней энергии, теплоемкости и вероятности обнаружения атома В вблизи атома А. С помощью метода Монте-Карло (МК) были рассчитаны 10^5 конфигураций решеток из 10×10 атомов, которые можно использовать для обучения ОМБ. Параметры обучения были выбраны в соответствии с рекомендациями из литературы [5], а размер скрытого слоя составлял $n_h=100$ нейронов. ОМБ с этими параметрами была обучена для каждой концентрации в диапазоне от 0 до 1 с шагом 0,05. Обученные ОМБ можно использовать для генерации нового набора данных с помощью процедуры семплирования Гиббса. При этом возникает проблема сохранения заданной концентрации сплава, для решения которой мы разработали оригинальный алгоритм, позволяющий зафиксировать выбранную концентрацию на каждом шаге семплирования.

На рисунке 1 представлена зависимость параметра Уоррена-Каули от концентрации компонента В в сплаве АВ, рассчитанная с помощью метода МК и в процессе обучения ОМБ. Для каждой из концентраций значения, полученные с помощью ОМБ, в точности совпадают со значениями, рассчитанными методом МК. Это значит, что ОМБ эффективно распознает особенности конфигураций атомов при различных концентрациях и может быть в дальнейшем использована для идентификации фаз в реальных сплавах. Помимо ближнего порядка ОМБ так же успешно воспроизводит термодинамические параметры, такие как средняя энергия и теплоемкость.

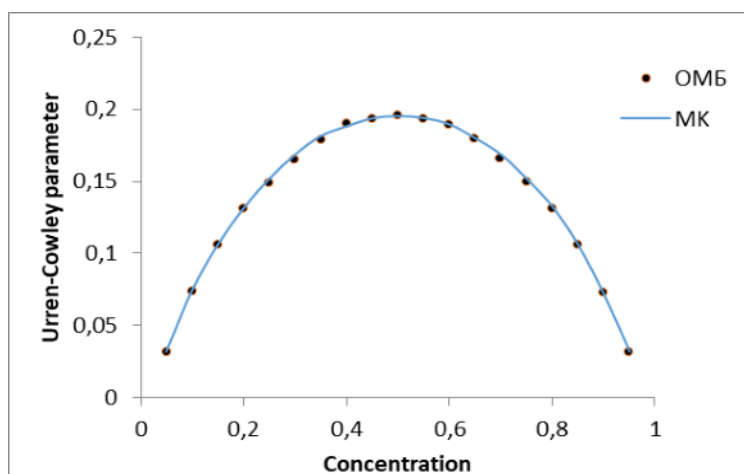


Рис. 1. Зависимость параметра Уоррена-Каули от концентрации компонента В в сплаве АВ

Таким образом, полученный с помощью метода МК набор данных был использован нами для обучения нейронной сети – ограниченной машины Больцмана – при различных концентрациях примесного компонента бинарного сплава. Результаты исследования показали, что нейронная сеть в точности воспроизводит параметры ближнего порядка и другие характеристики бинарного сплава.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 121030100005-1).

Список литературы

1. Ackley, D.H. A Learning Algorithm for Boltzmann Machines / D.H. Ackley, Hinton G. E., Sejnowski T.J.// Cognitive Science. – 1985. Vol. 9. – С. 147 – 169.
2. Carrasquilla, J. Machine learning phases of matter / J.Carrasquilla, R. Melko // Nature Phys. – 2017. – Vol. 13. – С.431 – 434.
3. Wang, L. Discovering Phase Transitions with Unsupervised Learning// Physical Review. – 2016. – Vol. 94. – P. 195105.; Broecker, P. Machine learning quantum phases of matter beyond the fermion sign problem /P. Broecker, J. Carrasquilla, R. Melko, S. Trebst // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7. – P.8823.
4. Займан Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем: Пер. с англ. М.: Мир, 1982.
5. Hinton, G.E. A practical guide to training restricted Boltzmann machines, in Neural Networks: Tricks of the Trade: Second Edition / G.E. Hinton, G. Montavon, G.B. Orr, K.R. Muller // Springer Berlin Heidelberg. – 2012. – С. 599 – 619.

ПРОВЕДЕНИЕ СРАВНИТЕЛЬНОЙ ОЦЕНКИ ПОВЕРХНОСТИ ДЕНТАЛЬНЫХ ИМПЛАНТАТОВ РАЗНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ

¹Разбицкая Л.Е., ¹Гостева Е.К., ²Дымников А.Б.

E-mail: m2108812@edu.misis.ru

¹НИТУ МИСиС, Москва

²Кафедра челюстно-лицевой хирургии РУДН, Москва

С самого начала истории дентальной имплантации оптимальным имплантологическим материалом является титан. Титан имеет ряд преимуществ, таких как: высокая биосовместимость; биоинертность; хорошая коррозионная стойкость,

благодаря образованию на поверхности пассивирующего оксидного слоя; немагнитность; низкая теплопроводность; малый коэффициент линейного расширения; практически отсутствие токсичности; относительно меньший по сравнению со сталью удельный вес. Титан отличается также постоянством физико-химических свойств в широком интервале температур.

Ввиду процесса остеоинтеграции, титановые имплантаты способны выдерживать жевательную нагрузку. Данная работа посвящена сравнению методов обработки поверхности титановых сплавов и исследованию их взаимодействия с мезенхимальными стволовыми клетками. Микрорельеф поверхности может влиять на дифференцировку МСК, что в свою очередь придает ей остеогенный потенциал.

Для достижения хорошей остеоинтеграции необходимо рекрутирование остеогенных клеток, таких как остеобласты и МСК. Адгезия клеток является первой стадией взаимодействия между клетками и имплантатами после имплантации биоматериала, которая состоит из четырех этапов: адсорбция белка, контакт клетки с материалом, прикрепление и распластывание [1-2]. Было доказано, что качество адгезии имеет решающее значение для модуляции способности клетки пролиферировать и дифференцироваться [3]. Также было показано, что дифференцировка МСК может зависеть от поверхности титана.

В настоящей работе представлены сравнительные результаты наноструктуризации поверхности дентальных имплантатов на основе сплавов титана Grade 1 - Grade 4 химическим травлением и анодированием. [4] Химическое травление поверхности образцов производилось в растворах различного ингредиентного состава и различных температурных режимах. Существенно расширяются возможности по модификации поверхности использованием разнообразных режимов анодирования поверхности образца. Впервые предложено также модифицировать поверхностные свойства титановых имплантатов формированием на их поверхности наноструктурных графеноподобных слоев. Синтез графено-подобных покрытий осуществлялся CVD методом (Chemical vapor deposition - Химическое осаждение из газовой фазы).

На поверхности всех образцов в идентичных условиях выращивались МСК, полученные из жировой ткани [5]. После трехдневной культивации на титановых поверхностях производился подсчет МСК. Также проводилась прижизненная съемка образцов для подтверждения клеточной миграции и деления. Результаты эксперимента позволили определить оптимальные режимы химической и электрохимической модификации поверхности титана, а также предпочтительные режимы синтеза графеновых слоев на поверхности титана для более благоприятного роста МСК.

**Химический состав титановых сплавов, используемых в медицине
по ISO 58321 II и ASTM F 67 – 89.**

Элемент	Grade 1 (%)	Grade 2 (%)	Grade 3 (%)	Grade 4 (%)
Азот	0,03	0,03	0,05	(0,05)
Углерод	0,1	0,1	0,1	0,1
Водород	0,015	0,015	0,015	0,015
Железо	0,2	0,3	0,3	0,5
Кислород	0,18	0,25	0,35	0,5 (0,4)**
Алюминий	нет	нет	нет	нет
Титан	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное

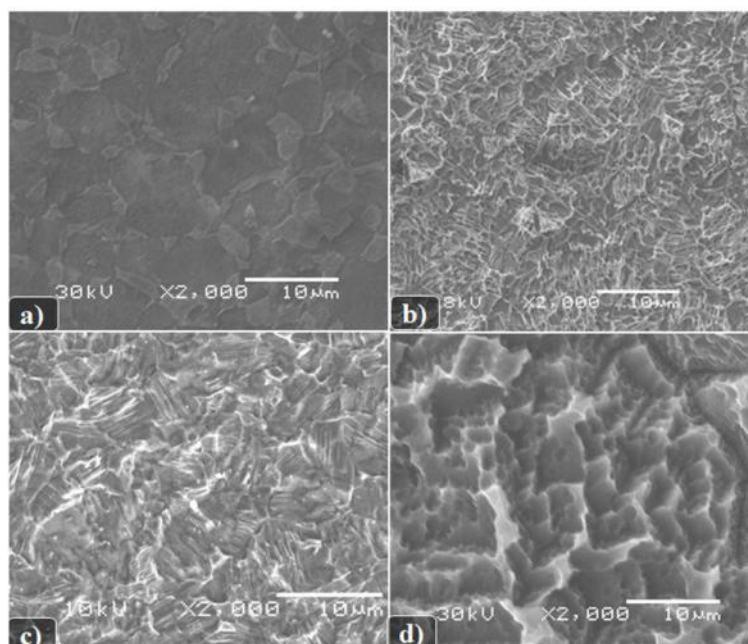


Рис. 1. СЭМ изображение поверхности исследуемых образцов титановых дисков после : а) химическое травления в растворе DMF+HF (1:10), t = 1 min, T=20 С материал Grade 4; б) Кипячение в растворах HCl:H₂SO₄ (1:1), t = 9 min, T=110 С материал Grade 4; в) Химическое травление в растворе DMF+HF (1:10), t = 1 min, T=20 С материал Grade 1; д) Кипячение в растворах HCl:H₂SO₄ (1:1), t = 9 min, T=110 С материал Grade 1.

Список литературы

1. Fabio Cofano, Giuseppe Di Perna, Matteo Monticelli, Nicola Marengo, Marco Ajello, Marco Mammi, Giovanni Vercelli, Salvatore Petrone, Fulvio Tartara, Francesco Zenga, Michele Lanotte, Diego Garbossa, Carbon fiber reinforced vs titanium implants for fixation in spinal metastases: A comparative clinical study about safety and effectiveness of the new "carbon-strategy", Journal of Clinical Neuroscience, Volume 75, 2020, Pages 106-111 (<https://doi.org/10.1016/j.jocn.2020.03.013>)
2. Rapid Osseointegration of Titanium Implant with Innovative Nanoporous Surface Modification: Animal Model and Clinical Trial Huang M.-S., Chen L.-K., Ou K.-L., Cheng H.-Y., Wang C.-S.(2015) Implant Dentistry, 24 (4) , pp. 441-447.(10.1097/ID.0000000000000258),
3. Wang X, Shah FA, Vazirisani F, Johansson A, Palmquist A, Omar O, Ekström K, Thomsen P. Exosomes influence the behavior of human mesenchymal stem cells on titanium surfaces. // Biomaterials. 2020 Feb;230:119571. doi: 10.1016/j.biomaterials.2019.119571. Epub 2019 Oct 24.
4. Starkov, V.V., Sedlovets, D.M. & Gosteva, E.A. Synthesis of graphene-like passivating carbon layer into nanostructured porous silicon. Appl. Phys. A 125, 376 (2019). (<https://doi.org/10.1007/s00339-019-2648-z>)
5. V. Starkov, E. Gosteva and Y. Vladislav, "Surface Nanostructuring of Dental Prosthesis Based on Titanium," 2019 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO), Zhenjiang, China, 2019, pp. 134-137, doi: 10.1109/3M-NANO46308.2019.8947380.

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ И ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЕГИРОВАННЫХ ТИТАНОВЫХ СЛОЕВ, СФОРМИРОВАННЫХ ВНЕВАКУУМНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ НАПЛАВКОЙ, ПОСЛЕ КОРРОЗИОННЫХ ИСПЫТАНИЙ

^{1,2,*} Исаев Д. Д., ³Кривенцов В. В., ⁴Голковский М. Г.

**isaev@solid.nsc.ru*

¹Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

²Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,

³ФИЦ Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН,

⁴Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Проблема коррозионной стойкости конструкционных сплавов, применяемых в химической и атомной промышленности, является крайне актуальной для развития

технологической и оборонной способности России. Широко применяемые в промышленности стойкие легированные стали в некоторых случаях уступают по свойствам сплавам на основе титана, в частности, в кипящих растворах окисляющих кислот. Такие агрессивные условия являются необходимыми для реализации процессов экстракции при переработке отработавшего ядерного топлива АЭС по PUREX-технологии. Исследования коррозионных процессов и создание наиболее точных моделей для их описания позволят выработать рекомендации для промышленности сплавов специального назначения. Данная работа посвящена исследованию поверхности легированных танталом, цирконием и молибденом слоев титана после обработки в кипящем растворе концентрированной азотной кислоты.

Поверхностное легирование титана (на основах сплава ВТ1-0) проводилось по технологии электронно-лучевой наплавки в воздушной атмосфере, за один и два прохода пучка над слоями порошковых насыпок. Электронный пучок генерировался промышленным ускорителем электронов ЭЛВ-6М (ИЯФ СО РАН). Для формирования насыпок использовались порошки титана (99,7 %), тантала (99,9 %), циркония (99,8 %), молибдена (99,9 %) [1]. Для уменьшения влияния кислорода воздуха в процессе наплавки в составы насыпок добавлялись флюсы из смеси CaF_2 (ч.) и LiF (ч.д.а.). Режимы и концентрации в насыпках для наплавки использовались на основе результатов диссертационной работы [2]. После наплавления образцы слоев вырезались в виде пластинок и механически подготавливались. Полученные образцы легированных слоев подвергались выдержке в кипящей концентрированной азотной кислоте в течение 10 ч и 48 ч.

Для проведения исследований легированных слоев сплавов (до и после воздействия кислоты) методом EXAFS-спектроскопии в работе использовалось синхротронное излучение, полученное на оборудовании ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" (ИЯФ СО РАН), поддержанное проектом RFMEFI62119X0022 [3], а также спектрометр фирмы SPECS (ФИЦ ИК СО РАН) с использованием излучения AlK^* ($h^* = 1486,6$ эВ; 150 Вт). Дифракционные эксперименты выполнены на оборудовании Bruker D8 Advance, а сканирующая электронная микроскопия и энергодисперсионный анализ на приборе Hitachi TM1000 (ИХТТМ СО РАН).

Методами EXAFS, рентгеновской дифракции, РФЭС, СЭМ выполнено комплексное исследование образцов сплавов. Получена достоверная информация о структурных параметрах, новые спектральные и морфологические данные. Результаты исследований подробно будут представлены в докладе.

Авторы выражают глубокую признательность к.х.н. с.н.с. ФИЦ ИК СО РАН И. П. Просвирину, к.ф.-м.н. с.н.с. ИХТТМ СО РАН Н. В. Булиной, к.т.н. В. В. Самойленко, аспиранту НГТУ Д. С. Волкову.

Работа выполнена в рамках госзадания ИЯФ СО РАН (№ 0305–2016-0010) и программы приоритетных направлений исследований СО РАН (V.45.2.6).

Список литературы

1. Golkovski M. G. et al. // Materials Science and Engineering. 2013. Vol. 578. P. 310-317.
2. Самойленко В. В. Дисс. ... канд. техн. наук. Новосибирск: НГТУ, 2018. 235 с.
3. Piminov P. A. et al. // Physics Procedia. 2016. Vol. 84. P. 19-26.

ПОРИСТЫЕ СПЕЧЁННЫЕ ТЕЛА И ИХ ХАРАКТЕРИСТИКИ

¹Барышев О.Б., ²Гончаров О.Ю., ²Елькин И.А., ²Валеев Р.Г., ²Чулкина А.А.

¹АО «Элеконд», г.Сарапул e-mail:elecond.43@elcudm.ru,

²ФГБУН УдмФИЦ УРО РАН, г. Ижевск e-mail:nir@udman.ru,

Создание деталей обладающих определённой пористостью и механической прочностью является одной из задач порошковой металлургии. Решение этой задачи важно при получении пористых тел для танталовых конденсаторов (рис.1). Спечённые пористые тела характеризуются пористостью и удельной поверхностью, которые позволяют спрогнозировать характеристики конечного изделия. В настоящем исследовании проведен анализ возможностей применения механического теста вместо тестирования методом электрохимического окисления для анализа пористости танталовых конденсаторов.

Для оценки пористости спеченных танталовых тел в настоящее время в производстве используется: объёмно-весовой метод и метод электрохимического окисления поверхности.

Объёмно-весовой метод прост в применении, но не позволяет оценить доли открытой и закрытой пористости и характеризовать размер пор.

Метод электрохимического окисления позволяет оценить рабочую поверхность по замеру электрической ёмкости после электрохимического формирования диэлектрика на поверхности пористого тела. Из-за возможного закрытия пор формируемым диэлектриком мелкие поры не оцениваются.

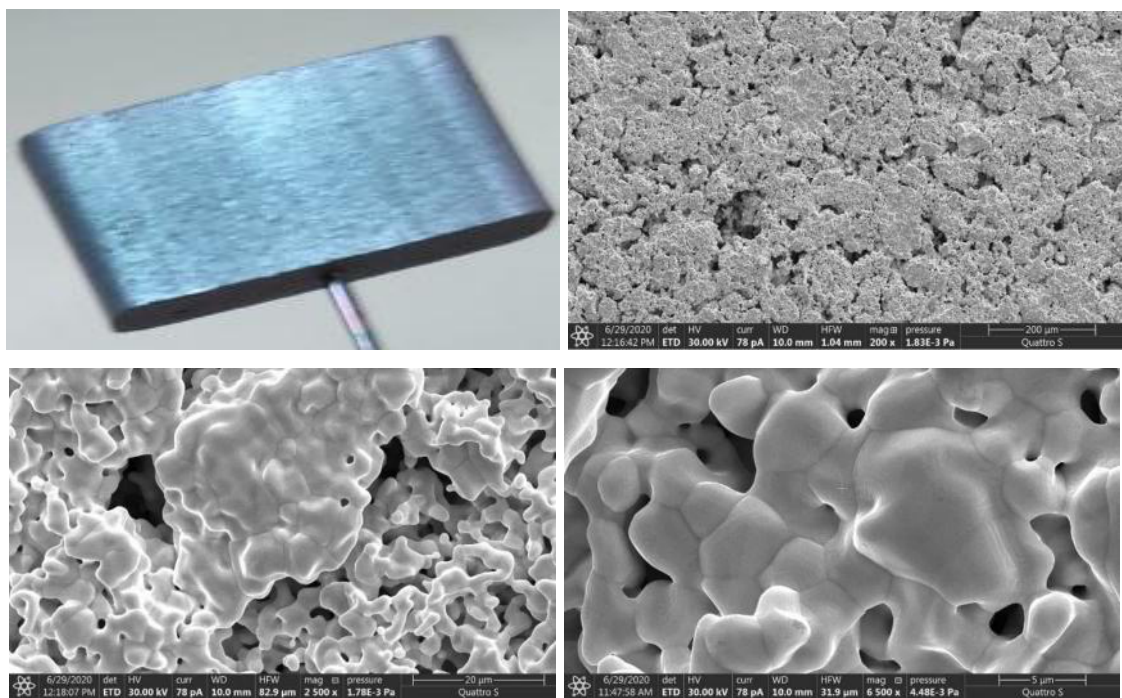


Рис. 1. Спеченные пористые танталовые порошки (при разном увеличении).

Другие методы не нашли применения на производстве конденсаторов.

Метод гидростатического взвешивания позволяет определять открытую пористость за счет заполнения пор жидкостью. Однако из-за того, что не все поры пропитываются жидкостью для танталовых пористых тел в производстве не используются.

Газо-адсорбционный метод позволяет оценить открытую пористость, проводится на АО «Электонд» на пикнометре ULTRAPYC 1200e. На производстве не используется, так как на малогабаритных изделиях (до 50мм²) сложно получить повторяемости измерений.

Метод анализа изображений позволяет оценить количество и размер пор анализируя изображение определенной площади и аппроксимируя данные на весь объем тела. Не используется в производстве из-за сложности оборудования (требуется электронный микроскоп) и программного обеспечения для расчета.

