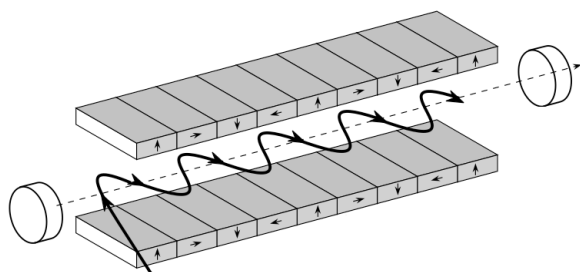


Воронежский государственный университет



ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ: ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

*Сборник тезисов
III Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 9—14 октября 2023 г.)*

Под общей редакцией
доктора физико-математических наук,
доцента *С. Ю. Турищева*



Воронеж
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
2023

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431
В93

Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования : сборник тезисов III Всероссийской молодежной конференции (г. Воронеж, 9—14 октября 2023 г.) / под общ. ред. С. Ю. Турищева. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2023. — 200 с. — ISBN 978-5-4446-1838-7. — Текст : непосредственный.

Сборник содержит тезисы устных докладов второй всероссийской молодежной конференции «Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования» (г. Воронеж, 9—14 октября 2023 года).

Конференция организована в рамках Проекта Воронежского государственного университета «Распределенная инфраструктура высокоточных методов диагностики в ультрамягкой рентгеновской области синхротронного излучения для функциональных материалов и наноразмерных структур, включая био-нано-гибридные, для перспективных технологий и технических систем: от образовательных технологий через фундаментальные научные исследования к практическому применению» Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019—2027 годы.

Основную структуру конференции составили устные доклады молодых учёных по следующим направлениям, связанным с развитием синхротронной диагностики материалов и наноразмерных структур для перспективных технологий и технических систем, включая принципиально новую природоподобную компонентную базу.

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431

ISBN 978-5-4446-1838-7

© ВГУ, 2023
© Изд. оформление.
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга», 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Аверкиев И. К., Бакиева О. Р. СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ EXAFS И EXELFS ДАННЫХ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ	16
Середин П. В., Голошапов Д. Л., Радам Али Обаид, Леньшин А. С. Буйлов Н. С., Мизеров А. М., Кукушкин С. А. РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УЛЬТРАТОНКИХ AlGaIn/ GaN ГЕТЕРОСТРУКТУР, ВЫРАЩЕННЫХ НА ГИБРИДНЫХ ПОДАТЛИВЫХ ПОДЛОЖКАХ SiC/porSi.....	18
Антипов С. С., Лиходзиевская М. В., Тарасова Д. В. СОЗДАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СУБСТАНЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОЛЛАГЕНОВ НА ОСНОВЕ ПЕРЕРАБОТКИ ШКУР ПРЕСНОВОДНЫХ ГИДРОБИОНТОВ	20
Бакина К. А., Сивков В. Н., Некипелов С. В., Петрова О. В., Скандаков Р. Н. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В 2p-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ ОКСИДА СКАНДИЯ Sc_2O_3	22
Барков К. А., Нестеров Д. Н., Терехов В. А., Хадырова С., Михайлова И. В., Моисеев К. М., Ивков С. А., Керсновский Е. С., Польшин И. В., Новолокина Н. В. АТОМНОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МАГНЕТРОННЫХ ПЛЕНОК W-Si И Nb-Si.....	23
Бельтюков А. Н., Кузьмина И. А., Чукавин А. И. СИНТЕЗ НАНОНИТЕЙ СЕРЕБРА В ПОРИСТОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ	26
Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Максимова Е. И., Радина В. Р. МОДИФИКАЦИЯ ПРАВИЛА УЭЙДА-МИНГОСА ДЛЯ ПОИСКА СТАБИЛЬНЫХ СТРУКТУР КРЕМНИЙ-МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЭНДОКЛАСТЕРОВ	29

Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Максимова Е. И., Дубровский О. И. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ГЕРМАНИЕВЫХ ЭНДОКЛАСТЕРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ VB ГРУППЫ	32
Буйлов Н. С., Шихалиев Х. С., Столповская Н. В. СТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК	33
Валеев Р. Г. АКТУАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИБОРНОЙ БАЗЫ И ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ЦКП «ПОВЕРХНОСТЬ И НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ» УдмФИЦ УрО РАН.....	36
Викленко И. А., Срабионян В. В., Дурыманов В. А., Гладченко-Джевелекис Я. Н., Раздоров В. Н., Рубаник Д. С., Авакян Л. А., Бугаев Л. А. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ИОНОВ (НАНОСТРУКТУР) СЕРЕБРА В НАТРИЕВО-СИЛИКАТНЫХ МАТРИЦАХ/СТЕКЛАХ.....	38
Буданов А. В., Котов Г. И., Власов Ю. Н., Руднев Е. В., Голощанов Д. Л., Белоусова Е. Н. ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА ПЛЁНОК В СИСТЕМЕ Cu-Sn-S МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА.....	39
Гайсин А. У., Сахоненков С. С., Филатова Е. О. РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА МЕЖСЛОЕВЫХ ОБЛАСТЕЙ МНОГОСЛОЙНЫХ ИНТЕРФЕРЕЦИОННЫХ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ БЕРИЛЛИЯ ДЛЯ ЭУФ ДИАПАЗОНА.....	41
Гогина О. А., Петров Ю. В., Вывенко О. Ф., Kovalchuk S., Bolotin K. ЛОКАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЕЙ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА	44

Голощапов Д. Л., Емельянова А. А., Ипполитов Ю. А., Буйлов Н. С., Кашкаров В. М., Середин П. В. БИОМИМЕТИЧЕСКИЕ ГИБРИДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ БИОИНСПИРИРОВАННОГО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА	46
Гончар К. А. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР И ИХ СЕНСОРНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ.....	49
Гревцева И. Г., Кондратенко Т. С., Татьянанина Е. П., Хашеми Джама Хан ИК СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ОКРУЖЕНИЯ ГИДРОФИЛЬНЫХ И ГИДРОФОБНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PbS	51
Джалолиддинзода М., Биктеев А. А., Маренкин С. Ф. ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ПОЛУПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК GASB-MNSB	54
Дмитриев В. О., Шматко В. А., Ершов И. В., Бржезинская М., Яловега Г. Э. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ MeO (Me = Ni, Cu) С ГРАФЕНОВЫМ СЛОЕМ В КОМПОЗИТЕ MeO _x /MWCNT (Me = Ni, Cu) НА ОСНОВЕ XANES СПЕКТРОСКОПИИ	56
Голощапов Д. Л., Емельянова А. А., Ипполитов Ю. А., Буйлов Н. С., Кашкаров В. М., Шихалиев Х. С., Потапов А. Ю., Середин П. В. ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ И СОСТАВА НА ОСАЖДАЕМЫЕ ОРГАНО/ МИНЕРАЛЬНЫЕ ПОКРЫТИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЁВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ЭМАЛИ	58
Еремеев К. А., Курило Н. А., Середин П. В., Голощапов Д. Л., Буйлов Н. С., Леньшин А. С., Мизеров А. М., Шарофиддинов Ш. Ш. РАМАНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В СЛОЯХ СВЕРХСТРУКТУРЫ GaN/AlN, ВЫРАЩЕННОЙ НА КАРБИДЕ КРЕМНИЯ.....	61