Механический метод оценка пористости проводится на основании функциональной зависимости модуля пластической и упругой деформации от пористости. Метод позволяет оценить не только пористость, но механические свойства, но до настоящего времени не использовался.

Для анализа зависимости пористости от механических свойств нами использовались пористые тела из танталового порошка 50kCV. Спекание проводилось в вакуумной печи с резистивным нагревом СВ-2К. Вакуум при температуре спекания $3 \cdot 10^{-5}$ мм.рт.ст. время выдержки при температуре (табл.1) 30мин. Доля пористости оценивалась относительно компактного тантала, плотность которого 16,662г/см³. Количество образцов для механического теста и теста электрохимическим окислением с последующим замером

емкости было 3 штуки для каждой температуры. В таблице указаны средние значения, погрешность которых не превышает 0,1%.

Таблица 1

Плотность (пористость), удельная электрическая ёмкости и механические характеристики спеченных изделий.

Образец	Плотность после спекания (объемно - весовой метод), г/см ³	Пористость, %	Удельный заряд (метод электрохимич. окисления) мкКл/г	Предел текучести, кгс/мм ²	Предел прочности, кгс/мм ²	Температура спекания образцов, °С
1	5,9	64,6	52000	8,2	11,1	1350
2	6,4	61,6	44600	9,6	6,5	1400
3	6,9	58,6	37900	11,7	20,4	1450

Полученные данные (табл.1) позволили оценить зависимость между пористостью и другими измеренными параметрами. Механический тест достаточно прост и его применение для оценки пористости позволит сократить затраты в производстве.

Работа проведена с использованием оборудования и материалов АО «Элеконд» и Центра коллективного пользования УдмФИЦ УрО РАН.

АНАЛИЗ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ КОНСОЛИДАЦИЕЙ ПОРОШКА Ta, ПО МИКРОСКОПИЧЕСКИМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ

¹Белослудцева А.А., ²Елькин И.А., ²Столбов К.С., ³Барышев О.Б., ²Аверкиев И.К.

E-mail: belosludtseva2000@mail.ru

¹ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», Ижевск

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск

3. АО «Элеконд», Сарапул

В работе исследовалась пористая структура материалов, полученных из порошка тантала методом электроимпульсного спекания (приложение до 15 импульсов тока напряжением до 50 В, инертная среда Ar). Данные материалы используются в качестве

электролитических металлооксидных конденсаторов, обладающих высокой ёмкостью при малых габаритных размерах и массе, т.к. диэлектриком в них является тонкая оксидная плёнка с высоким показателем диэлектрической проницаемости. Использование метода ЭИС обусловлено тем, что он в отличие от традиционного спекания не требует применения органического пластификатора при консолидации, который может загрязнять обрабатываемый материал и ухудшать свойства диэлектрика.

Для исследования параметров пористой структуры материалов была выбрана методика, основанная на анализе поверхности по данным СЭМ (микроскопы TESCAN VEGA3 и Thermo Fisher Quattro S) с помощью программы Image J. Были получены и проанализированы электронно-микроскопические изображения для образцов исходного порошка, анода, полученного высокотемпературным спеканием и образцов, полученных электроимпульсным спеканием (рис. 1). С помощью программы была определена площадь, диаметр и количество пор на определенном участке, а также распределение пор по размерам (рис. 2).

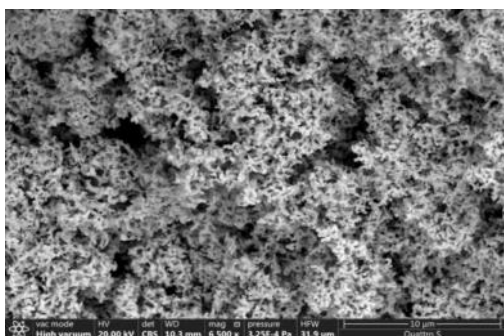


Рис. 1. Изображение анода диаметром 2 мм полученного ЭИС в результате приложения 15 импульсов тока из агломерированного порошка

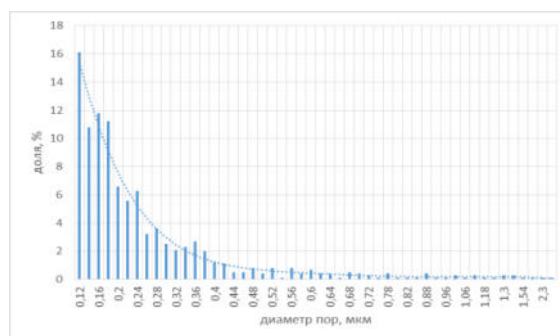


Рис. 2. Диаграмма распределения пор по диаметрам анода, полученного ЭИС в результате приложения 15 импульсов из агломерированного порошка

В работе было показано, что распределения пор образцов, полученных из осколочных и агломерированных порошков (ТаК-2,5 и ТаК-80) спеканием в вакуумной печи при температуре до 1300°C существенно отличаются из-за особенностей морфологии частиц. Данная морфология определяет параметры пористой структуры. При консолидации агломерированного порошка ТаК-80 методом спекания в высокотемпературной печи доля мелких пор практически не изменяется. Распределения пор образцов, полученных ЭИС с различными режимами практически не отличаются, а выбранные режимы ЭИС не существенно влияют на изменение пористой структуры. При консолидации методом ЭИС порошка доля мелких пор уменьшается, по сравнению с

исходным порошком. При термообработке ЭИС образцов доля мелких пор дополнительно снижается.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания Минобрнауки РФ (проект №ББ_2021_121030100003-7). При выполнении работы использовалось оборудование ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

ВЫСОКОТОЧНЫЕ СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНО ВЫРАЩЕННЫХ НАНОСЛОЕВ ОЛОВА НА КРЕМНИИ

¹Бойков Н.И., ¹Чуваenkova О.А., ²Тонких А.А., ¹Паринова Е.В., ¹Коюда Д.А., ¹Манякин М.Д.,
¹Курганский С.И., ³Макарова А., ³Смирнов Д., ³Овсянников Р., ¹Турищев С.Ю.

E-mail: boykov-hfmm@bk.ru, тел.: 8 (473) 2406653

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² OSRAM, Германия

³ Helmholtz Zentrum Berlin, Берлин, Германия

Ограничивающим фактором создания и производства микросхем на основе кремния может считаться генерация тепла. Значительное снижение термической проводимости может быть достигнуто посредством формирования слоистой структуры. Например, периодические многослойные структуры Ge/Si могут приводить к значительному падению кремниевой тепловой проводимости. Большее падение в термической проводимости ожидается, если Ge заменить на Sn. Нарушения в движении фононов более заметны из-за более высокого соотношения масс Sn/Si. В то же время, исследования атомного и электронного строения, физико-химического состояния таких структур, являются крайне важными с точки зрения вопросов технологии их формирования и последующего применения. Целью данной работы было исследование атомного и электронного строения эпитаксиальных наноструктур на основе кремний-олово.

Исследованные образцы были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке Si(100) с буферным слоем Si толщиной 50 нм. Осаждались ~ 5 монослоев олова на предварительно очищенных и высушенных кремниевых подложках в

сверхвысоковакуумной камере. Для возможной модификации состава и структуры полученные образцы отжигались in-situ в сверхвысоком вакууме 10^{-9} Торр при 800 °С в течение 10 мин.

Исследования атомного и электронного строения проводились методами спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) чувствительной к локальному окружению атомов заданного сорта и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS - X-ray photoelectron spectroscopy), дающей информацию о зарядовом состоянии атомов изучаемого материала. Использовалось синхротронное излучение накопительного кольца BESSY II Гельмгольц Центра Берлин (Берлин, Германия).

Путем сопоставления с экспериментально измеренными спектрами эталонных фаз металлического олова, SnO_2 и SnO была проведена оценка особенностей электронного спектра и состава эпитаксиальных нанослоев олова до и после отжига. Далее, при помощи спектров XANES, рассчитанных из первых принципов с использованием программного пакета Wien2K для таких материалов, как Sn, SnO , а также орторомбический и тетрагональный SnO_2 была произведена полуколичественная оценка состава эпитаксиального нанослоя до и после отжига. Для этого использовался подход, основанный на методе линейной комбинации LCF (Linear Combination Fitting). Полученные результаты показали присутствие в исходной эпитаксиальной пленке всех трех оксидов, спектры которых использовались при моделировании. После отжига эпитаксиальная пленка представляла собой металлическое олово. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с данными метода XPS.

Показано, что рост нанослоя олова на поверхности буферного слоя кремния не приводит к заметному межатомному взаимодействию на их гетерогранице, в результате чего не происходит заметных искажений электронно-энергетического спектра. Сформированный нанослой имеет сложный композитный состав из оксидов олова с различной спецификой локального атомного окружения. Однако высокотемпературный сверхвысоковакуумный отжиг приводит к перестройке фазового состава поверхностных слоев такой структуры, что сопровождается перераспределением атомов кислорода от атомов олова вглубь структуры к кремнию. Это приводит к полному окислению поверхности буферного слоя монокристаллического кремния и восстановлению 5 монослоев исходного оксида олова до металлического состояния.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 21-53-12042 ННИО_а.

АЛГОРИТМ СЕЛЕКЦИИ ГИДРОАКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО ФАЗОМАНИПУЛИРОВАННОМУ КОДУ

Егорова Е.Э., Милич В.Н.

E-mail: katerina.kategorova@mail.ru, mili@udman.ru

УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

В работе рассматриваются вопросы создания системы подводного видения для беспилотного робота, используемого на подводных платформах и механизмах добычи полезных ископаемых. В докладе представляется перспективный алгоритм цифровой селекции гидроакустических сигналов от различных источников, использующих фазоманипулированный код.

Для проверки работы алгоритма осуществляется моделирование и визуализация сигналов, полученных от различных излучателей. Суммарный сигнал формируется путем наложения соответствующих сигналов от различных осветителей друг на друга с учетом задержки, обусловленной дальностью осветителя.

Первым этапом обработки сигналов, использующих фазоманипулированный код, является поиск точек смены фазы в суммарном сигнале. Шаг для поиска точек в суммарном сигнале необходимо взять настолько малым, чтобы не пропустить искомые точки. На втором этапе производится поиск корреляций суммарного сигнала с кодами разных прожекторов [1]. На заключительном этапе рассчитывается задержка сигнала Δt от каждого прожектора. Для этого рассчитываются оценки взаимной корреляции суммарного сигнала с сигналом кода прожектора, сдвигаемого относительно него с заданным шагом сдвига n . Временная задержка сигнала прожектора Δt_i , где i – номер прожектора, определяется максимумом оценки взаимной корреляции при одном из сдвигов кода прожектора. Исходя из времени задержки сигнала можно определить расстояние от приёмника до объекта. Кроме того, знание величины задержки сигнала для каждого прожектора позволяет выполнить селекцию их сигналов.

Список литературы

1. Карабанов И. В. Алгоритмы обработки гидроакустических сигналов: монография. М: изд-во Тихоокеан. Гос. ун-та, 2018. - 140 с.

ФОРМЫ ИМПУЛЬСОВ ФОТОТОКА В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ CuSe/Se ПРИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

¹Фатеев А. Е., ¹Козай В. Я., ¹Могилева Т. Н., ²Свирко Ю. П., ¹Мухеев Г. М.

E-mail: a.e.fateev@mail.ru

¹Институт механики УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

²Университет Восточной Финляндии, Йозенсуу

Одной из интересных особенностей взаимодействия лазерных импульсов с тонкими пленками на основе CuSe и Se является генерация импульсов фототока, чувствительных к поляризации и направлению волнового вектора падающего излучения [1-3]. Исследование механизмов генерации фототоков, обладающих такими свойствами, представляет интерес с точки зрения создания неоптических анализаторов поляризации света, сенсоров знака циркулярной поляризации, а также датчиков пространственной ориентации объектов в космическом пространстве.

В данном докладе представлены результаты экспериментальных исследований временной формы импульсов поперечного фототока, возникающих в тонкой пленке CuSe/Se при различных направлениях волнового вектора циркулярно поляризованного фемтосекундного лазерного излучения, падающего на пленку. В экспериментах использовались полупрозрачная тонкая пленка CuSe/t-Se толщиной около 140 нм, состоящая из нанокристаллитов селенида меди (CuSe) и тетрагонального селена (t-Se). Пленка была синтезирована методом вакуумно-термического напыления на стеклянной подложке [2]. Направление волнового вектора k падающего на пленку фемтосекундного лазерного излучения циркулярной поляризации на длине волны 795 нм с длительностью импульсов 120 фс варьировалось изменением угла падения α лазерного пучка на пленку (см. рис. 1 (а)). Регистрация импульсов поперечного фототока осуществлялась с помощью двух пленочных электродов, параллельных плоскости падения σ пучка лазера на исследуемую пленку, и быстродействующего цифрового осциллографа.

На рис. 1 (б - г) представлены нормированные на максимальные значения временные формы импульсов фототока, полученные при углах падения $\alpha = 10, 67, 82^\circ$. Видно, что импульсы фототоков при малом и большом значениях α имеют противоположные полярности. В диапазоне углов $52 < \alpha < 79^\circ$ происходит возбуждение биполярных импульсов фототока, временная форма которых существенно зависит от угла падения.

В докладе обсуждаются механизмы, приводящие к генерации биполярных импульсов фототока при циркулярно поляризованном возбуждении.

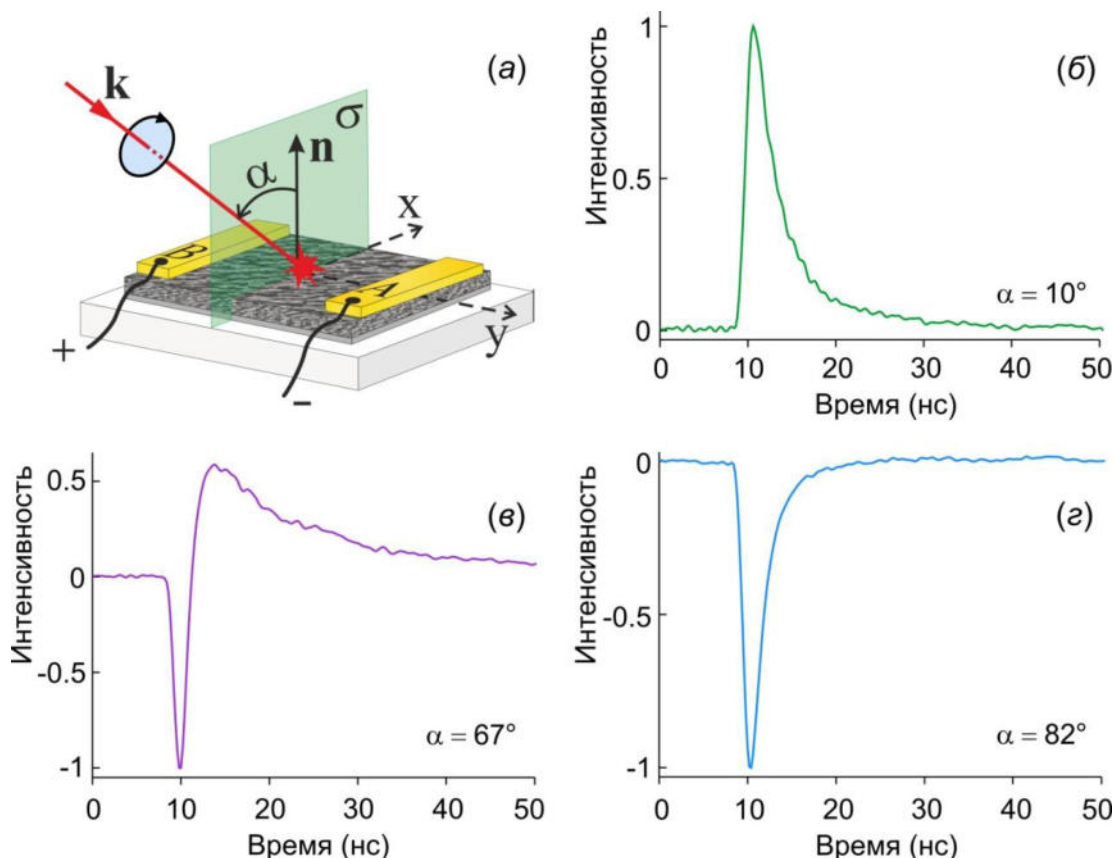


Рис. 1. Схема измерения поперечного фототока (а) и нормированные на максимальные значения временные формы импульсов фототока при углах падения $\alpha = 10$ (б), 67 (в) и 82° (г).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-02-00112), Министерства образования и науки РФ (номер гос. рег. АААА-А19-119021890083-0).

При выполнении исследований использовалось оборудование ЦКП УдмФИЦ УрО РАН.

Список литературы

1. Mikheev G. M., Kogai V. Y., Mogileva T. N., Mikheev K. G., Saushin A. S., and Svirko Y. P., Appl. Phys. Lett. 2019. V. 115. P. 061101.
2. Mikheev G. M., Kogai V. Y., Mikheev K. G., Mogileva T. N., Saushin A. S., and Svirko Y. P., Mater. Today Commun. 2019. V. 21. P. 100656.
3. Mikheev G. M., Fateev A. E., Kogai V. Y., Mogileva T. N., Vanyukov V. V., and Svirko Y.P., Appl. Phys. Lett. 2021. V. 118. P. 201105.

ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ ФАЗОВО-ПОЛЕВАЯ МОДЕЛЬ АЛЬФА-ГАММА ПРЕВРАЩЕНИЙ В ЖЕЛЕЗЕ ПРИ СИЛЬНО НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ

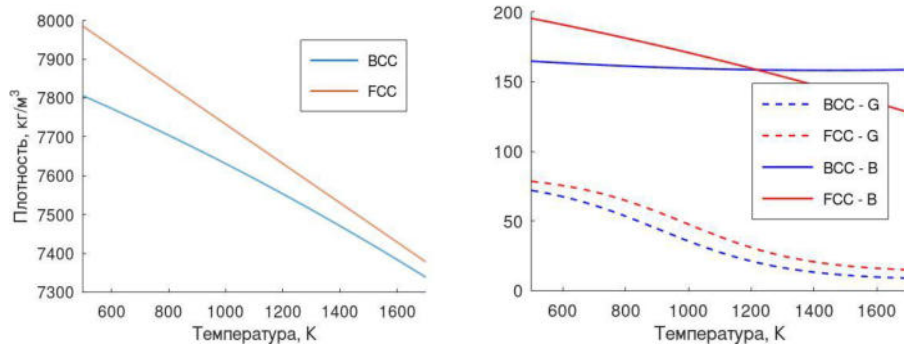
Копытов В.А. Лебедев В.Г.

E-mail: 9vitcop@gmail.com, lvg@udsu.ru

ФГБОУ УдГУ, Ижевск

Микроструктура является ключевым параметром, определяющим физические свойства материала. Одним из существенных факторов, влияющих на формирование микроструктуру, является внутреннее напряжение, возникающее по причине: 1) разницы плотности вещества в разных фазах, 2) ориентации кристаллической решётки. Обычно первый фактор считается существеннее второго. Для описания модель альфа-гамма превращений в железе при сильно неравновесных условиях использован метод фазового поля [1].

Целью работы является вывод уравнений, описывающих рост альфа-фазы (BCC) железа из гамма-фазы(FCC) при сильном переохлаждении и проверка их на задаче роста сферического зародыша в чистом железе. В модели учтено изменение плотностей фаз [2] и упругих констант [3] с температурой, представленные на графиках ниже:



Уравнения, описывающие процесс, получены в рамках расширенной необратимой термодинамики [4] и имеют вид:

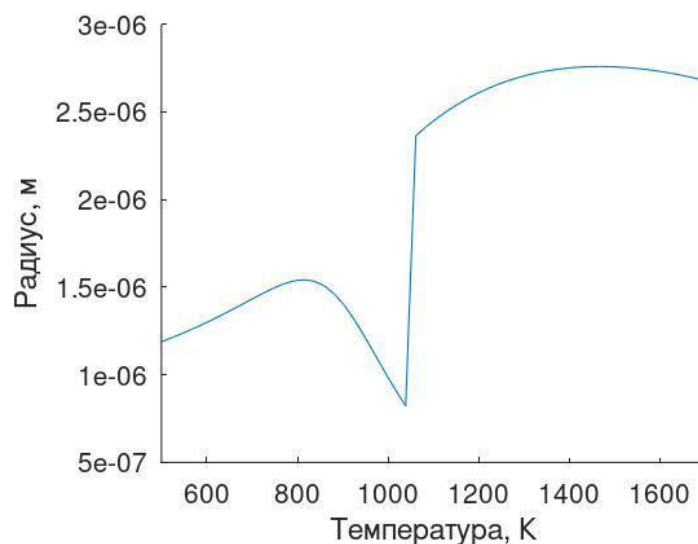
$$\tau \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = M[\sigma \nabla^2 \varphi - W g'(\varphi) - \Delta F p'(\varphi)], \text{ где}$$

$$\Delta F = \frac{1}{\mu}(\rho^\alpha F^\alpha - \rho^\gamma F^\gamma - \Delta \rho \sum_{i=\alpha, \gamma} \theta_i F_i), \text{ где } F_i = G_i - (\nabla u) B_i \omega_i$$

$$\dot{\mathbf{u}} = \text{grad}(\tilde{\mathbf{B}} \text{div}(\mathbf{u})) + 2G \nabla^2 \mathbf{u} + \text{grad} \frac{1}{\mu} \sum_j p_j \rho_j B_j \omega_j,$$

где φ – фаза, \mathbf{u} – вектор деформации, $p = \varphi^2(3 - 2\varphi)$, $g = \varphi^2(1 - \varphi)^2$, τ и σ – кинетические константы, ρ – плотность, M – мобильность, W – потенциальный барьер, $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \frac{2}{3}\mathbf{G}$, \mathbf{B} – модуль сжатия, G – модуль сдвига, ω – объемная доля фаз, θ – функция Хевисайда.

При численном интегрировании уравнений был получен график зависимости радиуса сферического зародыша железа в зависимости от температуры, что качественно соответствует ожидаемому поведению. Провал на графике радиус-температура соответствует температуре Кюри. Последнее объясняется учетом магнитного вклада в энергию Гиббса железа.



Полученная модель может являться основой для учета напряжений в процессах формирования внутренней структуры, в частности дендритов, в металлических растворах.

Список литературы

1. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, Wiley-VCH Weinheim, 2010.
2. J. Miettinen, METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS B, VOLUME 28B. 1997. 281 С.
3. D. Su, Y.-L. He, J.-Q. Liu, X.-G. Lu, Establishment of the Elastic Property Database of Fe-base Alloys, Int. Conf. on Information Sciences, Machinery, Materials and Energy (ICISMME 2015) DOI: 10.2991/icismme-15. 2015. 377 С.
4. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика, Изд-во «РХД» 2006. 528 С.

ОПИСАНИЕ КИНЕТИКИ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ФАЗ В БИНАРНОМ РАСПЛАВЕ Al-Y МЕТОДОМ ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Коробейников С. А.

E-mail: sa.korobeynikov@yandex.ru

УдГУ, Ижевск

Одним из актуальных направлений в сфере описания процессов фазовых переходов, является задача формирования и кинетики стехиометрических фаз (стехиометрий или компаундов). Ключевой особенностью стехиометрий от других видов фаз является фиксированная концентрация примеси. Энергия Гиббса компаундов имеет конкретное значение, в точке соответствующей концентрации, и не существует в остальных. Из-за этого, химический потенциал, который участвует в описании кинетики, не определен. Данный факт является одной из основных проблем описания систем с участием стехиометрий.

Стехиометрические фазы по-разному влияют на процессы, происходящие в физических системах. Так, в исследованиях релаксации вязкости бинарного расплава Al-Y [1] обнаружен аномальный эффект, а именно её долгое и немонотонное убывание. Данный эффект связывают с ростом и последующим растворением микроскопических кристаллов Al_3Y , которые своим присутствием влияют на вязкость расплава, а значит, и на процесс её релаксации. Вопрос математического описания кинетики стехиометрических фаз в бинарном расплаве Al-Y является основой поставленной задачи в исследовании.

Получаемая математическая модель основана на фазово-полевым подходе. Принимается, что значение фазового поля φ_α будет определять объёмную долю фазы α в точке пространства, так что сумма объёмных долей фаз все равно равна единице. Переходя к макроскопическим масштабам, пренебрежем границей раздела фаз.

Основным управляющим функционалом служит функционал энергии Гиббса, который имеет вид

$$G = \int \left(\sum_{\alpha} \varphi_{\alpha} G^{\alpha} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 (\nabla(x\varphi_L))^2 \right) dV,$$

где $\varphi_{\alpha} G^{\alpha}$ – равновесный вклад соответствующей фазы α , $(\nabla(x\varphi_L))^2$ – неравновесный вклад, допускающий наличие корреляций концентрации примеси в жидкой фазе [2], ε – корреляционный множитель, определяющий наличие корреляций. С учётом невозрастания энергии Гиббса, закона сохранения средней концентрации примеси в объёме, с использованием принципов неравновесной термодинамики [3], получена система

уравнений, описывающая кинетику роста и растворения стехиометрических фаз в расплаве.

Оценивая полученную систему в условиях термодинамического равновесия, найдено выражение для определения значения химического потенциала стехиометрической фазы.

Полученная система уравнений приведена к безразмерному виду, проведена качественная оценка влияния корреляционного слагаемого на кинетику скалярного поля объёмных долей фаз. На рис. 1 представлена зависимость скорости изменения одной из стехиометрических фаз от количества пройденных временных итераций.

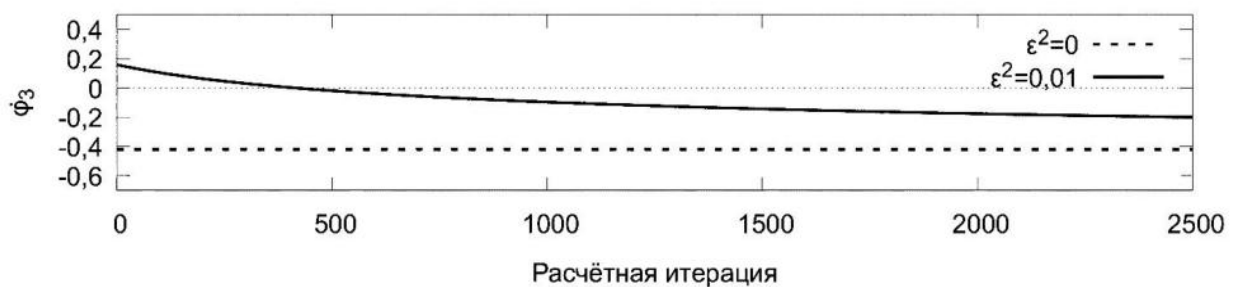


Рис. 1: Зависимость скорости изменения объёмной доли фазы Al_3Y от количества пройденных временных итераций при отсутствии ($\epsilon^2 = 0$) и наличии корреляций ($\epsilon^2 = 0,01$).

На рис. 1 видно, что при наличии корреляционного слагаемого наблюдается рост объёмной доли фазы (скорость изменения – положительная), а через некоторое время начинается растворение (скорость изменения переходит через ноль и становится отрицательной).

Список литературы

1. Lad'yanov V.I. Influence of temperature and time of isothermal holding on the viscosity and crystallization processes of Al-Y melts close to a eutectic structure / Lad'yanov V.I., Men'Shikova S.G., Bel'Tyukov A.L., Maslov B.B. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics – 2010. – Т. 74 – № 8 – С.1176–1178.
2. Cahn J.W. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy / Cahn J.W., Hilliard J.E. // The Journal of Chemical Physics – 1958. – Т. 28 – № 2 – С.258–267.
3. Де Гроот С. Неравновесная термодинамика / С. Де Гроот, П. Мазур / под ред. Д.Н. Зубарева. – Москва: Мир, 1964.

ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ЦЕОЛИТОВ ТИПА Cu-MOR

Курзина Т.И., Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Срабионян В.В.,
Дурыманов В.А., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.

E-mail: tikurzina@bk.ru

Южный федеральный университет, г.Ростов-на-Дону

Актуальность исследования структуры медных центров в цеолитах типа Cu-MOR обусловлена тем, что локальная атомная структура медных цеолитов является определяющей для каталитических свойств исследуемых материалов, которые используются в технологиях превращения метана в метанол [1].

В данной работе объектами исследования являются медные центры цеолитов типа Cu-MOR, формируемых в температурном диапазоне от комнатной (RT) до 400°C с использованием метода твердофазного ионного обмена [2].

Экспериментальные спектры были получены на станции SuperXAS источника синхротронного излучения Института Пауля Шеррера в Виллигене (Швейцария) в условиях *in-situ* при температурах комнатной (RT), 120, 200, 300 и 400°C. Было выполнено DFT моделирование и Cu K-XANES/EXAFS расчеты для наиболее вероятного атомного окружения меди в температурном диапазоне от RT до 400°C. В результате проведенных исследований была определена наиболее вероятная структура медных центров в цеолитах типа Cu-MOR, сформированных в рассматриваемом температурном диапазоне.

Список литературы

1. Alayon E. M. et al. Catalytic conversion of methane to methanol over Cu–mordenite //Chemical communications. 2012. Т. 48. №. 3. С. 404-406.
2. Vozbag S. E. et al. Methane to methanol over copper mordenite: yield improvement through multiple cycles and different synthesis techniques. Catalysis Science & Technology. 2016. Т. 6. №. 13. С. 5011-5022

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МОРФОЛОГИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ 3Ti-Si-C, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СВС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУЛЛЕРИТА И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Ларионова Н.С., Никонова Р.М.

E-mail: *larionova_n@udman.ru*

Научный центр металлургической физики и материаловедения

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

Интерес к исследованию системы Ti-Si-C обусловлен возможностью синтеза на ее основе современных перспективных материалов со стехиометрией $M_{n+1}AX_n$ (где $n = 1, 2, 3, \dots$; M – переходный d-металл; A – p-элемент; X – углерода), так называемых МАХ-фаз. Благодаря уникальному сочетанию свойств МАХ-фаза Ti_3SiC_2 привлекает внимание как перспективный материал высокотемпературной керамики, защитных покрытий, датчиков, электрических контактов и других приложений.

В связи со сложностью получения фазы Ti_3SiC_2 в чистом виде, актуальным является развитие методов ее синтеза. Использование метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) является экономической альтернативой более успешным, но дорогостоящим методам реактивного спекания и горячего изостатического прессования. Одним из важных параметров СВС, оказывающих влияние на фазовый состав образцов, является используемый источник углерода, а именно его структура и термические свойства.

В работе исследовано влияние фуллерита и углеродных нанотрубок на формирование МАХ-фазы Ti_3SiC_2 при СВС. Методом рентгеноструктурного анализа изучен фазовый состав сравниваемых образцов. Показано, что количество Ti_3SiC_2 в образцах определяется используемой формой углерода. Продуктами синтеза также являются карбид TiC и промежуточная фаза $Ti_5Si_3C_x$, обнаружены следы силицида титана $TiSi_2$. Методом растровой электронной микроскопии исследованы морфологические особенности полученных материалов. Показано, что структура образцов неоднородна и содержит области, состоящие одновременно из нескольких фаз.

Работа выполнена по теме НИР (№ 121030100001-3). Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП УдмФИЦ УрО РАН.

СПРЕЙ-ПИРОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ФОСФАТА ИТТРИЯ, ДОПИРОВАННОГО Er^{3+}

Ласточкин Д. А., Мальцев С. А., Томина Е. В.

E-mail: lastochkin.d1998@mail.ru

Воронежский государственный университет, Воронеж

В настоящее время особое внимание привлекают наноразмерные оптические материалы на основе РЗЭ, обладающие первоклассными люминесцентными характеристиками [1]. Фосфатные соединения известны как полифункциональные материалы [2]. Их активация различными лантаноидами позволяет расширить возможности применения наночастиц фосфатов в технике цветного телевидения и электроннолучевых приборах различного назначения, для изготовления люминесцентных ламп, газоразрядных индикаторов, защитных покрытий и т.д. [3]. Метод спрей-пиролиза сочетает в себе использование аэрозольных технологий с процессами дегидратации и разложения солей металлов [4].

Фазовый состав синтезированных спрей-пиролизом образцов $Y_{1-x}PO_4:Er_x$ ($x=5,10,15\%$). исследовали методом рентгенофазового анализа на дифрактометре Empyrean, тип анода – Cu ($\lambda=0.154060\text{nm}$). Съёмку проводили в интервале углов $2\theta = 10-80^\circ$ с шагом 0.0200.

Согласно данным РФА (рис.1), синтезированные спрей-пиролитическим методом порошки содержат преимущественно фазу YPO_4 , Фазы, которые содержали бы эрбий, например, оксид эрбия, на дифрактограмме отсутствуют, что свидетельствует о встраивании ионов Er^{3+} в кристаллическую решетку фосфата иттрия.

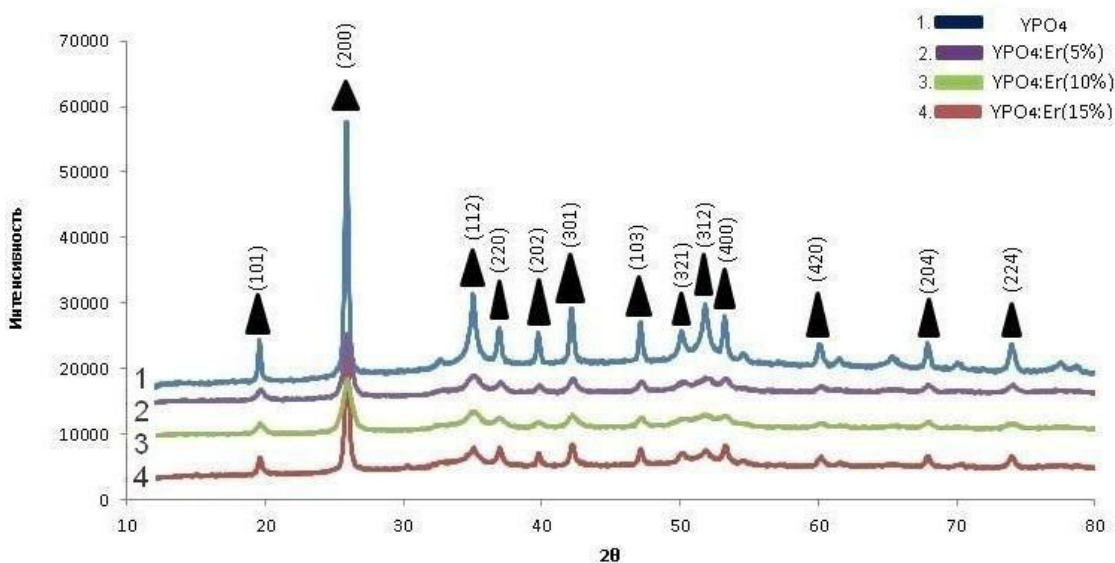


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма образцов: YPO_4 ; $Y_{0,95}Er_{0,05}PO_4$; $Y_{0,9}Er_{0,1}PO_4$; $Y_{0,85}Er_{0,15}PO_4$

Для образцов прослеживается тенденция увеличения значения углов отражения с ростом степени допирования эрбием вследствие встраивания ионов с меньшим радиусом ($r(\text{Er}^{3+})=88.1$ пм) в решётку на место ионов с большим радиусом ($r(\text{Y}^{3+})=89.3$ пм), что свидетельствует об успешном осуществлении допирования.

Список литературы

1. Ya Lin Xu [et al.]. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. Vol. 29. 2018. P. 714–720.
2. Томина Е.В., Ласточкин Д.А., Мальцев С.А. Конденсированные среды и межфазные границы. Т.22. 2020. С. 496–503.
3. Mingye Ding, Min Zhang, Chunhua Lu. Materials Letters. V. 209. 2017. P. 52–55.
4. Jinsong Huang [et al.]. Optical Materials. Vol. 32. 2010. P. 857–861.

КРИЗИСЫ НАУКИ: ЧТО НУЖНО ЗНАТЬ МОЛОДОМУ УЧЁНОМУ

Ломаев С.Л.

e-mail: lomaevst@udman.ru

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск

Процесс вовлечения молодых кадров в науку является сегодня важной задачей современного общества и государства. Реализуются различные государственные и частные программы по созданию образа науки как перспективной и многообещающей сферы деятельности, развивается индустрия научно-популярного контента. Наука как социальный институт нередко сама презентует себя обществу как мир истины и чудесных открытий.

Эта деятельность приносит свои полезные плоды. Однако из создаваемой позитивной концепции часто выпадает фигура самого учёного и, в особенности, молодого учёного, который начинает свой путь, сталкиваясь с целым рядом проблем в своей профессиональной деятельности. Существует некоторый зазор между миром, который рисует картина научпопа, и непосредственной практикой научной работы. В этом зазоре могут скрываться разные сюрпризы, не всегда исключительно приятные.

Столкнувшись с проблемами такого рода совершенно не подготовленным, молодой учёный рискует оказаться в ситуации профессионального разочарования и/или выгорания, что может не только привести временному понижению эффективности труда, но и даже привести к разрыву с наукой.

Первая задача доклада заключается в том, чтобы познакомить молодого учёного с проблемами, которые он может встретить в своей профессиональной деятельности.

Вторая задача выростала из непосредственного научного интереса автора доклада – посмотреть на науку как на предмет исследования. Эта задача требует прояснения контекста.

Действительно, в русском языке под термином наука может подразумеваться разные категории объектов: система знаний и языка, на котором сформулированы знания; набор принципов и методов исследования, на основании которых производится научные знания; и социальная структура, которая занимается формулированием и применением этого знания.

В данном докладе мы, руководствуясь научными методами, рассмотрим науку как социальную структуру, а затем сделаем своего рода методологическую мёртвую петлю – применим классические методы исследования науки к самой системе методов исследования науки.

Одним из наиболее интересных аспектов в исследовании науки как развивающейся системы – это её кризисы [1]. Мы рассмотрим те кризисы, воздействие которых проявляется в нарушении следующих принципов научного исследования:

1. Формализованный язык и понятийный аппарат, строгий набор аксиом;
2. Экспериментальная перепроверка;
3. Открытость и доступность для перепроверки и критики.

В данной лекции кризис не рассматривается как синоним депрессии или стагнации. Этимологически данное понятие восходит к греческому языку, в котором слово κρίσις употреблялось в значении «суд, приговор, решение», а также в значении «поворотный пункт». Именно такое значение наиболее близко передает суть рассматриваемого нами явления.

Ни одна значимая смена научных парадигм не возникала без предшествующего ей кризиса науки [2], а потому на любой кризис можно смотреть как на необходимое условие развития.

Список литературы

1. Кара-Мурза С. Г. Идеология и мать её наука. – Алгоритм, 2002.
2. Кун Т. Структура научных революций. – Рипол Классик, 1975.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ШИРОКОПОЛОСНОГО РАДИОДОСТУПА НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ПАО «УДМУРТНЕФТЬ» ИМЕНИ В.И. КУДИНОВА

Мухаметдинова С.Г., Коршунов А.И.

e-mail: S_koles@mail.ru

*ЗАО «Ижевский нефтяной научный центр», город Ижевск,
ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения
Российской академии наук», город Ижевск*

Целью моей научной работы является создание цифрового месторождения, и одной из задач является создание широкополосного радиодоступа на месторождениях ПАО «Удмуртнефть» имени В.И. Кудина.

В настоящее время большинство нефтедобывающих месторождений России имеют высокий уровень выработанности и находятся на поздних стадиях эксплуатации (рис.1).