Ерохина А. А., Назаровская Д. А., Гюппенен О. Д., Домнин П. А., Циняйкин И. И., Ермолаева С. А., Гончар К. А., Осминкина Л. А. КОМПОЗИТНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ДЕКОРИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА И ЗОЛОТА КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ БАКТЕРИЙ.....	64
Захарченко Т. К., Исаев В. В., Авдеев М. В., Гулин А. А., Волыхов А. А., Иткис Д. М., Яшина Л. В. МЕХАНИЗМ МЕЗОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРОКСИДА ЛИТИЯ В ХОДЕ РАЗРЯДА ЛИТИЙ-КИСЛОРОДНОГО АККУМУЛЯТОРА.....	66
Звягин А. И., Чевычелова Т. А., Овчинников О. В. ПРОЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТОВ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СПЕКТРАЛЬНЫХ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВАХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S В ПРИСУТСТВИИ ЗОЛОТЫХ НАНОСТЕРЖНЕЙ.....	67
Тетерин Ю. А., Рыжков М. В., Путков А. Е., Маслаков К. И., Тетерин А. Ю., Иванов К. Е., Калмыков С. Н., Петров В. Г. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В EsO_2	69
Тетерин Ю. А., Путков А. Е., Рыжков М. В., Маслаков К. И., Тетерин А. Ю., Иванов К. Е., Калмыков С. Н., Петров В. Г. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ FmO_2	70
Ивков С. А., Домашевская Э. П., Барков К. А. СТРУКТУРНЫЕ, ТРАНСПОРТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛИРОВАННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_x(\text{TiO}_2)_{100-x}$	72
Середин П. В., Голощапов Д. Л., Кашкаров В. М., Лукин А. Н., Пешков Я. А., Ипполитов И. Ю., Ипполитов Ю. А., Vongsivut J., Chae B., Freitas R. ИЗМЕНЕНИЯ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ ЗУБНОЙ БИОПЛЕНКИ У ЛЮДЕЙ С РАЗЛИЧНОЙ КАРИОГЕННОЙ СИТУАЦИЕЙ.....	74

Керсновский Е. С., Польшин И. В., Терехов В. А., Барков К. А., Нестеров Д. А., Ивков С. А., Ситников А. В. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК Cu-Si, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО- ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ	75
Ким К. Б., Черненко С. С., Нифталиев С. И., Леньшин А. С. ПОЛУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПЛЕНКИ ОКСИДА ОЛОВА НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ МЕТОДОМ ТЕРМИЧЕСКОГО ВАКУУМНОГО НАПЫЛЕНИЯ	78
Комаров Г. Д., Ионов А. М., Протасова С. Г., Можчи́ль Р. Н., Рыбченко О. Г. РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФАЗ ШЕВРЕЛЯ.....	80
Корусенко П. М., Храмов Е. В., Петрова О. В., Верещагин А. А., Левин О. В., Сивков Д. В., Бакина К. А., Скандаков Р. Н., Гаас В. А. и Виноградов А. С. ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ УЗЛОВ $[\text{NiN}_2\text{O}_2]$ В КОМПЛЕКСАХ $[\text{Ni}(\text{Schiff})]$ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С СИНХРОТРОННЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ	83
Кривенцов В. В. РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ (XANES/EXAFS) В «ЖЕСТКОМ» ДИАПАЗОНЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ В ЦКП СЦСТИ	85
Кривенцов В. В., Байрамуков В. Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ	86
Кривенцов В. В. ИЗУЧЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОВ ЦИРКОНИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ	87

Кривенцов В. В. ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ НАНОСИСТЕМ ПЛАТИНОИД/УГЛЕРОД МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ	89
Крюков Р. Н., Данилов Ю. А., Лесников В. П.¹, Зубков С. Ю. ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА В УСЛОВИЯХ СВЕРХВЫСОКОГО ВАКУУМА НА СОСТАВ ТОНКИХ СЛОЕВ GaAs, ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ	90
Кулаев К. Д., Сухарина Г. Б., Гладченко-Джевелекис Я. Н., Ермакова А. М., Авакян Л. А., Придченко В. В., Бугаев Л. А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ CU-MOR С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ XANES СПЕКТРОСКОПИИ В СОЧЕТАНИИ С МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....	92
Курило Н. А., Середин П. В., Буйлов Н. С., Голощапов Д. Л., Ивков С. А., Арсентьев И. Н., Нащекин А. В. ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛУПОЛЯРНОГО НИТРИДА ГАЛЛИЯ, ВЫРАЩЕННОГО НА m-САПФИРЕ ХЛОРИДНОЙ ГАЗОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЕЙ.....	94
Лавлинская М. С., Файзуллин Д. А., Сорокин А. В., Холявка М. Г., Зуев Ю. Ф., Артюхов В. Г. ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ — ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ АНАЛИЗА КОНФОРМАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ ФЕРМЕНТОВ	97
Лаврухина С. А., Сысоев В. И., Федоренко А. Д., Семушкина Г. И., Булусева Л. Г., Окотруб А. В. ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТИАКАЛИКСАРЕНОВ НА СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТКА/ОУНТ ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	99
Леньшин А. С. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ.....	102

Лиходзиевская М. В., Тарасова Д. В., Антипов С. С. ОСОБЕННОСТИ МОРФОЛОГИИ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕНА ПРЕСНОВОДНЫХ ГИДРОБИОНТОВ.....	103
Макаров П. А., Некипелов С. В., Сивков В. Н. РАЗРАБОТКА ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ NEXAFS-СПЕКТРОВ НА ОСНОВЕ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА FDMNES.....	105
Мануковская Д. В., Сидоров Н. В., Палатников М. Н., Шевырев С. Л. ИССЛЕДОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ В ОПТИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ НА ПРИМЕРЕ АНАЛИЗА ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЦИНКОМ	107
Манякин М. Д., Курганский С. И. DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ NbO ₂	110
Назаровская Д. А., Гончар К. А., Домнин П. А., Гюппенен О. Д., Ерохина А. А., Ван М., Циняйкин И. И., Ермолаева С. А., Осминкина Л. А. БИМОДАЛЬНЫЙ ОПТИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ДЕКОРИРОВАННЫХ ЗОЛОТОМ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ДИАГНОСТИКИ БАКТЕРИЙ.....	111
Недоедкова О. В., Мясоедова Т. Н., Калусулингам Р., Яловега Г. Э. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА Ni-PANI@GO ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ	113
Некипелов С. В., Петрова О. В., Сивков Д. В., Бакина К. А., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н. РАДИАЦИОННОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ И БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	116

Нестеров Д. Н., Барков К. А., Терехов В. А., Ивков С. А., Керсновский Е. С., Польшин И. В., Занин И. Е., Гречкина М. В., Ситников А. В.	
ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК Ag-Si С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ	117
Нечушкин Ю. Б., Риль А. И., Маренкин С. Ф.	
ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ CD_3AS_2 МЕТОДОМ ВЕРТИКАЛЬНОГО ХИМИЧЕСКОГО ГАЗОВОГО ТРАНСПОРТА	119
Николичев Д. Е., Крюков Р. Н., Зубков С. Ю.	
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР СОВРЕМЕННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ.....	122
Петрова О. В., Некипелов С. В., Бакина К. А., Сивков Д. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н.	
ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ БИОАПАТИТА	125
Пешков Я. А., Леньшин А. С., Черноусова О. В., Канныкин С. В., Минаков Д. А.	
ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТРАВЛЕНИЯ НА МОРФОЛОГИЮ И СОСТАВ ПОВЕРХНОСТИ МНОГОСЛОЙНОГО ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ.....	127
Полевик А. О., Ефимова А. С., Пресняков И. А., Соболев А. В., Соболева Я. С., Тетерин Ю. А., Верченко В. Ю., Лысенко К. А., Шевельков А. В.	
СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В СИНТЕТИЧЕСКИХ ЖЕЛЕЗО-ЗАМЕЩЕННЫХ КОЛЮЗИТАХ С ТАНТАЛОМ.....	128

Польшин И. В., Барков К. А., Керсновский Е. С., Терехов В. А., Нестеров Д. Н., Ивков С. А., Ситников А. В. ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ МЕДИ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ИОННО-ЛУЧЕВЫХ ПЛЕНОК Cu-Si ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА	130
Потуданский Г. П., Курганский С. И. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ГЦК-КОБАЛЬТА	133
Радина В. Р., Курганский С. И. МОДЕЛИРОВАНИЕ L_3 -КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕДИ	135
Рогова А. В., Щугорева И. А., Томилин Ф. Н., Кичкайло А. С. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АПТАМЕРОВ И БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЯ БИОСЕНСОРИКИ: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ	137
Рубаник Д. С., Срабионян В. В., Ветчинников М. В., Дурыманов В. А., Викленко И. А., Авакян Л. А., Шахгильдян Г. Ю., Сигаев В. Н., Дмитриев Ю. Ю., Бугаев Л. А. УСИЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ В ОКРЕСТНОСТЯХ НАНОЧАСТИЦ И ИХ АГЛОМЕРАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ Ag, Au, Rb В СТЕКЛАХ	139
Некипелов С. В., Жук Н. А., Петрова О. В., Сивков Д. В., Бакина К. А., Скандаков Р. Н., Рутковский В. О., Лебедев А. М., Чумаков Р. Г., Сивков В. Н. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПИРОХЛОРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3D-МЕТАЛЛОВ.....	141
Сахоненков С. С., Смертин Р. М., Плешков Р. С., Полковников В. Н., Филатова Е. О. ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА И ПРОТЯЖЕННОСТИ ПЕРЕХОДНЫХ ОБЛАСТЕЙ В КОРОТКОПЕРИОДНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛАХ	143