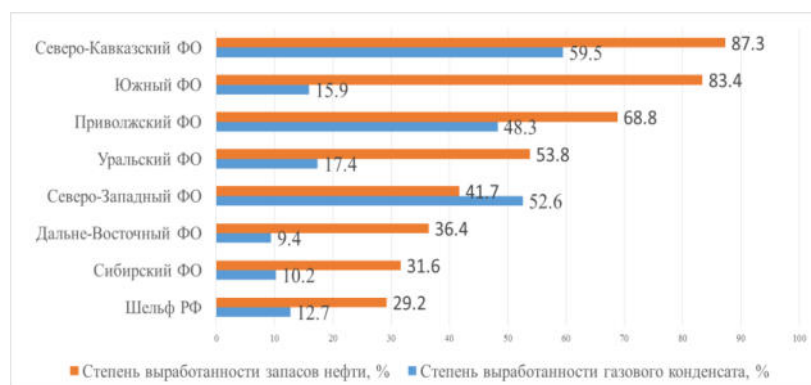


Рис.1 Степень выработанности разведанных запасов нефти и газового конденсата в Российской Федерации, % (на 2020 г.).

Дебит скважин падает, увеличиваются расходы при добыче нефти и газа, рентабельность падает. Одним из решений данной задачи является совершенствование АСУТП. Создание цифровых нефтегазодобывающих скважин. При этом передача (мониторинг) данных – составная важная часть АСУТП. Организовать качественную передачу данных, соответствующую требованиям по объему и скорости передачи, одна из задач, при создании цифрового месторождения.

В настоящее время существует 2 способа организации высокоскоростных каналов связи: волоконно-оптические линии передачи (ВОЛС) и широкополосный доступ (ШПД). В докладе рассмотрены преимущества и недостатки ШПД.

Согласно Стандарта компании ПАО «Роснефть» на месторождениях ПАО Удмуртнефть имени Кудина применили WiMAX (Worldwide Interoperability for Microwave

Access) стандарта IEEE 802.16 (Institute of Electrical and Electronics Engineers) и WiFi (Wireless Fidelity) стандарта IEEE 802.11.

Исходя из преимуществ и недостатков данных технологий было решено WiMAX использовать на удаленных кустах скважин для передачи полностью всей информации с технологических объектов, расположенных на кусте скважин (АГЗУ, БГ, самих скважин и т.д.), рис. 2. А технологию WiFi было решено использовать для одиночных удаленных нагнетательных и добывающих скважин (рис. 3).



Рис. 2. Опора связи широкополосного радиодоступа (технология WiMAX) на Мишкинском нефтяном месторождении ПАО «Удмуртнефть» им. В.И.Кудинова



Рис.3. Узел беспроводной связи (технология WiFi) на Гремихинском нефтяном месторождении ПАО «Удмуртнефть» им. В.И.Кудинова

1. Применение технологии ШПД на нефтяных месторождениях ПАО «Удмуртнефть» имени В.И Кудинова является актуальным и позволяет обеспечивать сбор информации с территориально распределенных технологических объектов в большом объеме и на высокой скорости.

2. Применение технологии ШПД позволяет кроме передачи технологической информации с объектов организовать охранно-пожарную сигнализацию и видеонаблюдение объектов с передачей информации на оперативно-диспетчерские пункты и в службу безопасности предприятия, а также оборудовать телефонной связью по технологии VoIP территориально распределенные труднодоступные объекты.

3. Применение технологии позволяют создавать цифровые и интеллектуальные месторождения, где система АСУТП вышла за рамки типовой.

Список литературы

1. Мухаметдинова С.Г., Коршунов А.И., Трефилов А.С. Использование беспроводных высокоскоростных каналов связи для решения задач автоматизации на месторождениях ОАО "Удмуртнефть" // Нефтяное хозяйство. – М.: – 2020. – № 11. – С. 120–123.
2. Мухаметдинова С.Г., Хмелинин К.С., Трефилов А.С. Применение технологии широкополосного высокоскоростного радиодоступа (ШПД) на месторождениях ОАО "Удмуртнефть" // Автоматизация, телемеханизация и связь в нефтяной промышленности. . – М.: – 2019. – № 8. – С. 5-9.
3. Государственный доклад Министерства природных ресурсов и экологии Российской Федерации о состоянии и использовании минерально-сырьевых ресурсов Российской Федерации в 2019 году. М.: МПР, 2020. 494 с.
4. Еремин Н.А., Еремин Ал.Н., Еремин Ан.Н. Цифровая модернизация нефтегазового производства // Нефть. Газ. Новации. 2017. № 12. С. 13–16.
5. Еремин Н.А. Цифровые тренды в нефтегазовой отрасли // Нефть. Газ. Новации. 2017. № 12. С. 17–23.

ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ПЕРОВСКИТНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Нечитайлова И.О., Поносова Е. Е., Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Срабионян В. В., Авакян Л. А., Бугаев Л. А.

E-mail: inec@sfnedu.ru

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону

Сегнетоэлектрические материалы, как известно, широко применяются в промышленности. Особое место среди сегнетоэлектрических материалов занимают составы со структурой типа перовскита, которые используются в качестве активных элементов в многих функциональных устройствах [1]. Физико-химические свойства таких материалов во многом зависят от малых структурных искажений, обусловленных различного рода воздействиями, в частности механоактивацией [2], [3].

В данной работе проведено XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) исследование малых структурных искажений и точечных дефектов, образовавшихся в процессе механоактивации в сегнетоэлектриках следующих составов: $\text{PbFe}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ (PFT) и $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ (PST). [4] Выполнен анализ спектров рентгеновского поглощения за L_3 -краем тантала в образцах PFT и PST до и после механоактивации, а также моделирование вероятного ближнего окружения атомов тантала в образцах PFT.

В ходе данной работы установлено, что перераспределение пиков А и В в области основного максимума спектра XANES за L_3 -краем тантала в образцах типа $\text{AB}_1\text{B}_2\text{O}_3$ обусловлено соотношением количества атомов B_1 и B_2 в ближнем окружении атома тантала.

Список литературы

1. L. Lu, X. Pan, J. Luo, Z. Sun. Chemistry - A European Journal, 2020, 26 (71), стр. 16975 – 16984
2. Нестеров А. А., Панич А. Е. Технология синтеза порошков сегнетоэлектрических фаз. 2010. 226 С.
3. L. Aleshina, A. M. Kalinkin, D. V. Lobov, R. Osaulenko. Technical Physics, 2010, 55(7), стр. 981 – 984
4. G. B. Sukharina, N. Y. Smolentsev, L. A. Avakyan, V. V. Srabionyan, E. V. Khramov, V. V. Stashenko, S. P. Kubrin, E. I. Sitalo, A. A. Guda, B. K. Abdulvakhidov, L. A. Bugaev. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2018, 82(7), стр. 909–912

ИССЛЕДОВАНИЯ МОРФОЛОГИИ, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ 3D-РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МАССИВОВ НИТЕВИДНОГО КРЕМНИЯ

¹Пелагина А.К., ¹Паринова Е.В., ¹Коюда Д.А., ²Сиваков В., ³Овсянников Р., ⁴Смирнов Д.,
⁴Макарова А., ⁵Yermukhamed, ³ Ming T., ¹Турищев С.Ю.

pisliaruk@phys.vsu.ru

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Лейбниц Институт Фотонных Технологий, Йена, Германия

³Хельмгольц Центр Берлин, Берлин, Германия

⁴Дрезден Университет Технологии, Дрезден, Германия

⁵Аль - Фараби Казахский Национальный Университет, Алматы, Казахстан

Кремниевые наноструктуры являются привлекательным объектом для создания перспективных приборов. Массивы нитевидного кремния (НК) полученные с использованием жидкофазного металл-ассистированного травления имеют развитую поверхность, практичны и позволяют контролируемо менять морфологию поверхности и свойства структур на их основе. Эти объекты обладают такими физико-химическими свойствами, как устойчивая интенсивность фотолюминесценции при комнатной температуре, низкий коэффициент отражения, и др. Перспективными являются и структуры, в которых массивы НК используются для функционализации их чрезвычайно развитой поверхности, которая достигается путем осаждения или покрытия перспективными материалами матрицы нитевидного кремния.

Актуальными вопросами являются исследования атомного и электронного строения экспериментальными рентгеноспектральными методами, дающими прямую информацию о специфике локального атомного окружения и физико-химическом состоянии. Известно, что метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) дает информацию о локальной парциальной плотности свободных электронных состояний вблизи дна зоны проводимости. Так же метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии – XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy) чувствителен к атомам заданного сорта, что позволяет провести анализ физико-химического состояния изучаемой поверхности, не разрушая ее.

Использование высокоинтенсивного синхротронного излучения установок класса "мегасайенс" является необходимым условием регистрации спектров высокого разрешения XANES (и XPS), когда речь идет о наноматериалах, которые, как правило, характеризуются малыми объемами пробы. Наконец, наиболее разрешенными энергетически являются спектры XANES и XPS, полученные при возбуждении неглубоких остовных уровней в ультрамягком рентгеновском диапазоне длин волн. Это приводит к чрезвычайной

чувствительности к поверхности. С другой стороны, исследования наноструктур, таких как НК, требуют понимания специфики атомного и электронного строения в глубине массива нанообъектов, там, где они имеют развитую поверхность, недоступную в целом для диагностических возможностей методов XANES и XPS.

В работе нами предложен метод, позволяющий получить информацию о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении «глубоких» слоев поверхности. Морфология образцов НК, была изучена методом сканирующей электронной микроскопии. Далее, для возможности проведения анализа внутренней ("внутри-объемной") части формируемого массива НК поверхностно-чувствительными методами XANES и XPS половина площади поверхности каждого образца механически удалялась в перчаточном шкафу (glove-box) в инертной атмосфере аргона. Далее механически модифицированные образцы через шлюзовую камеру устанавливались в объем многокамерной системы спектрометра Российско-германского канала синхротронного накопительного кольца BESSY II (Helmutz-Zentrum-Berlin) без контакта с атмосферой.

Выбранная технология характерна тем, что поверхность образца остается не модифицированной или подверженной химическим или физическим воздействиям. Локальная атомная структура остается неизменной, а согласно последующим исследованиям методом сканирующей электронной микроскопии, большая часть нитей скалывается, и небольшое количество фиксируется на поверхности под углом, вскрывая "боковые" части. Таким образом, предложенная механическая модификация позволяет получить XANES и XPS спектры с объемной части массива НК, включая подложку.

Были получены Si L_{2,3} и ОК спектры XANES и спектры Si 2p XPS с исходной и механически модифицированной частей массивов НК. Полученные рентгеноспектральные данные показали различные характеристики локального окружения атомов кремния и кислорода в поверхностной и "объемной" части массива НК. Продемонстрирована применимость предлагаемого способа изучения атомного и электронного строения объемной части наноструктур поверхностно-чувствительными методами.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0036.

СИММЕТРИЯ НИЖНЕЙ ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ СЕЛЕНИДА ЦИНКА

¹Перевощиков Д.А., ²Соболев В.Вал., ³Калугин А.И.

e-mail: perevdm@mail.ru

¹ООО «ИРЗ ТЕСТ», г. Ижевск,

²ИжГТУ им. М.Т. Калашникова, г. Ижевск,

³УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

Селенид цинка является одним из самых известных и популярных полупроводников группы кристаллов A^2B^6 [1] и имеет большие перспективы для изготовления современных сцинтилляционных детекторов [2]. Как известно, оптические свойства материалов существенно зависят от структуры зон и их симметрии. Для ZnSe ранее было установлено, что полоса состояний нижней зоны проводимости (НЗП) сформирована в основном s - и p -состояниями Zn и p -состояниями Se [3]. При этом в [4] установлено, что распределение вкладов s -, p - и d -состояний в НЗП в различных точках зоны Бриллюэна (ЗБ) происходит неравномерно: в центре ЗБ вклады вносят лишь s -состояния Zn и Se; в точке L вклады s -состояний составляют 83%, p -состояний – 7%, d -состояний – 10%; в точке X вклады s -состояний составляют 26%, p -состояний – 43%, d -состояний – 31%. Для других точек ЗБ результаты в [4] не получены, но широко известно, что интенсивные оптические переходы в кристаллах происходят не только в точках высокой симметрии, но и в объеме ЗБ [5].

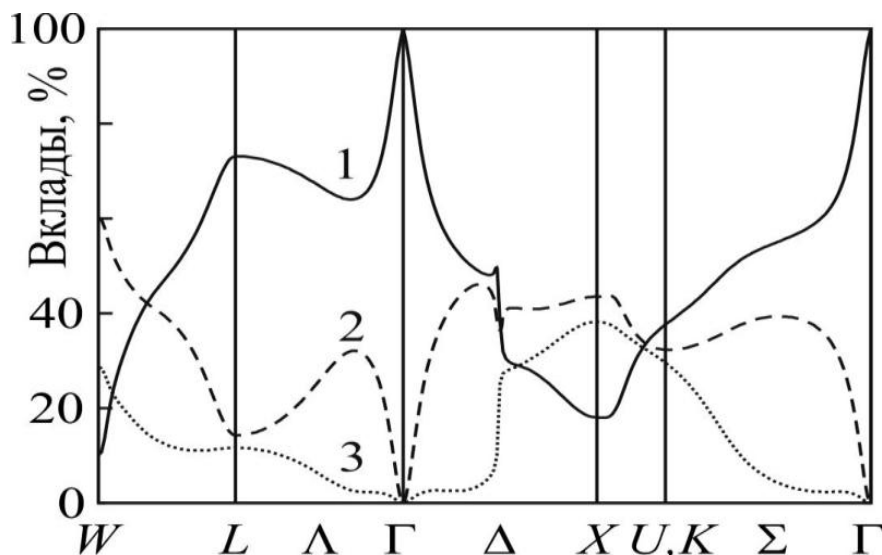


Рис. Суммарные вклады s - (1), p - (2) и d -состояний (3) Zn и Se при формировании НЗП ZnSe

В данной работе приводятся результаты расчетов вкладов s -, p - и d -состояний при формировании НЗП селенида цинка вдоль направлений \square , \square , \square , L–W и X–U ЗБ. Зонная структура была приведена нами ранее в работе [6]. Полученные результаты расчетов парциальных вкладов приведены на рисунке. В точке \square вклады полностью формируются s -состояниями обоих компонент. При отдалении от центра ЗБ вклады s -состояний резко спадают, а вклады p - и d -состояний – резко возрастают. Содержание s -состояний вдоль направления \square сначала спадает до $\sim 63\%$, затем возрастает до $\sim 74\%$; вдоль направления \square – спадает до $\sim 38\%$; вдоль направления \square – спадает до $\sim 18\%$ (при этом в окрестности точки пересечения двух нижних зон проводимости возникает скачкообразный спад на $\sim 20\%$); от точки L до точки W – спадает с $\sim 74\%$ до $\sim 10\%$; от точки X до точки U – возрастает с $\sim 18\%$ до 38% . Содержание p -состояний вдоль направления \square сначала возрастает до $\sim 32\%$, затем спадает до $\sim 14\%$; вдоль направления \square – сначала возрастает до $\sim 39\%$, затем спадает до $\sim 32\%$; вдоль направления \square – возрастает до $\sim 46\%$, затем содержит скачкообразное изменение на $\sim 10\%$ и возрастает до $\sim 44\%$; от точки L до точки W – возрастает с $\sim 14\%$ до $\sim 61\%$; от точки X до точки U – спадает с $\sim 44\%$ до 32% . Содержание d -состояний вдоль направления \square возрастает до $\sim 12\%$; вдоль направления \square – возрастает до $\sim 30\%$; вдоль направления \square – возрастает до $\sim 38\%$ (при этом в окрестности точки пересечения двух нижних зон проводимости возникает скачкообразный рост на $\sim 25\%$); от точки L до точки W – изменяется от $\sim 11\%$ до $\sim 29\%$; от точки X до точки U – спадает с $\sim 38\%$ до 30% .

Полученная нами информация о природе НЗП селенида цинка может свидетельствовать о существенной зависимости интенсивности оптических переходов в НЗП от их локализации в ЗБ.

Список литературы

1. Соболев В.В., Соболев В.Вал. Электронная структура твердых тел в области фундаментального края поглощения. Т. 2. Кристаллы группы A^2B^6 . М.-Ижевск: Издательство «Удмуртский университет», 2012. 608 С.
2. Jagtap S., et. al. Opto-Electronics Review. V. 27. Iss. 1. 2019. P. 90-103.
3. Markowski R., et. al. J. Phys.: Condens. Matter. V. 6. Iss. 17. 1994. P. 3207-3219.
4. Wentzcovitch R.M., et. al. Phys. Lett. A. V. 114. Iss. 4. 1986. P. 203-206.
5. Соболев В.В., Перевоицков Д.А. Физика и техника полупроводников. Т. 50. Вып. 5. 2016. С. 582-588.
6. Соболев В.В., Перевоицков Д.А. Физика и техника полупроводников. Т. 52. Вып. 3. 2018. С. 304-310.

ОРГАНИЧЕСКИЕ ПЛЁНКИ, СИНТЕЗИРОВАННЫЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖЕЛЕЗА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ АДАМАНТАНА

^{1,2}Поздеев В.А., ²Шаков А.А., ²Ломаева С.Ф.

toluoil@yahoo.com

¹ Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

² УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

Благодаря уникальной алмазоподобной молекулярной структуре, адамантан и его производные являются перспективными веществами для создания полимеров с особыми свойствами. Как правило, классические полимеры адамантана обладают рядом весьма ценных характеристик: высокая термостабильность, устойчивость к воздействию света, оптическая прозрачность и химическая инертность. Однако для создания соответствующего полимера мономерные молекулы должны обладать определенной химической активностью, что сильно ограничивает перечень пригодных мономеров для синтеза. Преодолеть это позволяет метод плазменной полимеризации, для которого высокая химическая активность мономера не является обязательной, - она создается в процессе самой полимеризации. Плёнки, получаемые методом полимеризации в плазме, характеризуются малой толщиной (от долей до единиц микрометров), высокой сплошностью, хорошей адгезией к основе, а также термостабильностью и низкой растворимостью в органических растворителях.

В данной работе методами РФЭС, АСМ, СЭМ, наноинтентирования, краевого угла смачивания были исследованы тонкие полимерные плёнки, полученные на железных подложках из плазмы паров адамантана. Показано, что полученная плёнка имеет толщину около 1 мкм, имеет сложную столбчатую структуру (диаметр «столбиков» 50-100 нм). Поверхностная энергия плёнки близка к значениям, соответствующим малополярным органическим полимерам, и составляет 41 мДж/м². В состав поверхностного слоя (около 10 нм) входят 84 ат.% углерода (из них 89% нефункционального, 11% - в составе пероксидных групп), 14 ат.% кислорода (только в составе пероксидных групп), а также незначительное количество (2 ат.%) азота в виде аминогрупп. Причиной появления столь значительной концентрации кислорода в плёнке (при следовых концентрациях остаточного воздуха в атмосфере реактора) является протекание при комнатной температуре вторичной реакции свободных радикалов плёнки с кислородом при выносе образцов на воздух.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ МОНООКСИДА МЕДИ

Радина В.Р., Манякин М.Д., Курганский С.И.

viminova@inbox.ru

Воронежский государственный университет, г. Воронеж

Монооксид меди (CuO) применяется в оптоэлектронике, катализе, в производстве биосенсоров, фотоэлектрохимических датчиков и литиевых батарей.

В данной работе представлены результаты теоретического исследования XES (X-ray emission spectroscopy) спектров соединения CuO в сравнении с экспериментальными данными [1].

Монооксид меди имеет моноклинную сингонию кристаллической решётки и относится к пространственной группе $C 2/c$ [2]. Расчет электронной структуры проводился в рамках теории функционала плотности (DFT) методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [3] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии [4]. Также для сравнения был выполнен расчет XES-спектров оксида меди(II) с использованием потенциала m_{bj} [3].