Семушкина Г. И., Федосеева Ю. В., Сысоев В. И., Макарова А. А. СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАТРИЯ С АЗОТСОДЕРЖАЩИМ ФТОРИРОВАННЫМ ГРАФИТОМ.....	145
Середин П. В., Голощапов Д. Л., Буйлов Н. С., Кашкаров В. М., Шихалиев Х. С., Потапов А. Ю., Ипполитов Ю. А., Freitas R. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ГИБРИДНОГО ИНТЕРФЕЙСА НА ОСНОВЕ ПОЛИДОФАМИНА МЕЖДУ ТКАНЬЮ ЗУБА И ДЕНТАЛЬНЫМ КОМПОЗИТОМ МЕТОДАМИ ИК И РАМАНОВСКОЙ МИКРОСПЕКТРОСКОПИИ НА СУБМИКРОННОМ УРОВНЕ	146
Сивков В. Н., Бакина К. А., Некипелов С. В., Петрова О. В., Сивков Д. В., Скандаков Р. Н. ПЕРСПЕКТИВЫ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ И БИОМАТЕРИАЛОВ НА СТАНЦИИ НАНОФЭС КИСИ	148
Скандаков Р. Н., Некипелов С. В., Петрова О. В., Сивков В. Н., Бакина К. А. NEXAFS И XPS ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ	149
Скоробогатов М. С., Терехова М. А., Черниговский И. Л., Антипов С. С. ОЦЕНКА СПОСОБНОСТИ БАКТЕРИАЛЬНОГО БЕЛКА DPS К АЛЬТЕРНАТИВНОМУ НАСЫЩЕНИЮ ИОНАМИ МЕТАЛЛОВ IN VITRO.....	150
Смирнов В. А., Борщ Н. А., Манякин М. Д., Курганский С. И. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНОГО СКУТТЕРУДИТА CoSb_3	152
Сухарина Г. Б., Ермакова А. М., Гладченко-Джевелекис Я. Н., Кулаев К. Д., Поносова Е. Е., Авакян Л. А., Прядченко В. В., Бугаев Л. А. РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНАЯ ДИАГНОСТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МЕДНЫХ ЦЕНТРОВ ЦЕОЛИТОВ.....	154

Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Рыбкин А. Г. СПЕКТРОМИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФЕРРИМАГНИТНОГО ГРАФЕНА НА ПОДЛОЖКЕ AU/CO(0001)....	155
Тепляков Е. А., Яржемский В. Г., Ильин Е. Г. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ОКСИХЛОРИДОВ ТАНТАЛА И НИЗШИХ ОКСИДОВ МОЛИБДЕНА	157
Тинаева А. Е., Козадеров О. А. МОРФОЛОГИЯ, ХИМИЧЕСКИЙ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЦИНК-НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ: РОЛЬ ДОБАВКИ ГЛИЦИНА	157
Фатеев К. А., Чувенкова О. А., Рябцев С. В., Турищев С. Ю. ОСОБЕННОСТИ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ SnO ₂	159
Федоренко А. Д., Коцун А. А., Семушкина Г. И., Николенко А. Д., Окотруб А. В., Булушева Л. Г. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ MOS ₂ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	161
Федотов И. А., Скороходов Е. В., Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С. СУБМИКРОННЫЕ ТУННЕЛЬНЫЕ МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ КОНТАКТЫ НА ОСНОВЕ СЛОЕВ CoFeB/MgO/CoFeB	162
Федотовская В. Д., Замай Т. Н., Лузан Н. А., Кошманова А. А., Кичкайло А. С. «УМНЫЙ НАНОСКАЛЬПЕЛЬ» ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ГЛИАЛЬНЫХ ОПУХОЛЕЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА.....	164
Фролов А. С. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ НА ОСНОВЕ MnBi ₂ Te ₄ : ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА	167
Леньшин А. С., Фролова В. Е., Ивков С. А., Домашевская Э. П. МИКРОСТРУКТУРНЫЕ И ГИДРОФИЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ ПОЛИМЕРА ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТ-ГЛИКОЛЯ С РАЗЛИЧНЫМИ РИСУНКАМИ 3D-ПЕЧАТИ	168