На рис. 1. представлен рентгеновский эмиссионный Cu L_3 -спектр в соединении CuO, рассчитанный в двух вариантах, в сравнении с экспериментальными данными [1]. В соответствии с дипольными правилами отбора, Cu L_3 -спектр соответствует $3d \rightarrow 2p$ и $4s \rightarrow 2p$ переходам и отражает распределение Cu $3d$ -, $4s$ -состояний в валентной зоне.

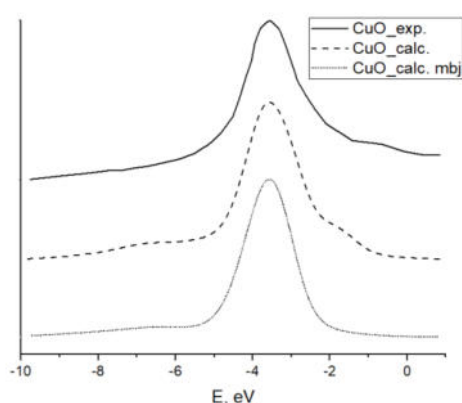


Рис. 1. XES Cu L_3 -спектры в CuO в сравнении с экспериментальным [1]

Теоретически рассчитанные спектры согласуются с экспериментальным как по общей форме, так и по относительной интенсивности в верхней и нижней частях валентной зоны. XES Cu L_3 -спектр имеет один ярко выраженный максимум при энергии \sim –

3,5 эВ, отсчитываемой от вершины валентной зоны. Оба варианта расчета спектра одинаково хорошо согласуются с экспериментом.

На рис. 2 показаны рассчитанные и экспериментальный [1] O *K*-спектры монооксида меди. Данный спектр отражает распределение *2p*-состояний кислорода в валентной зоне.

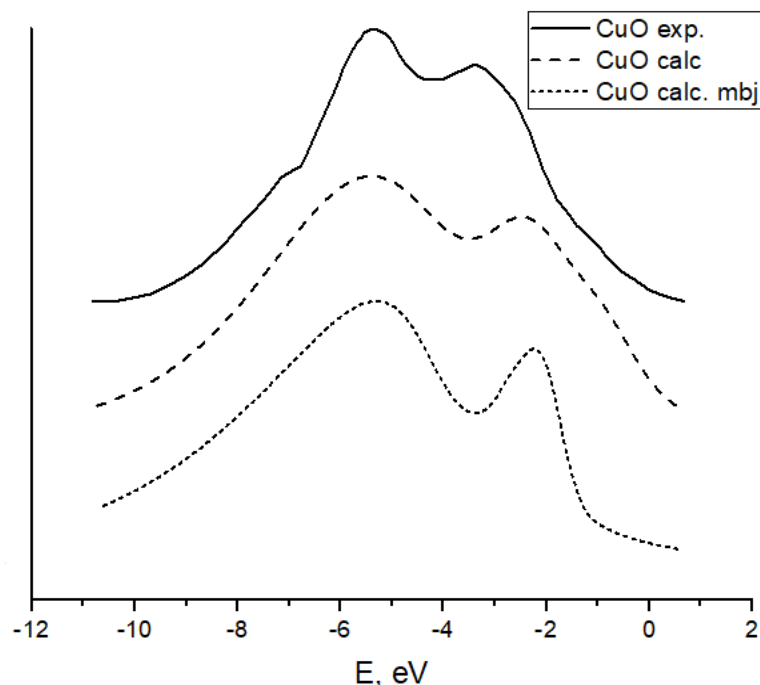


Рис. 2. XES O *K*-спектры в монооксиде меди в сравнении с экспериментальным [1]

Для O *K*-спектра в соединении CuO характерны два пика – при энергиях $-5,5$ эВ и -3 эВ. Эффект расщепления неметаллических *p*-состояний вследствие их взаимодействия с *d*-состояниями металла известен как *d-p*-резонанс. Пики экспериментального спектра наилучшим образом совпадают с пиками спектра, который был рассчитан без использования потенциала mbJ.

Список литературы

1. Mariot J.-M., Barnole V., Hague C.F., Vetter G., Queyroux F. Phys. B - Condensed Matter. V. 75. 1988. P. 1–9.
2. Ruiz E., Alvarez S., Alemany P., Evarestov R. A. Phys. Rev. B. V. 56. 1997. P. 7189.
6. Schwarz K., Blaha P., Madsen G. K. H. Comput. Phys. Commun. T. 147. № 1–2. 2002. С. 71–76.
4. Perdew J.P, Yue W. Phys. Rev. B. V. 33. 1986. P. 1487–1509.

ОЦЕНКА ПРИМЕНЕНИЯ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ С РАЗЛИЧНОЙ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ АМИНОКИСЛОТ

Рыбакова А.И., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.

E-mail: alenarybakova1994@mail.ru

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

Микроэмульсии (МЭ) и лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) находят применение в качестве наноразмерных средств направленного транспорта лекарственных и биологически активных веществ [1]. В качестве достоинств обращенных МЭ выделяют возможность включения широкого круга гидрофильных веществ. Преимуществом ЛЖК с обратной гексагональной фазой является структурное подобие мембранам, что позволяет рассматривать их в качестве универсальных темплатов для трансмембранного переноса веществ.

Проведено исследование *in vitro* массопереноса аминокислот (АК, С = 1 % масс.) из систем различной структуры - МЭ и ЖК – через мембрану (целлофановую пленку) в физиологический раствор Рингера. В качестве инкорпорированных веществ использовали L-лизин, L-серин, α -аланин и глицин. Установлено, что скорость высвобождения глицина из МЭ подчиняется линейному закону, более 50 % общего количества высвобождается в первые 30 минут. На скорость высвобождения АК влияют размер молекулы и ее гидрофобность. β -аланин, являющийся более гидрофобным, но имеющий одинаковый объем с L-серином, высвобождается значительно медленнее. В случае ЖК фазы время высвобождения АК значительно превышает время высвобождения из МЭ вследствие значительной вязкости мезофазы. По данным ЯМР установлено, что после прохождения через мембрану, молекулы ПАВ не образуют мицеллярных структур и не взаимодействуют с АК, которая высвобождается отдельно.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00187 А.

Список литературы

1. Саутина Н.В., Паничкина А.В., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г. Вестник казанского технологического университета. Т. 17. № 5. 2014. С. 32-34.

ЗАЩИТА МЕТАЛЛОВ ОТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРОЗИИ КОМПОЗИЦИЯМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ИНГИБИТОРОВ

Семилетов А.М.

e-mail: semal1990@mail.ru

Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, г. Москва

Известно [1,2], что модификация поверхности металлов тонкими слоями органических соединений может обеспечивать их высокую коррозионную стойкость. С технологической точки зрения такой способ защиты металлических изделий может быть не только эффективным и простым, но и экономически выгодным. В основе такого метода лежит понятие пассивности металлов. Пассивное состояние может достигаться не только за счет образования стабильной оксидной пленки или образования труднорастворимых соединений, но и благодаря адсорбции органических ингибиторов коррозии (ИК).

Традиционные методы противокоррозионной защиты металлов основаны на использовании ИК окислительного типа, в первую очередь хроматов и нитритов, а также ингибированных масел и консистентных смазок, которые в настоящее время сталкиваются с серьезными экологическими ограничениями, в связи с чем возникает потребность их замены нетоксичными и экологически безопасными органическими ИК.

В качестве эффективных органических пассиваторов могут быть использованы различные классы соединений, среди которых весьма привлекательны те, которые имеют в составе молекулы активную функциональную группу, способную прочно связываться с поверхностью металла, и относительно гидрофобную углеводородную часть: высшие карбоксилаты, алкилфосфонаты. Тем не менее в этой роли могут выступать и кремнийорганические соединения – триалкоксисиланы (ТАС). Недавно было показано [3], что [3-(2-аминоэтиламино)пропил]-триметоксисилан (АЭАПТС) обладает высокой пассивирующей способностью, а его водные растворы отличаются высокой стабильностью. Однако АЭАПТС слабо эффективен при защите от локальной депассивации хлоридами.

В связи с этим в настоящей работе предпринята попытка усилить ингибирующее действие ТАС: АЭАПТС и винилтриметоксисилана (ВС) в совместных композициях с алкилкарбоксилатами, способных стабилизировать пассивное состояние. Исследована возможность получения защитных наноразмерных пленок ИК на низкоуглеродистой стали Ст3 и алюминиевых сплавах (АД31 и АМг6) для защиты от атмосферной коррозии. Эффективность защиты металлов оценивали электрохимическими измерениями, капельным методом и коррозионными испытаниями в условиях влажной атмосферы и соляного тумана.

В настоящей работе показана принципиальная возможность защиты исследуемых металлов и сплавов модифицированием их поверхности с целью создания тончайших защитных слоёв. Существенную роль при этом играют условия формирования пассивирующих пленок (потенциал металла, температура, концентрация раствора, последовательность обработки поверхности разными соединениями). Варьируя состав раствора ИК и условия его адсорбции можно изменять структуру покрытия, добиться увеличения адсорбции компонентов и, как следствие, повышения защиты металла.

Работа выполнена при поддержке Программа фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2020-2022 гг.: «Развитие фундаментальных научных основ защитного действия ингибиторов коррозии металлов в газовых и конденсированных средах, нанокompозитах, лакокрасочных и конверсионных покрытиях» (№ госрегистрации АААА-А18-118121090043-0)

Список литературы

1. Kuznetsov Yu.I. Organic Inhibitors of Corrosion of Metals // – New York and London: Plenum Press. – 1996. 283 p.
2. Михайлов А.А., Панченко Ю.М., Кузнецов Ю.И. Атмосферная коррозия и защита металлов / под. общ. ред. Кузнецова Ю.И. - Тамбов: Изд-во Першина Р.В., 2016. - 555 с.
3. Чиркунов А.А., Семилетов А.М., Кузнецов Ю.И., Андреева Н.П. //Коррозия: материалы, защита. 2013. № 11. С. 27-34.

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ СМАЧИВАНИЕ ВОДНЫМИ РАСТВОРАМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Шаймухаметова И.Ф., Богданова С.А.

E-mail: i.farsovna@yandex.ru

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

Смачиваемость поверхности полимеров является одной из важнейших характеристик для определения возможности использования материала в конкретной области. Она является фундаментальным свойством твердых поверхностей, которое играет важную роль в фармацевтической, косметической, лакокрасочной, строительной промышленности, в адгезионных технологиях и в процессах получения нанокompозитов. В последние десятилетия измерение смачивания применяется как метод оценки структуры и

свойств поверхностных слоев полимерных материалов. Целью данной работы являлось изучение влияния полярности поверхности полимеров на их смачивание растворами поверхностно-активных веществ (ПАВ).

В работе использовались ПАВ - лаурилсульфат натрия (ЛСН), оксиэтилированный лаурилсульфат натрия (ОЛСН), кокамидопропилбетаин, полочсамер 184 и децил глюкозид. Исследовались поверхности политетрафторэтилена (ПТФЭ), полиэтилена высокого давления (ПЭВД), полиэтилентерефталата (ПЭТФ). Свободная поверхностная энергия (СПЭ), ее кислотно-основная и дисперсионная составляющие определялись методом среднего геометрического по данным измерения смачивания поверхности полимеров тестовыми жидкостями. Полярность поверхности рассчитывалась как отношение полярной составляющей СПЭ к полной СПЭ. Краевой угол смачивания определялся на катетометре КМ-8 по методу сидящей капли. Шероховатость поверхности полимеров определяли с помощью профилометра модели 130. Коэффициенты шероховатости учитывали при расчете косинуса краевого угла смачивания с использованием уравнения Венцеля-Дерягина. Поверхностное натяжение растворов ПАВ определялось методом отрыва кольца дю Нуи.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что исследуемые полимеры существенно отличаются по своим поверхностным энергетическим характеристикам. Так полярность поверхности ПЭТФ в 36 раз больше, чем полярность поверхности ПТФЭ, что составило $18,2 \cdot 10^{-2}$ и $0,5 \cdot 10^{-2}$, соответственно. Значение полярности поверхности ПЭВД находится в промежутке между ПЭТФ и ПТФЭ и составляет $10,8 \cdot 10^{-2}$.

Сравнительный анализ изотерм смачивания показывает, что наибольшей смачивающей способностью обладают растворы кокамидопропилбетаина и децил глюкозида, наименьшей – растворы ЛСН. Из полученных данных следует, что смачивание возрастает с увеличением СПЭ и полярности поверхности.

По отношению к поверхности ПЭТФ хорошей смачивающей способностью обладают практически все растворы ПАВ. Для ПТФЭ отмечена инверсия смачивания. Максимальное изменение $\cos \theta$ наблюдается для поверхности ПЭВД (от 0,02 до 0,97).

На основании измерения краевых углов смачивания и поверхностного натяжения растворов ПАВ была определена работа адгезии ПАВ к поверхности полимеров по уравнению Юнга-Дюпре. Установлено, что к гидрофобной поверхности ПТФЭ адгезия всех исследуемых ПАВ самая низкая и возрастает по мере увеличения СПЭ полимеров. Наиболее высоким адгезионным взаимодействием с поверхностью исследуемых полимеров обладают растворы полочсамера 184 и кокамидопропилбетаина.

Полученные результаты полезны для анализа характеристик полимерных материалов в адсорбционно-активных средах.

ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИЯ 1,2-ДИ(4-ПИРИДИЛ)ЭТИЛЕНА В РАСТВОРАХ

Шайдуллина А.Ф., Волков М.Ю., Савостина Л.И., Туранов А.Н.

shaidullina.amina@yandex.ru

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Институт Физики

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань

1,2-Ди(4-пиридил)этилен (DPE) привлекателен тем, что, может быть использован в качестве лиганда в координационных соединениях. Наличие непредельной С=C связи дает возможность фотоизомеризации и позволяет получать «умные» материалы с уникальным строением и ценными функциональными характеристиками. Благодаря их структурным особенностям открыт широкий спектр применений в таких областях, как доставка лекарств, химическое зондирование, нелинейная оптика и биомедицинская визуализация.

Целью работы является исследование механизма *цис-транс* изомеризации DPE с помощью экспериментальных методов и квантово-химического метода DFT.

Процесс *транс-цис* изомеризации лиганда DPE (при облучении его светом с длиной волны $\lambda = 365$ нм) и его кинетика были исследованы в растворах в дейтерированном ацетоне с помощью ЯМР спектрометра Bruker AVANCE 400 (^1H спектры высокого разрешения), а в растворе ацетонитрила на спектрофотометре Varian Cary 100 (УФ и Vis спектры).

В УФ спектре DPE в ацетонитриле наблюдается максимум при $\lambda = 290$ нм (*транс*-изомер), который при облучении переходит в *цис*-изомер ($\lambda = 248$ нм), что подтверждается изменением соотношения интенсивностей линий.

Совокупностью методов ЯМР, УФ, Vis спектроскопии установлена высокая фоточувствительность лиганда DPE в растворах и изучена кинетика его фотоизомеризации. Экспериментальные данные подтверждены квантовохимическими расчетами методом DFT в программном пакете ORCA [1]. Расчеты проводились с использованием функционала B3LYP и базиса def2-TZVP с полной оптимизацией геометрических параметров.

Список литературы

1. Neese, F. The ORCA program system Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. Vol. 2. Issue 1. 2012 . P. 73-78.

КОСМЕЦЕВТИЧЕСКИЕ БИОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ГЕЛЕЙ

Шигабиева Ю.А., Богданова С.А., Сысоева М.А.

E-mail: romanovakstu@yandex.ru

Казанский национальный исследовательский университет,

Россия, г. Казань, ул. К.Маркса, 68

Актуальной тенденцией в технологиях производства гетерогенных лечебно-косметических композиций является введение в их состав субстанций, получаемых из природного сырья, в связи с их нетоксичностью и эффективным физиологическим и косметическим действием [1]. Экстракты древесного гриба чаги обладают мощными антиоксидантными свойствами, преимущественно обусловленными наноразмерными биочастицами меланинов [2]. Однако взаимосвязь особенностей извлечения меланинов чаги и коллоидно-химических свойств наноструктурированных полимерных гелей, содержащих эти биологически активные добавки, изучены недостаточно.

В данной работе разработаны рецептуры гелевых композиций на основе редкосшитой полиакриловой кислоты Carbomer 141 в качестве гелеобразователя с использованием меланинов в форме сухих экстрактов чаги [3].

Экстракты чаги вводились в виде водно-глицериновых систем, обладающих максимальной антиоксидантной активностью. Методом динамического и электрофоретического рассеяния света на анализаторе Zetasizer Nano ZS компании Malvern Instruments при температуре 25 ± 2 °C установлено, что размер частиц дисперсной фазы экстрактов зависит от способа экстракции и концентрации сухого экстракта в дисперсионной среде. Выявлено, что частицы исследуемых систем обладают отрицательным зарядом и размерами нанодиапазона – порядка 20–30 нм, что свидетельствует об их выраженной биологической доступности. Величина ζ -потенциала свидетельствует о высокой коллоидной устойчивости. Водно-глицериновые системы экстрактов обладают низкой полидисперсностью. Полученные результаты позволяют использовать данные биологически активные добавки в качестве косметических ингредиентов в оптимальных концентрациях.

На основании определения реологических характеристик методом ротационной вискозиметрии была оптимизирована концентрация гелеобразователя и активной добавки.

Установлена зависимость структурно-механических свойств гелей от природы и концентрации вводимого антиоксиданта, размера наночастиц, присутствия ПАВ в системе.

Список литературы

1. Олдфилд Т., Картер Т. Использование антиоксидантов для обеспечения качества косметических средств / Т. Олдфилд, Т. Картер // *Sofw J.* 2005. № 6. С. 24–30.
2. Nikitina S.A., Khabibrakhmanova V.R., Sysoeva M.A., Nosova F.F. Investigation of Chaga Melanin. II. Composition of Hydrocarbon Fraction / *PHARMACEUTICAL CHEMISTRY JOURNAL.* 2015. Т. 49. Вып. 8. С. 543-545.
3. Шигабиева Ю.А. Коллоидно-химические свойства пенообразующих и гелевых композиций с биологически активными компонентами: дис. ... канд. хим. наук. Казань, 2014. 158 с.

ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ МНОГОСЛОЙНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЗЕРКАЛ МО/ВЕ В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА

Соломонов А.В., Каратаев А.В., Гайсин А.У., Филатова Е.О.

asolomonov78@gmail.com

*Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1,
Петродворец, Санкт-Петербург, Россия*

Многослойные рентгеновские зеркала на основе молибдена и бериллия благодаря их высокой отражательной способности являются перспективными оптическими элементами для технологии безмасочной ЭУФ литографии [1], космических телескопов и особенно для исследования короны Солнца [2]. Однако, для стабильной работы чрезвычайно важна устойчивость их оптических параметров к воздействию высоких температур.

Согласно исследованиям [3], отражательная способность Мо/Ве зеркал резко падает при температурах выше 200°C. Также отмечается изменение толщины периода с изменением температуры, что может негативно сказываться на отражательной способности МРЗ. В данной работе изучалось влияние температуры отжига многослойной структуры Мо/Ве с/без барьерным слоем на процесс формирования ее межслоевых областей.

Исследования в работе проводились методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

На первом этапе была изучена прямая и обратная однопериодные системы Si/[Mo/Be]. Полученные результаты указывают на образование двух типов бериллида на межфазных границах структуры Mo/Be в зависимости от порядка напыления слоев (MoBe₁₂ формируется на границе Be-на-Mo и MoBe₂ на границе Mo-на-Be).

На следующем этапе был проведен анализ многопериодной системы Si/[Mo/Be]₁₁₀ в условиях разных температурных режимов отжига. Анализ Be 1s фотоэлектронного спектра указывает на существенное перераспределение вкладов бериллидов молибдена и чистого бериллия в зависимости от температуры отжига. Важно, что уже при температуре 200°C отжиг в течение получаса приводит к заметному росту вклада бериллида молибдена MoBe₁₂. По мере дальнейшего повышения температуры отжига наблюдается увеличение вклада бериллида MoBe₂, а роста вклада Mo/Be₁₂ более не наблюдается, из чего следует, что данное соединение энергетически выгоднее.

Введение на межфазной границе барьерного слоя В₄С частично препятствует образованию бериллидов MoBe₂ и MoBe₁₂ в многослойной системе Si/[Mo/В₄С/Be]₁₁₀. При отжиге данной системы до 400 °С наблюдается увеличение содержания дибериллида MoBe₂, в то время как рост бериллида MoBe₁₂ начинается при температурах выше 100 °С. Можно сделать вывод, что введение барьерного слоя В₄С частично препятствует образованию бериллида MoBe₂ и повышает термическую стабильность системы до 300 °С.

Введение Si барьерного слоя в систему предотвращает образование бериллида MoBe₂ и частично MoBe₁₂. В процессе отжига системы обнаруживается образование незначительного содержания MoBe₂ и увеличение содержания MoBe₁₂ при температурах выше 300°C. Данная система также термически стабильна до 300°C. Можно сделать вывод, что введение барьерного слоя повышает область рабочих температур системы Si/[Mo/Be]₁₁₀.

Все исследования были проведены на комплексном фотоэлектронном и растровом оже-электронном спектрометре Thermo Fisher Scientific Escalab 250xi в Научном парке СПбГУ. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-20125.

Список литературы

1. Salashchenko N.N., Chkhalo N.I., Dyuzhev N.A. Maskless X-Ray Lithography Based on Microoptical Electromechanical Systems and Microfocus X-Ray Tubes // J. Surf. Investig. 2018. Vol. 12, № 5. P. 944–952.
2. Bogachev S.A. et al. Advanced materials for multilayer mirrors for extreme ultraviolet solar astronomy // Appl. Opt. 2016. Vol. 55, № 9. P. 2126.

3. Svechnikov M. V et al. Study of oxidation processes in Mo / Be multilayers Study of oxidation processes in Mo / Be multilayers. 2018. Vol. 075202.

МЕТОД ПЕРИОДОГРАММНОГО АНАЛИЗА ОТРАЖЁННЫХ ГИДРОАКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Тугбаева А.С., Милуч В.Н., Широков В.А.

E-mail: anastasia_tugbaeva@mail.ru, mili@udman.ru, shirokovva@udman.ru

УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск

В настоящее время актуальным в различных областях исследования морской гидросферы является мониторинг подводной среды и сбор информации о находящихся в ней объектах. Подводные акватории в силу высоких давлений малоприспособлены для деятельности человека и могут интенсивно осваиваться только с использованием автономных обитаемых подводных аппаратов, которые должны быть оснащены системами подводного видения. Информация, позволяющая визуализировать пространственную модель подводного мира может быть получена путём использования метода, позволяющего распознавать объекты по отраженному ими гидроакустическому сигналу [1].

Целью настоящей работы является разработка методов искусственного интеллекта, реализующих поиск скрытых закономерностей в отражённых гидроакустических сигналах. Явления затухания, рассеяния и рефракции звука, обусловленные неоднородностью температуры, солёности и плотности воды, вызывают существенное искажение и зашумление эхосигнала, который является основным источником информации о подводном объекте для гидроакустических приборов. Для достижения поставленной цели в работе проводится исследование отражённых различными подводными объектами гидроакустических сигналов при вариациях условий их эхолокации.

В докладе представляется алгоритм применения метода периодограмм А. Шустера [2] по схеме Бюй-Балло для анализа отражённых гидроакустических сигналов с целью распознавания формы и размеров исследуемых объектов. Суть метода предполагает определение оценки спектральной плотности мощности, основанной на вычислении квадрата модуля преобразования Фурье последовательности.

Экспериментальный материал в виде набора эхосигналов получен в опытовом бассейне. Схема экспериментальной установки выглядит следующим образом: в бассейне помещаются излучатель, который излучает гидроакустические колебания на исследуемый объект и приёмник, который принимает отражённый гидроакустический сигнал от объекта. Зафиксированный приёмником эхосигнал передается в компьютер и подвергается обработке методом периодограммного анализа. Предобработка заключается в сглаживании периодограммы и устранении ложных пиков путём дробления временного ряда и его усреднения по соседним частотам. После предобработки периодограммы готовы к последующему анализу с целью поиска скрытых в них закономерностей, которые позволяют оценить параметры объекта и окружающей его среды. Характеристики результатов периодограммного анализа при их устойчивости на нескольких реализациях отражённого сигнала будут являться признаками для идентификации и определения характеристик отражающих объектов.

Задача распознавания предполагает выделение характеристик сигналов, позволяющих с большей вероятностью определить объект исследования [3]. Для достижения поставленной цели получены и обработаны по предложенному алгоритму эхосигналы исследуемых объектов. Каждому объекту сопоставлялся класс, включающий в себя его эхосигналы при различных условиях. Заключение о различиях объектов или условий окружающей их среды подтверждается различием значений рассчитанных характеристик периодограмм исследуемых объектов.

В докладе приведены результаты исследования различий характеристик периодограмм для нескольких подводных объектов при вариациях условий их гидроакустического зондирования.

Список литературы

1. Богородский А.В., Яковлев Г.В., Корепин Е.А., Должиков А.К. Гидроакустическая техника исследования и освоения океана – Ленинград: Гидрометеиздат, 1984. – 264 с.
2. Карабанов И.В., Миронов А.С. Алгоритмы обработки гидроакустических сигналов. – Хабаровск: Издательство Тихоокеанического государственного университета, 2018. – С. 32-44.
3. Серебренников М. Г., Первозванский А. А., Выявление скрытых периодичностей. – М.: Наука, 1965. – 244 с.

ОСОБЕННОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПЛЕНОК ПММА, ДОПИРОВАННЫХ АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ Tb(III) И Eu(III)

¹Зиятдинова Р.М., ¹Крупин А.С., ¹Карякин М.Е., ¹Князев А.А., ^{1,2}Галяметдинов Ю.Г.

E-mail: ruzannochka95@mail.ru

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань

²Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань

Люминесцентные комплексы лантаноидов(III) все больше привлекают внимание исследователей различных областей науки и техники из-за их интенсивных пиков излучения в видимой и ближней инфракрасной области при возбуждении ультрафиолетовым светом. Включение координационных соединений лантаноидов(III) в органические полимеры представляет собой идеальный и многоцелевой подход к получению гибридных материалов. Комплексы в матрице полимера обладают улучшенными фотолюминесцентными свойствами, термостабильностью и механической гибкостью и представляют собой перспективный класс материалов для применения в широком спектре новых технологий. В связи с вышесказанным получение и исследование новых композитных материалов на основе координационных соединений лантаноидов(III) и полимеров является весьма интересной и актуальной задачей.

В работе исследована возможность получения светотрансформирующих пленок на основе полимерной матрицы ПММА и анизометричных комплексов Eu(III) и Tb(III) (рис. 1), способных преобразовать УФ-излучение в видимое [1, 2].

Исследованы оптические свойства пленок с различным содержанием комплексов Eu(III) и Tb(III) в полимерной матрице и установлен механизм преобразования УФ-излучения в данных композитах. При изучении спектров пропускания обнаружено, что полученные пленки практически полностью поглощают УФ-излучение и обладают высокой степенью пропускания (более 98%) видимого света в интервале длин волн 400-800 нм.

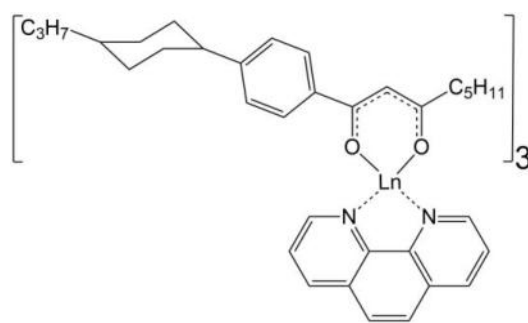


Рис. 1. Структурная формула комплексов, где Ln=Eu(III), Tb(III)

При одновременном введении двух комплексов в спектрах люминесценции наблюдаются полосы переходов обоих ионов лантаноидов(III) (рис. 2а). При исследовании концентрационной зависимости люминесценции пленок, которые содержали 3% масс. комплекса Eu(III) и комплекс Tb(III) с содержанием 1-20% масс., было обнаружено, что при увеличении содержания комплексов Tb(III) происходит возрастание интенсивности излучения обоих ионов, обусловленное переносом энергии с комплекса Tb(III) на комплекс Eu(III) (рис. 2б).

Полученные пленки могут найти применение в качестве светотрансформирующих материалов, эмиттеров прозрачных световых панелей и органических светодиодов, компонентов оптоволоконна и материалов для перестраиваемых лазеров с изменяемым излучением в широком диапазоне длин волн.

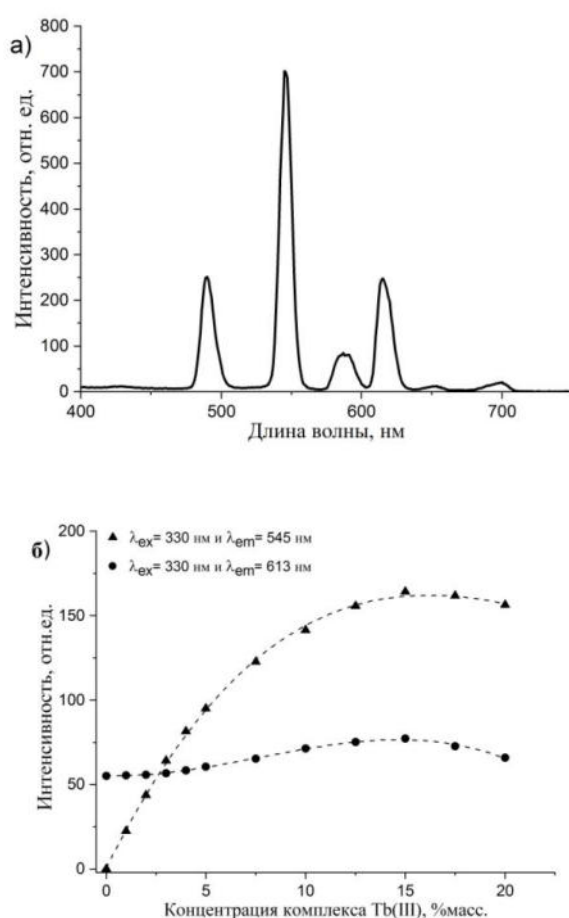


Рис. 2. (а) Спектр люминесценции пленки на основе ПММА, допированной 3% масс. комплекса Eu(III) и 5% масс. Tb(III) и (б) концентрационная зависимость люминесценции пленок на основе ПММА, допированных 3% масс. комплекса Eu(III) и 1-20% масс. Tb(III) при длине волны возбуждения 330 нм

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №20-73-10091).

Список литературы

1. Knyazev A.A., Krupin A.S., Gubaidullin A.T., Galyametdinov Y.G. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. V. 75. 2019. P. 570–577
2. Knyazev A.A., Karyakin M.E., Heinrich B., Donnio B., Galyametdinov Y.G. Dyes and Pigments. V. 187. 2021. P. 109050.

ПОЛУЧЕНИЕ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЕЛЕВЫХ СИСТЕМ С НЕИОНОГЕННЫМИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ

Абрамов В.А., Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г.

e-mail: abramovv660@gmail.com

Казанский национальный исследовательский технологический университет,

Казань, Россия

420015, Россия, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

Полимерные гели представляют особый интерес в связи с тем, что они являются матрицей для введения лекарственных или биологически активных веществ, Подбор эффективной системы, которая позволит наилучшим образом преодолеть эпидермальный барьер кожи, доставить и пролонгировать действие активного вещества остается перспективной задачей для фармацевтической и косметической отрасли.

Одним из способов решения проблемы контроля высвобождения лекарственных средств и биологически активных веществ трансдермально может быть электрофорез лекарственных средств из объёма геля, интенсивность которого регулируется изменением приложенного напряжения. Электропроводимость и реологические свойства гелей можно увеличить введением углеродных нанотрубок, способных образовывать непрерывные сетчатые структуры в объеме геля [1]. Введение УНТ в гели способствует получению требуемых структурно – механических и физико-химических свойств. Вместе с тем, на реологические характеристики гелевых систем и процессы высвобождения активных компонентов. влияет и введение поверхностно-активных веществ (ПАВ). Для дальнейших исследований влияния УНТ на трансдермальную доставку активных компонентов под действием электрического поля необходимо было проанализировать совместное влияние ПАВ и УНТ на реологию карбомерных гелей.

Целью работы было получение гелей на основе редко сшитой полиакриловой кислоты, модифицированных углеродными нанотрубками (УНТ) и неионогенными поверхностно-активными веществами (НПАВ), и исследование их реологических и электропроводящих свойств.

В работе использованы многостенные УНТ марки «Таунит» (99,3% мас.) производства ООО «НаноТехЦентр» (г. Тамбов). В качестве НПАВ были использованы

децил глюкозид, оксиэтилированный изононилфенол АФ 9-10, Полаксомер 184, Твин-80. Диспергирование УНТ в воде и водных растворах ПАВ осуществлялось в ультразвуковой ванне УХ2100 при частоте 42 кГц и мощности 50 Вт. Содержание УНТ в объеме дисперсий было определено методом абсорбционной спектроскопии на спектрофотометре PD-303 по калибровочной кривой при длине волны $\lambda=500$ нм.

Гелевые системы получены с помощью гелеобразователя марки TEGO Carbomer 141. Золь-гель переход осуществляли введением триэтаноламина. Удельную электропроводимость гелей определяли на кондуктометре МАРК-603. Реологические свойства полученных гелевых композиций исследованы в режиме контролируемой скорости сдвига на ротационном вискозиметре «Reotron» при 25 °С.

Найдены оптимальные концентрации ПАВ и условия диспергирования УНТ. Получены положительные результаты по созданию гелевых систем с использованием дерматологически мягкого ПАВ – децил глюкозида без существенного воздействия на структуру геля и его реологические характеристики. Показано, что добавка УНТ приводит к существенному возрастанию электропроводимости гелей. При этом введение в гель УНТ, диспергированных в растворе неионогенных ПАВ, приводит к увеличению вязкости и тиксотропных свойств гелевых систем.

Представленные результаты указывают на то, что устойчивые дисперсии нанотрубок могут быть использованы как модификаторы реологических и электропроводящих свойств гелей при создании систем доставки лекарственных средств и биологически-активных веществ.

Список литературы

1. Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Шевцова С.А., Галяметдинов Ю.Г. Вестник Технологического университета, Т. 24. № 4. 2021. С. 18-22

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

Гостевская А.Н. Маркидонов А.В.

E-mail: lokon126@mail.ru

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк

Абляция, индуцированная, коротким лазерным импульсом является широко исследуемым явлением как в промышленности, так и в исследовательских институтах. Возможность использования энергии в очень локализованном объеме с помощью коротких лазерных импульсов является эффективным инструментом в экспериментах по сверлению, резке и сварке с использованием коротких лазерных импульсов [1 – 3]. В данном исследовании представлены результаты молекулярно-динамического компьютерного моделирования, демонстрирующие возможность структурного изменения, происходящего в металлах при высокотемпературном воздействии. Например, неравномерный нагрев металла может привести к формированию вблизи поверхности области сжатия, распространяющейся вглубь в виде волны давления, и при достижении ею противоположной границы при использовании свободных граничных условий способствовать эжектированию частиц. В ходе молекулярно-динамического исследования была построена молекулярно-динамическая модель, позволяющая исследовать процесс абляции, происходящей под воздействием ультракоротких лазерных импульсов низкой пиковой плотности излучения, а также выполнена оценка доли эжектированных частиц в результате нагрева расчетной ячейки. Установлено, что распределение изменения таких частиц в процессе нагрева и охлаждения системы близко к нормальному. Выполнена оценка пороговой температуры эжектирования частиц.

Список литературы

1. Mezzapesa F.P., Sibillano T. [ets] Direct investigation of the ablation rate evolution during laser drilling of high aspect ratio micro-holes. Vol. 8243. P. 7
2. S. Lo Turco, G. Nava [ets] Femtosecond laser micromachining for optofluidic and energy applications. Vol. 36. P. 102
3. Kuo J.-K., Huang P.-H. [ets] Molecular Dynamics Simulations of Crater Formation Induced by Laser Ablation on the Surface of α -Fe Substrate V.167. P. 03011.

МОРФОЛОГИЯ, СТРУКТУРА И СОСТАВ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ ВЫРАЩЕННЫХ В ПОРАХ SiO₂ НА КРЕМНИИ

¹Какулия Ю.С., ²Канюков Е.Ю., ¹Паринова Е.В., ¹Коюда Д.А., ³Сиваков В., ¹Канныкин С.В.,
⁴Ляйтнер Т., ⁴Овсянников Р., ¹Турищев С.Ю.

E-mail: kakuliia@phys.vsu.ru

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² *Московский институт стали и сплавов, Москва, Россия*

³ *Институт фотонных технологий им. Лейбница, Йена, Германия*

⁴ *Гельмгольц Центр Берлин, Берлин, Германия*

Наночастицы меди, выращенные в пористой матрице диоксида кремния, являются перспективными структурами для использования в сенсорах, основанных на эффекте поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света. Данное явление позволяет проводить диагностику химических и биологических молекул в таких областях как биомедицина и экология. При этом, для эффективного использования таких структур в сенсорах, необходимо понимание физико-химических и структурных свойств, в том числе с точки зрения развитой поверхности и границ раздела. Поэтому необходимо детальное изучение морфологии, состава, структуры наряду с атомным и электронным строением материалов, образующихся при формировании наночастиц меди в матрицах пористого SiO₂ на Si.

Образцы представляют собой медные структуры, сформированные в порах диоксида кремния на кремниевой подложке. Пористый слой SiO₂ формировали облучением структур быстрыми тяжелыми ионами с последующим жидкофазным химическим травлением. Массивы медных наноструктур производили химическим жидкофазным ростом из неорганических солей меди с использованием набора режимов, позволяющих варьировать степень заполнения пор SiO₂. Таким образом, было получено две серии образцов с различной степенью заполнения пор наночастицами, отличающихся средним размерами. В обоих случаях степень заполнения пор была: неполное покрытие дна поры, частичное заполнение поры, полное заполнение поры, переполнение объема поры с образованием глобул. Также были изучены образцы с планарным покрытием наночастицами меди, и с глобулами образованными на планарном покрытии.

Рентгеновскую дифракцию проводили на приборе ARL X`TRA в геометрии Брэгга-Брентанно. Съемку производили в режиме Θ - Θ , образцы помещали на кремниевые подложки с «нулевым фоном». Атомное и электронное строение было исследовано синхротронным методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) на канале вывода синхротронного излучения UE52_PGM CoESCA накопительного кольца BESSY II Гельмгольц Центра Берлин. Морфология поверхности изучалась методом сканирующей электронной микроскопии (SEM – Scanning Electron Microscopy) с помощью электронного микроскопа Carl Zeiss ULTRA 55 в Институте фотонных технологий в городе Йена, Германия. Также проводилась статистическая оценка размеров частиц формирующих структуру в программном пакете ImageJ.

Согласно данным растровой электронной микроскопии средний (преимущественный) размер наночастиц в первой группе от ~30 до ~65 нм соответственно заполнению пор, а во второй от ~50 до ~100 нм, соответственно заполнению пор.

Анализ Cu L_{2,3}-спектров XANES для описанных выше образцов позволил отметить, что для всех сформированных структур наблюдается изменение степени окисления, вплоть до формирования оксида, близкого к естественному, для случая второй серии образцов и полного заполнения поры или переполнения объема поры. Что можно объяснить различием в размерах кристаллов двух серий образцов, поверхность которых взаимодействует с кислородом.

По результатам исследований структуры были получены области когерентного рассеяния (размеров кристаллитов), которые показывают хорошее соответствие с результатом статистической обработки электронно-микроскопических данных с точки зрения объема массивов нанокристаллов.

Таким образом, полученные результаты позволяют говорить о том, что используемый подход в формировании структур с наночастицами меди позволяет эффективно получать компактные и размерно-селективные массивы металлических медных наночастиц с внутренним атомным упорядочением - нанокристаллов.

ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ КЕРАМИК YBCO В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РЕЖИМОВ СПЕКАНИЯ

Рабаданова А.Э., Гаджимагомедов С.Х., Палчаев Д.К., Эмиров Р.М.

E-mail: rabadanova.aida@mail.ru

Дагестанский государственный университет, г. Махачкала

Наиболее популярным и изученным является ВТСП на основе соединений YBa₂Cu₃O_{7-δ} (YBCO) [1,2], которые обладают высокими значениями температуры перехода в сверхпроводящее состояние (T_c ~ 92 K) и плотностью тока (J_c до ~10⁶ A/см², при 77 K).

Распространенным методом получения соединения YBCO является твердофазный синтез исходных оксидов при различных воздействиях. В работе данным методом были синтезированы микрокристаллические образцы YBCO с использованием оксидов Y₂O₃, BaCO₃ и CuO в эквивалентном соотношении. Перемешанные ручным помолотом в агатовой ступке в течение ~5 часов с добавлением C₂H₅OH, порошки прессовались при давлении ~50 МПа. Для оптимизации температуры и времени спекания они изготавливались в 7

этапов при температурах: 900 °С ÷ 936 °С в течение ~ 10÷25 часов и с кислородным насыщением при 450 °С ÷ 500 °С. Дальнейшее повышение температуры приводит к образованию жидкой фазы.

Рентгенограммы образцов, полученных после спекания при различных температурах, показали наличие у кристаллитов орторомбической сверхпроводящей фазой с высоким содержанием кислорода (не ниже 6,86). С повышением температуры плотность керамик повышалась от 2,6 г/см³ до ~5,8 г/см³, доля сверхпроводящей фазы увеличивается до 95% с признаками преимущественной ориентацией вдоль оси *c*.

Исследования температурной зависимости электросопротивления для образцов, полученных по ОКТ после спекания при 927 °С, 930 °С, 932 °С и 936 °С показаны на рисунке 1. Справа представлены результаты в относительных единицах удельного электросопротивления на ρ при 102 К для области сверхпроводящего перехода. Как видно, для образца при 927 °С характер зависимости $\rho(T)$ до ~225 К металлический, а ниже, до перехода в сверхпроводящее состояние (до ~110 К), – полупроводниковый. Учитывая высокое содержание СП фазы и кислорода, то полупроводниковый характер, вероятнее, связан с разупорядочением кислорода в образце. С повышением температуры спекания для всех образцов на зависимостях наблюдается металлический характер, т.е. можно предположить, что температуры спекания и обработки были достаточны для упорядочения кислорода в структуре. Увеличение температуры спекания на ~4 °С (с 932 °С до 936 °С) привело к повышению плотности образца на ~14% (до значения ~5.8 г/см³) и снижению значению удельного электросопротивления при 300 К в ~1.22 раз. При этом ширина перехода для этих двух образцов (932 °С и 936 °С) уменьшается на ~30% и составляет ~11.7 и ~8.3, соответственно. Наименьшая ширина перехода у образца после 930 °С и составляет 5.8 К, а наибольшая у образца после 927 °С (16 К).

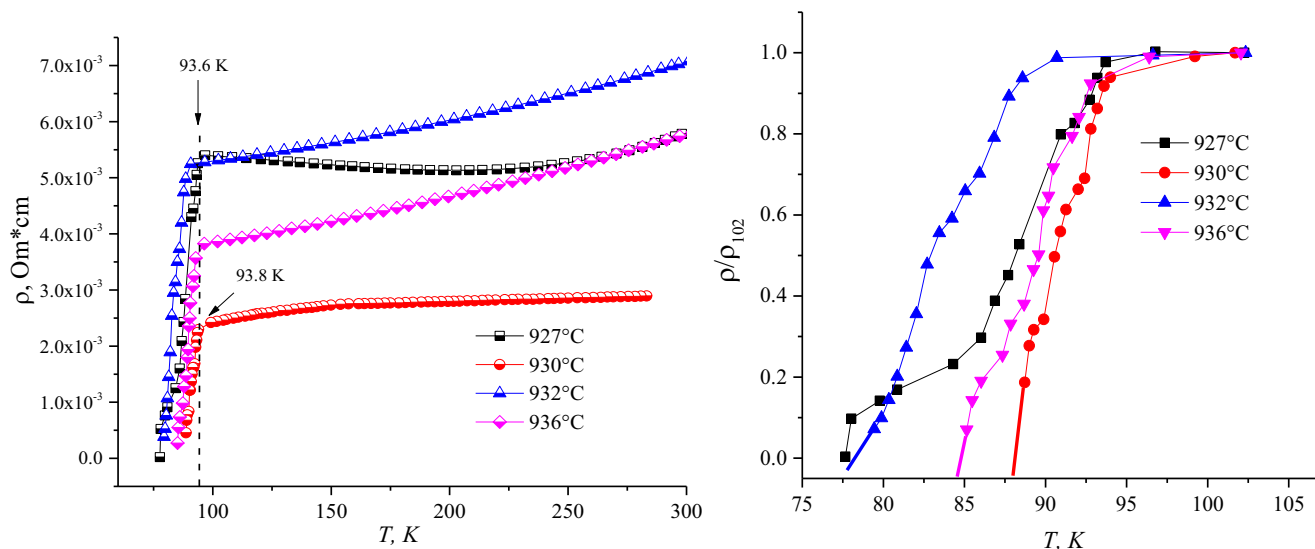


Рис. 1. Результаты исследования температурной зависимости удельного электросопротивления для образцов керамики, полученных по ОКТ при определенных температурах спекания

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ № 20-32-90170 и частично ГЗ FZNZ-2020-0002.

Список литературы

1. Božin E.S., Huq A., Shen B., Claus H., Kwok W.K., Tranquada, J. M. Charge-screening role of c-axis atomic displacements in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ and related superconductors // *Physical Review B*. – 2016. – V. 93(5). – P. 054523.
2. Keimer B., Kivelson S.A., Norman M.R., Uchida S., Zaanen J. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides // *Nature*. – 2015. – V. 518(7538). – P. 179-186.

МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ МНОГОСТУПЕНЧАТОЙ МЕЛЬНИЦЕЙ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МЕХАНОАКТИВАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

¹Жиров Д.К., ²Благодатский Г.А., ²Жданов В.С.

e-mail: zhirov_dmitriy@mail.ru, blagodatsky@gmail.com, vladik18rus@gmail.com

¹УдмФИЦ УрО РАН

²ФГБОУ ВО «ИжГТУ им. М.Т. Калашникова»

Предложен метод, позволяющий оценить качество получаемого продукта непосредственно в процессе его производства. На рисунке в общем виде представлена

иерархия проблемы повышения эффективности процесса механоактивации, разработанная для модернизации процессов измельчения сырья, посредством многоступенчатой мельницы.

Иерархия состоит из 5 уровней, представленных уровнем основной цели I_0 , уровнем подцелей I_1 , уровнем подсистем I_2 , обеспечивающих ее функционирование, уровнем параметров подсистем I_3 и параметров их элементов I_4 .

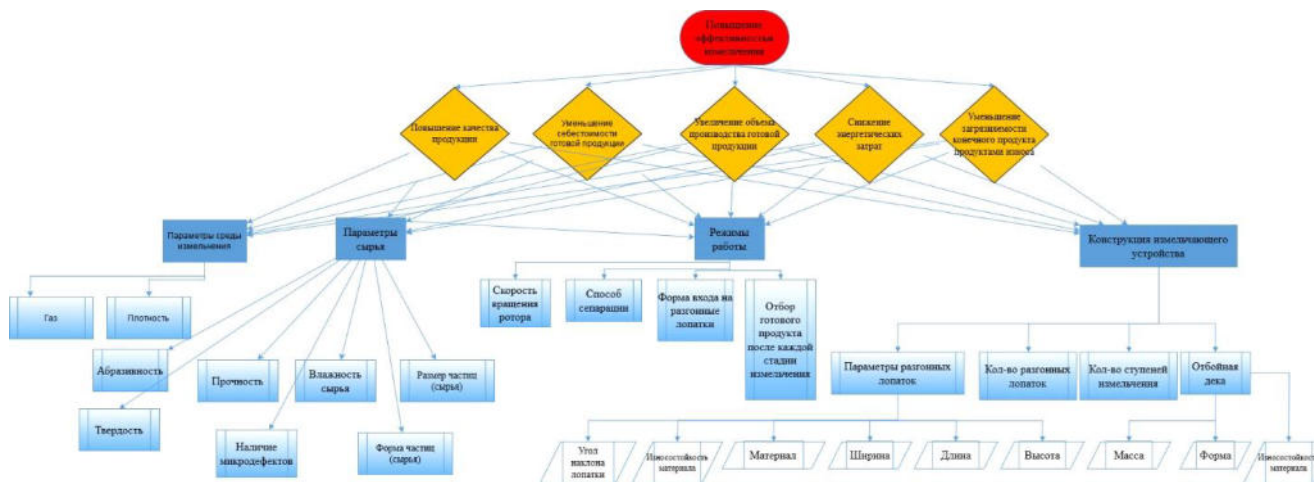


Рис. 1. Иерархия повышения эффективности процесса измельчения

Обозначим через Y – энергоэффективность процесса механоактивации; x_{11} – вид газа среды измельчения, x_{12} – плотность среды измельчения; x_{21} – абразивная способность, x_{22} – твердость, x_{23} – прочность, x_{24} – наличие микродефектов, x_{25} – влажность, x_{26} – форма частиц, x_{27} – размер частиц; x_{31} – скорость вращения ротора, x_{32} – способ сепарации, x_{33} – форма входа на разгонные лопатки, x_{34} – отбор готового продукта после каждой стадии измельчения; x_{41} – количество разгонных лопаток, x_{42} – количество ступеней измельчения; x_{51} – угол наклона лопатки, x_{52} – материал лопаток, x_{53} – износостойкость материала лопаток, x_{54} – ширина лопаток, x_{55} – длина лопаток, x_{56} – высота лопаток; x_{61} – масса отбойной деки, x_{62} – форма отбойной деки, x_{63} – износостойкость материала отбойной деки. Применим метод решающих матриц для вывода формулы оценки показателя энергоэффективности процесса механоактивации (1):

$$Y = \sum_{i=1}^{|I_1|} W_i \sum_{l=1}^{|I_2|} w_{il} \left(\sum_{j=1}^{|GE|} w_{gej} x_{1j} + \sum_{j=1}^{|RM|} w_{rmj} x_{2j} + \sum_{j=1}^{|M|} w_{mj} x_{3j} + \right. \\ \left. + (w_{c1} \sum_{j=1}^{|RT|} w_{rtj} x_{5j} + w_{c2} x_{41} + w_{c3} x_{42} + w_{c4} \sum_{j=1}^{|A|} w_{aj} x_{6j}) \right), \quad (1)$$

где W – влияние целей уровня I_1 , w_{il} – влияние элементов уровня I_2 на i -е цели уровня I_1 , W_{ge} – влияние параметров газовой среды, W_{rm} – влияние параметров сырья, W_m – влияние параметров режима работы, W_c – влияние параметров и элементов конструкции

измельчающего устройства, W_{rt} – влияние параметров разгонных лопаток, W_a – влияние параметров отбойной деки.

Применение полученной модели позволит: оценить потенциал энергоэффективности при получении конечного продукта с требуемым гранулометрическим составом; при изменении в процессе работы гранулометрического состава конечного продукта; оценить влияние параметров и режимов работы мельницы на процесс механоактивации; построить систему управления процессом механоактивации, основанную на достижении максимально-возможной энергоэффективности.

Список литературы

1. Жиров Д. К. Многоступенчатая центробежно-ударная мельница // Патент РФ на полезную модель № 153992, 2015.
2. Денисов В.А., Жиров Д.К. Моделирование процесса классификации частиц в электростатических сепараторах // Физическая химия и мезоскопия. – Ижевск 2010 том 12, №1.
3. Благодатский Г.А., М.М. Горохов, Д.И. Казанцев Создание математической модели анализа структуры аккредитационных показателей ВУЗа с применением метода анализа иерархий / Г.А. Благодатский, М.М. Горохов, Д.И. Казанцев // Вестник Ижевского Государственного Технического Университета. – 2010. – №2 (46). – С. 115 – 118.
4. Саати Т. Принятие решений. Метод анализа иерархий: Пер. с англ.- М.: Радио и связь, 1993. – 278 с.

ПЛАЗМОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Бельтюков А.Н., Чукавин А.И.

e-mail: chukavin@udman.ru

УдмФИЦ УрО РАН, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

Композитные мембраны, декорированные наночастицами активно изучаются благодаря множеству возможных путей их практического применения, начиная от сенсоров нового поколения и заканчивая разделением смесей жидкостей или газов [1]. Кроме того, такие объекты интересны в качестве модельных для исследования функционирования ионных каналов и клеточных мембран [2].

Мембраны пористого анодного оксида алюминия (ПАОА) широко применяются для получения массивов плазмонных наноструктур [3]. Преимущество мембран ПАОА здесь заключается в возможности получения структур на относительно больших площадях, порядка см^2 , дешевизне технологии, высокой производительности. Несмотря на популярность подхода, весь потенциал мембран ПАОА в данном применении вряд ли можно считать реализованным. Поскольку расстояние между порами и диаметр пор ПАОА может изменяться в широких пределах (от нм до мкм) в зависимости от режимов получения, этот подход особенно полезен для настройки частоты поверхностного плазмонного резонанса наночастиц Au путем изменения эффективной диэлектрической проницаемости окружения и настройки их микроструктуры. Так, в настоящей работе исследовалось влияние пористой структуры мембраны ПАОА на размеры и форму наночастиц золота осажденных методом вакуумного термического напыления.

Мембраны ПАОА были получены по описанной в литературе методике двухстадийного анодного окисления [4]. Использовались, соответственно, следующие электролиты и напряжения – 0,3М $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ (40 В), 0,3М H_2SO_4 (25 В). После чего проводилось удаление остаточного алюминия и барьерного слоя оксида [5], а затем часть образцов подвергалась травлению в кислой среде с целью увеличения диаметра пор. В результате была получена серия образцов мембран ПАОА с различной пористой структурой, на которые вакуумным термическим напылением была нанесена тонкая пленка золота (толщиной 7-10 нм).

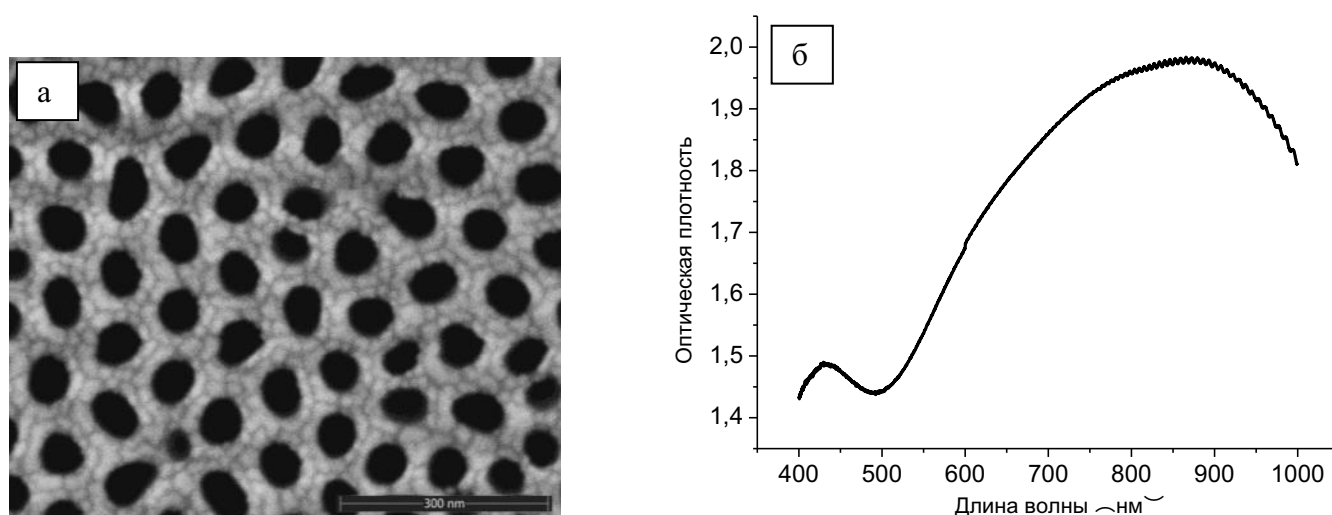


Рис.1. СЭМ-изображение мембраны ПАОА с напыленной пленкой золота (7-10 нм) (а) и спектр оптической плотности данного образца (b).

На Рис.1а представлено изображение сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) образца с напыленной пленкой золота. Видно, что пленка повторяет морфологию мембраны, но при этом является мелкозернистой, с размером зерна от 10-30 нм. На

Рис.1б представлен спектр оптической плотности с широкой полосой плазмонного резонанса в диапазоне длин волн, примерно от 550 до 1000 нм. Положение пика и его ширина соответствует данным из литературы для гранулированных золотых пленок. На Рис.2а,б представлены СЭМ-изображение и спектр оптической плотности, соответственно, для того же образца подвергнутого термическому отжигу при температуре 400 °С в течение 2 часов в атмосфере аргона. В результате отжига на поверхности мембраны образовались наночастицы золота, при этом максимум плазмонного резонанса сместился в область примерно 560 нм, а ширина пика на полувысоте уменьшилась до 100 нм. По построенным распределениям по размерам частиц, было выявлено, что после отжига образуются наночастицы условно двух размеров: мелкие, порядка 8 нм, и крупные – около 25 нм.

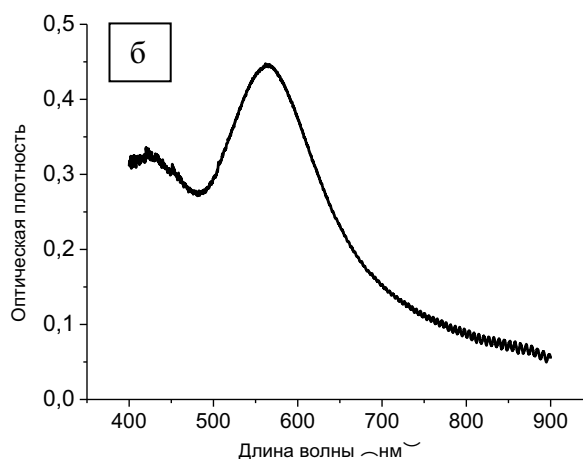
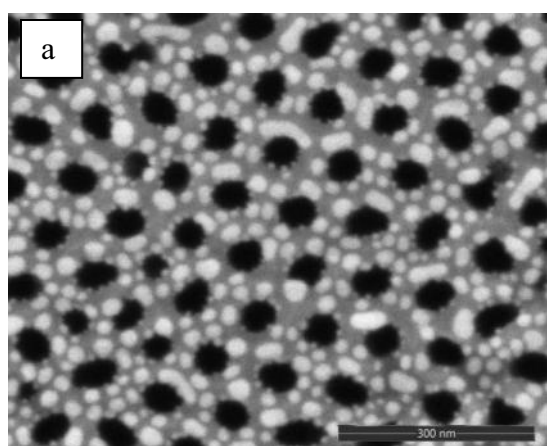


Рис.2. СЭМ-изображение мембраны ПАОА с напыленной пленкой золота после термического отжига при температуре 400 °С в течение 2 ч в атмосфере Ar (а) и спектр оптической плотности данного образца (б).

Таким образом, в работе было показано, что изменение морфологии золотого покрытия, произошедшее вследствие термического отжига, значительно влияет на оптические свойства образцов. Несмотря на то, что размеры зёрен в золотой плёнке до отжига были сопоставимы с размерами частиц, сформировавшихся в результате термообработки, форма и положение плазмонного пика на спектре оптической плотности существенно меняется. Полученный результат можно объяснить изменением эффективной диэлектрической проницаемости окружения частиц, а также изменением их формы.

Список литературы

1. Mark I Stockman et al. J. Opt., 2018, V.20, P.043001
2. Bagolini, A.; Correale, R.; Picciotto, A.; Di Lorenzo, M.; Scapinello, M. Membranes 2021, 11, 74.

3. Wen, R. Xu, Y. Mi, and Y. Lei, Nat. Nanotechnol., 2017, V.12, P.244–250.
4. Masuda H., Fukuda K. Science., 1995, V. 268, 5216 – P.1466-1468.
5. Song C.F., Shi W., Jiang H.R., Tu J., Ge D.T. Journal of Membrane Science. 2011. V.372. N.1-2. P.340-345.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ (БИО)СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Комкова М.А., Карякин А.А.

e-mail: mkomkova@analyt.chem.msu.ru

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Более 90% используемых сегодня биосенсоров содержат в качестве биораспознающего элемента ферменты оксидазы, которые, окисляя субстрат, восстанавливают O_2 до H_2O_2 . Максимальной чувствительности и наименьших пределов обнаружения субстрата можно добиться, осуществляя определение выделяющегося в ходе ферментативной реакции H_2O_2 . Наиболее чувствительным и селективным методом определения H_2O_2 является низкопотенциальная амперометрия с помощью электродов, модифицированных гексацианоферратом железа (берлинской лазурью, БЛ) [1].

Берлинская лазурь является единственным электрокатализатором восстановления H_2O_2 в ряду гексацианоферратов (ГЦФ) переходных металлов, а незначительная каталитическая активность ГЦФ Ni, Co, Cu обусловлена присутствием БЛ в их структуре в качестве дефектов [2]. Использование каталитически неактивных ГЦФ в качестве матрицы для БЛ позволяет синтезировать электрокаталитические покрытия с рекордной операционной стабильностью в ходе непрерывной детекции миллимолярных концентраций пероксида водорода в нейтральных pH.

Каталитически синтезированные наночастицы (НЧ) БЛ обладают характеристиками, присущими природным пероксидазам: высокой специфичностью и высокой каталитической активностью в реакции восстановления H_2O_2 в нейтральных pH [3]. Константа скорости-лимитирующей стадии для наиболее быстрых восстанавливающих субстратов, пирогаллола и ферроцианида, в 100 раз превосходит таковую для пероксидаз ($k_2 \approx (1-2) \cdot 10^8 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$) [4]. Высокие скорости каталитической реакции с участием НЧ БЛ объясняются большим числом активных центров на поверхности и их равнодоступностью.

Ультравысокая активность и стабильность «искусственной пероксидазы» делает возможным ее применение в качестве более надежного и совершенного аналога природного фермента. Так, со-иммобилизация оксидаз с НЧ БЛ позволяет создать биосенсор типа энзим-нанозим с рекордными чувствительностью и операционной стабильностью [5]. Помимо этого, НЧ могут быть использованы в качестве универсальных электрокаталитических меток для ДНК-сенсоров [6]. Функционирование (био)сенсорных систем на основе БЛ в режиме генерации мощности позволяет не только отказаться от использования потенциостатических схем в пользу амперметра, но и обеспечивает более точное и правильное определение концентрации за счет увеличения соотношения сигнал/шум на порядок [7]. Рекордные аналитические характеристики (био)сенсоров на основе покрытий и НЧ БЛ, а также возможность работы в режиме генерации мощности открывают широкие перспективы создания носимых электроаналитических устройств для неинвазивной диагностики.

Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ, грант 21-73-10123.

Список литературы

1. Karyakin A.A. // Curr Opin Electrochem, 2017, 5(1), p. 92.
2. Sitnikova N.A., Komkova M.A., Karyakin A.A. et al.// Anal. Chem, 2014, 86 (9), p. 4131.
3. Komkova M.A., Karyakina E.E., Karyakin A.A.// JACS, 2018, 140, p. 11302.
4. Komkova M.A., Karyakin A.A. et al.// J. Phys. Chem. Lett., 2021, 12, p. 171.
5. Komkova M.A., Andreeva K.D., et al.// ChemElectroChem, 2021, 8, p.1117.
6. Shavokshina V.A., Komkova M.A., et al.// ACS Appl. Polym. Mater. 2021, 3(3), p. 1518.
7. Komkova M.A., Karyakin A.A. et al.// Anal. Chem., 2017, 89(12), p. 6290.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АСФАЛЬТОСМОЛОПАРАФИНОВЫХ ОТЛОЖЕНИЙ В СКВАЖИНЕ

Титова А.В., Макаров С.С.

e-mail: titovospace@ya.ru

УдмФИЦ УрО РАН, г.Ижевск

Аннотация: тема доклада посвящена исследованию процесса образования асфальтосмолопарафиновых отложений (АСПО) в скважине при использовании математической модели сопряженного теплообмена при ламинарном движении

нефтегазоводяной среды. Рассматривается режим работы скважины, при котором подъем среды на поверхность осуществляется за счет энергии пласта. Результаты математического моделирования позволяют провести оценку образования АСПО отложений при заданном термобарическом состоянии скважины.

Ключевые слова: сопряженный теплообмен, пограничный слой, образование асфальтосмолопарафиновых отложений в скважине, ламинарное движение жидкости.

Основным компонентом АСПО являются парафины, растворенные в нефтегазоводяной среде, содержание которых может достигать до 70% в зависимости от расположения месторождения. Данные отложения нередко осложняют эксплуатацию нефтяных скважин, повышая гидравлическое сопротивление, что в свою очередь может стать причиной аварии [1].

Задача решается в двухмерной осесимметричной постановке. Математическая модель движения газожидкостной среды построена на основе уравнений пограничного слоя и состоит из уравнений количества движения, неразрывности, энергии, переноса парафина.

Система уравнений решается методом конечных разностей [2]. Граничные условия и данные для численного моделирования приведены в [3]. Для определения поля скорости и нахождения градиента давления использован алгоритм Л.М. Симуни.

Ни рисунке 1 приведен профиль скорости течения нефтегазоводяного флюида в скважине. Расчеты приводятся для участков высотой 1 - 10 м, 2- 20 м, 3 -25 м.

Видно, что на участке протяженностью до 10 м происходит развитие начального - профиль скорости 1. При дальнейшем движении среды до 25 м происходит изменение теплофизических свойств среды от температуры, приводящим к изменению профиля скорости - профиль 2 и профиль 3. При этом скорость у внутренней поверхности трубы снижается, а оси трубы возрастает более значительней, чем при изотермическом течении.

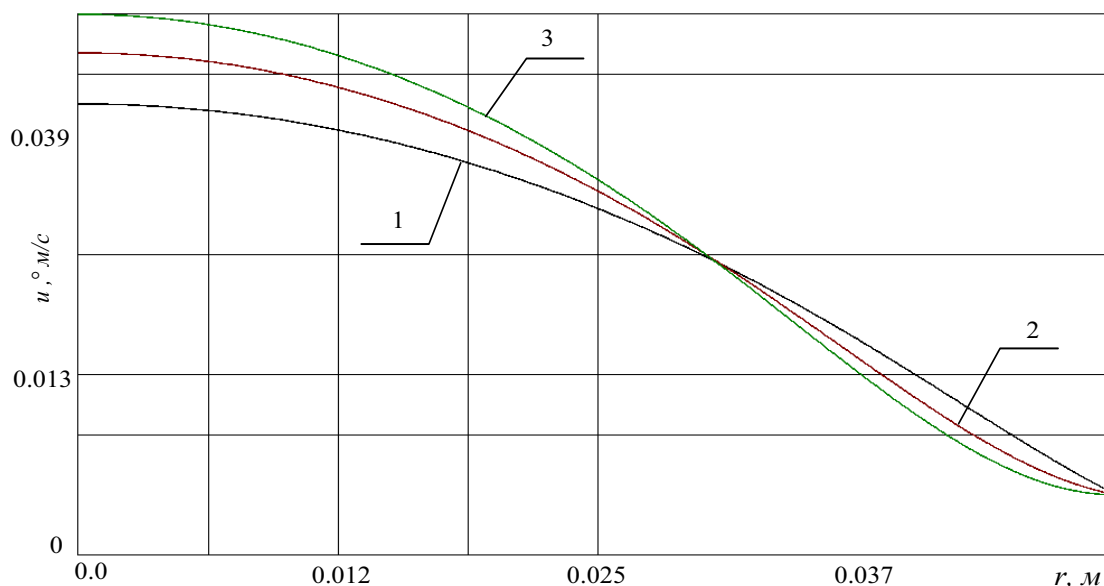


Рис. 1. Профиль скоростей течения нефтегазоводяной среды в скважине

На рисунке 2 приведено распределение массовой концентрации парафина в потоке нефтегазоводяной среды.

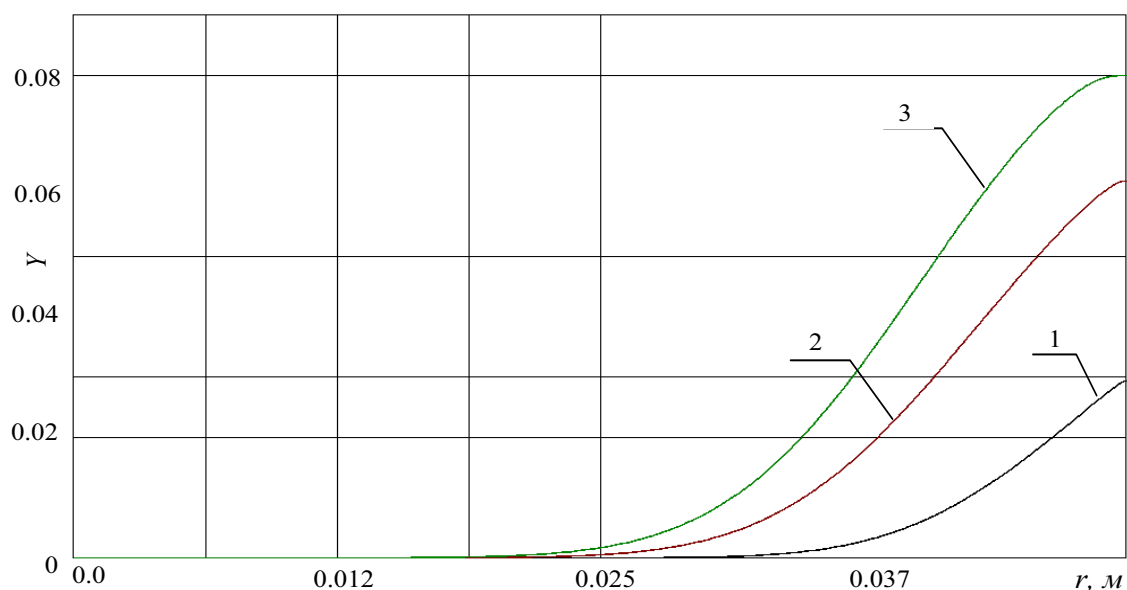


Рис. 2. Распределение массовой концентрации парафина в нефтегазоводяной среде

Видно, что рост доли парафина в потоке флюида наблюдается в направлении от внутренне стенки к оси трубы и согласуется с изменением поля температуры в радиальном направлении.

Таким образом предложенная математическая модель, позволяет проводить численные исследования термобарических характеристик в нефтедобывающей скважине и оценивать интенсивность образования парафиновых отложений.

Список литературы

1. Покрепин, Б.В. Разработка нефтяных и газовых месторождений / Б.В. Покрепин - Ростов на Дону: Феникс, 2015. 318 с.
2. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача М.: Едиториал УРСС. 2003. 784 с.
3. Makarov, S.S., Alies, M.Y. Heat exchange numerical modelling while cooling a higherature metallic cylinder by water and air medium flow // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering Volume 450, Issue 3, 30 November 2018.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Т.Ming	111	Валеев Р.Г.	9, 89
Үертүкһәмед	111	Велигжанин А.А.	18
Аблакатов А.М.	9	Величко К.Е.	38
Абрамов В.А.	130	Волков А.С.	69
Авакян Л.А.	18, 102, 110	Волков М.Ю.	122
Аверкиев И.К.	77, 80, 91	Гаджиев М.Х.	20
Александров Н.В.	11	Гаджимагомедов С.Х.	20, 43, 68, 134
Алексеев Р.О.	18	Гайсин А.У.	73, 124
Алиханов Н.М.	20, 43, 68	Галяметдинов Ю.Г.	118, 128, 130
Антипов С.С.	13	Гатауллин А.Р.	130
Аргунова Т. С.	24	Гильмутдинов В.Ф.	82
Артюхов В.Г.	45	Гильмутдинов Ф.З.	27
Афзал А.М.	63	Голковский М.Г.	87
Базлов А.И.	39	Гончаров О.Ю.	89
Бакиева О.Р.	28, 47, 80	Гостева Е.А.	11, 57
Барков К.А.	39	Гостева Е.К.	84
Барышев О.Б	89, 91	Гостевская А.Н.	131
Беликов Е.А.	13	Григорьева Е.А.	22
Белослудцева А.А.	91	Грызунова Н.Н.	61
Бельтюков А.Н.	36, 60, 138	Гудкина Ж.В.	24
Бельтюков Я.М.	16	Гуткин М. Ю.	24
Беляков А.Н.	31	Добаткин С.В.	31
Благодатский Г.А.	136	Добышева Л.В.	29
Богданова С.А.	120, 123, 130	Дорошенко А.В.	69
Бодякова А.И.	31	Дурыманов В.А.	102
Бойков Н.И.	93	Дымников А.Б.	84
Болдырева Е.В.	36	Егорова Е.Э.	95
Бочвар Н.Р.	31	Елькин И.А.	89, 91
Бугаев А. В.	15	Еремина М.А.	27, 80,
Бугаев Л.А.	18, 102, 110	Ермакова А.М.	18, 102, 110
Буйлов Н.С.	39	Жданов В.С.	136
Булатов Д.Л.	33	Жиров Д.К.	75, 136

Завражин Д.А.	57	Ласточкин Д.А.	104
Зареченская А.А.	57	Лебедев А.М.	65
Зиятдинова Р.М.	128	Лебедев В.Г.	98
Золотухин Д.С.	60	Лекомцева А.А.	29
Зонов Р.Г.	26, 33	Леньшин А.С.	38, 60
Иванов К.Е.	41	Ломаев С.Л.	105
Ивков С.А.	39	Ломаева С.Ф.	115
Игнатъев А.Ю.	71	Ляйтнер Т.	132
Ильичев М.В.	20	Магомедов К.Э.	43
Исаев Д.Д.	87	Макаров С.С.	142
Какулия Ю.С.	65, 132	Макарова А.	93, 111
Калмыков С.Н.	41	Мальцев С.А.	104
Калугин А.И.	113	Мамаду Тамбура	5
Канныкин С.В.	38, 132	Манякин М.Д.	93, 116
Канюков Е.Ю.	132	Маркидонов А.В.	131
Каратаев А.В.	73, 124	Мартыненко Н.С.	31
Картапова Т.С.	27	Маслаков К.И.	41
Карякин А.А.	140	Матвеева Н.С.	61
Карякин М.Е.	128	Мизеров А.М.	60
Князев А.А.	128	Милич В.Н.	95, 126
Когай В.Я.	49, 96	Милованов Е.	34
Колесникова Н.Н.	22	Минаков Д.А.	38
Комкова М.А.	140	Минеев А.М.	36
Конашук А. С.	15	Михеев Г.М.	26, 33, 49, 96
Конюх Д.А.	16	Михеев К.Г.	26, 33
Копытов В.А.	98	Могилева Т.Н.	33, 96
Коробейников С.А.	100	Морозов М.М.	31
Коршунов А.И.	107	Мурлиева Ж.Х.	20
Коюда Д.А.	13, 65, 93, 111, 132	Мухаметдинова С.Г.	107
Красницкий С. А.	24	Наразина Д.А.	45
Кривенцов В.В.	87	Нестеров Д.Н.	39
Крупин А.С.	128	Нечитайлова И.О.	110
Курганский С.И.	93, 116	Никонова Р.М.	103
Курзина Т.И.	102	Овсянников Р.	93, 111
Куркин Н.А.	69	Ольхов А.А.	22
Ларионова Н.С.	103	Ольшанникова С.С.	45

Осминкина Л.А.	65	Середин П.В.	60
Осокина А.С.	75	Сиваков В.	13, 111, 132
Палчаев Д.К.	20, 134	Сигаев В.Н.	18
Паринова Е.В.	13, 65, 93, 111, 132	Смирнов Д.	93, 111
Пелагина А.К.	111	Соболев В.Вал.	113
Перевощиков Д.А.	113	Созонова Н.М.	47
Петров В.Г.	41, 51	Соломонов А.В.	73, 124
Пешков Я.А.	38, 39	Срабионян В.В.	102, 110
Пислярук А.К.	13	Старков В.В.	11
Поздеев В.А.	115	Столбов К.С.	91
Пономарев И.В.	63	Стяпшин В.М.	26, 49
Поносова Е.Е.	110	Суксин Н.Е.	51
Попов А.А.	22	Сухарина Г.Б.	18, 102, 110
Потуданский Г.П.	39	Сысоева М.А.	123
Праслова Н.В.	13	Тетерин А.Ю.	41
Преображенская Е.В.	13	Тетерин Ю.А.	41
Прокопьева Т.В.	77	Тимиргазин М.А.	82
Просвирнин Д.В.	31	Титова А.В.	142
Путков А.Е.	41	Титова С.С.	65
Р.Овсянников	132	Томина Е.В.	69, 104
Рабаданов М.Х.	68	Тонких А.А.	93
Рабаданова А.Э.	20, 43, 134	Тригуб А.Л.	18
Радина В.Р.	116	Трусова Е.А.	63
Разбицкая Л.Е.	84	Тугбаева А.С.	126
Рыбакова А.И.	118	Туранов А.Н.	122
Рыбальченко О.В.	31	Турищев С.Ю.	13, 65, 67, 93, 111, 132
Рыбин Д.С.	36	Фатеев А.Е.	33, 96
Рыжков М.В.	41	Фатеева Е.С.	19
Савостина Л.И.	122	Филатова Е.О.	15, 19, 73, 124
Сайпулаев П.М.	20, 43	Хаметова Э.Ф.	28
Саутина Н.В.	118	Хацкевич Л.А.	26
Сахоненков С.С.	19	Холявка М.Г.	45
Свирко Ю.П.	96	Цурикова У.А.	65
Семенов А.А.	16	Чуvenкова О.А.	13, 65, 93
Семилетов А.М.	119	Чукавин А.И.	138
Сёмов Ю.Г.	39	Чулкина А.А.	89

Чумаков Р.Г.	65	Широбокова К.А.	82
Шайдуллина А.Ф.	122	Широков В.А.	126
Шаймухаметова И.Ф.	120	Щеголеватых Е.А.	45
Шаков А.А.	115	Эмиров Р.М.	20, 43, 68, 134
Шахгильдян Г.Ю.	18	Юраков Ю.А.	39
Шигабиева Ю.А.	123	Юсупов В.С.	31

ЦКП «ПОВЕРХНОСТЬ И НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ» УдмФИЦ УрО РАН



Тел: +7(3412)430163
E-Mail: ckp@udman.ru
Интернет: ckp.udman.ru





Оборудование для научных исследований:

- **STOE** для XRD
- **SIGRAY** для XAS, microXRF, 3D micro- и nanoXRM
- **OLIS** для оптической спектроскопии
- **STELAR** для FFC ЯМР релаксометрии
- **PHOTON ETC** для спектральной микроскопии
- **HOT DISK** для анализа теплопроводности

и многое другое...



ISBN 978-5-6047339-0-5



9 785604 733905