Хаметова Э. Ф., Бакиева О. Р. МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ EXAFS-СПЕКТРА BaTiO_3 , СОДЕРЖАЩЕГО ПЕРЕКРЫТИЕ СИГНАЛОВ Ti K.....	171
Холявка М. Г., Аргюхов В. Г. РАСЧЕТНЫЕ И ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ ГИБРИДНЫХ ФЕРМЕНТНЫХ ПРЕПАРАТОВ	172
Чевычелова Т. А., Звягин А. И., Смирнов М. С., Овчинников О. В. НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АССОЦИАТОВ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PbS/TGA И НАНОСТЕРЖНЕЙ ЗОЛОТА Au NRs	174
Черниговский И. Л., Скоробогатов М. С., Антипов С. С. ОЦЕНКА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ БЕЛКА DPS МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО СВЕТОРАСSEИВАНИЯ.....	175
Черных Ю. А., Вандышев Д. Ю., Антипов С. С., Наквасина М. А., Крысин М. Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЗОЛОТРИАЗИНОВ	177
Чирков К. С., Смирнов М. С., Овчинников О. В., Асланов С. В., Звягин А. И., Кондратенко Т. С., Хохлов В. Ю. ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ CORE-SHELL СИСТЕМ КТ PbS/PBSE	179
Чукавин А. И., Валеев Р. Г., Бельтюков А. Н., Кузьмина И. А. ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР СУЛЬФИДА ЦИНКА, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПРОЗРАЧНЫХ ПОДЛОЖКАХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ	180
Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Назин В. Г., Станкевич В. Г. РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДОВ IN-SITU И OPERANDO ИССЛЕДОВАНИЙ НА СТАНЦИИ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ «НАНОФЭС»	182
Голошапов Д. Л., Шапиро К. В., Нестеров Д. Н., Кашкаров В. М., Шихалиев Х. С., Потапов А. Ю., Середин П. В. ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОЛИДОФАМИН/НАНО ГИДРОКСИАПАТИТ.....	184

Широких Н. С., Николичев Д. Е., Крюков Р. Н., Дорохин М. В. ИЗМЕНЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА СИСТЕМ Si:Co ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ОТЖИГЕ	187
Яшина Л. В. СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В OPERANDO/IN SITU РЕЖИМЕ.....	188
Смирнов М. С., Кондратенко Т. С., Овчинников О. В., Гревцева И. Г., Чевычелова Т. А., Королев Н. В., Понявина А. Н., Тихомиров С. А., Hong Minh Pham, Thanh Binh Nguyen ВРЕМЯ-РАЗРЕШЁННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ	189
Титова С. С., Осминкина Л. А., Какулия Ю. С., Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Кудрявцев А. А., Парина Е. В., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю. ПРИМЕНЕНИЕ ПОДЛОЖЕК РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ СТРУКТУР «КЛЕТКИ МЛЕКОПИТАЮЩИХ — НАНОЧАСТИЦЫ КРЕМНИЯ» МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.	191
Осминкина Л. А., Титова С. С., Кудрявцев А. А., Турищев С. Ю. МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ И СИНХРОТРОННОЙ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ С ЖИВЫМИ КЛЕТКАМИ: НА ПУТИ К РАЗРАБОТКЕ БИОГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР	193
Зубавичус Я. В., Левичев Е. Б., Бухтияров В. И. ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП «СКИФ»: СТАТУС СОЗДАНИЯ И НАУЧНАЯ ПРОГРАММА	195
Рябцев С. В., Чувенкова О. А., А. А. К. Аль-Хабиб, Самойлов А. М., Шапошник А. В., Турищев С. Ю. РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЛЕНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ PdO, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В КАЧЕСТВЕ РЕЗИСТИВНЫХ СЕНСОРОВ	196

СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ EXAFS И EXELFS ДАННЫХ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

И. К. Аверкиев, О. Р. Бакиева

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: averkiev1997@mail.ru, 8 (3412) 430163

В настоящее время на первый план вышли новые материалы наноразмерного масштаба (2D материалы, квантовые точки, тонкие пленки, и пр.). Размерные эффекты приводят к физическим свойствам, которые существенно отличаются от объемных аналогов во многих аспектах, включая электронные, магнитные, каталитические и оптические свойства [1]. Наноструктуры обладают гораздо более высоким отношением площади поверхности к массе, чем объемные материалы, следовательно, поверхностные слои и поверхностная энергия Гиббса сильно влияют на физические свойства. В этом случае остро встает вопрос корректного определения структурных характеристик. Формирование структурных характеристик низкоразмерных материалов в первую очередь происходит за счет изменения локального атомного окружения [2].

Спектроскопия протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS — Extended X-ray Absorption Fine Structure) является наиболее распространённым методом исследования локальной атомной структуры. анализ EXAFS спектров позволяет получать информацию о межатомном расстоянии, координационных числах, сортности атомов относительно него и фактор Дебая-Валлера. Однако, без соответствующей информации относительно атомов неметалла картина локальной атомной структуры будет не полной. При этом, регистрируя EXAFS данные за К краями легкого элемента (от лития до фтора) и металла необходимо использовать существенно разный энергетический диапазон возбуждающего рентгеновского излучения и выбирать соответствующий метод регистрации и геометрии эксперимента. Это приводит к тому, что при анализе EXAFS спектров мы получаем данные о локальном атомном окружении металла и легкого элемента с различных глубин анализируемого слоя, при этом метод регистрации выбирается в соответствии с анализируемым материалом (проводник, диэлектрик).

Эту проблему удобно решать с помощью возбуждения внутренне-го уровня атома моноэнергетичным потоком электронов. В результа-

те процесса когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном окружении атома возникают спектры протяжной тонкой структуры энергетических потерь электронов (EXELFS — Extended Electron Energy Loss Fine Structure). EXELFS спектроскопия является EXAFS-подобным методом, который реализован на лабораторном оборудовании. Обычно в EXELFS спектроскопии регистрируют спектры энергетических потерь электронов за L и M краями возбуждения металлов и K краями легких элементов.

Поскольку спектры, полученные как с помощью рентгеновского, так и электронного возбуждения имеют одну природу — рассеяние вторичного электрона/фотоэлектрона на ближайшем окружении возбуждаемого атома, то анализ экспериментальных данных можно проводить в рамках решения одной задачи. EXAFS и EXELFS данные могут быть объединены в одну систему интегральных уравнений Фредгольма первого рода (обратная некорректно поставленная задача) и решении ее методом регуляризации по Тихонову [3].

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu^{\text{experiment}} = 4\pi\rho_0 \times \int_0^{\infty} dr [\chi_{\text{MeMe}}(p, r) g_{\text{MeMe}}(r) + \chi_{\text{MeC}}(q, r) g_{\text{MeC}}(r)] \quad \text{EXAFS} \\ I^{\text{experiment}} = 4\pi\rho_0 \times \int_0^{\infty} dr [\chi_{\text{CC}}(p, r) g_{\text{CC}}(r) + \chi_{\text{CMe}}(q, r) g_{\text{CMe}}(r)] \quad \text{EXELFS} \end{array} \right.$$

Решение предложенной системы уравнений позволяет проводить комплексный анализ локальной атомной структуры и получать информацию об окружении атомов металла и легких элементов из экспериментальных EXELFS спектров.

В настоящей работе проведено исследование локальной атомной структуры системы металл/легкий элемент (на примере соединений Ti, TiH₂, Ti₂AlC) используя совместный анализ экспериментальных данных EXAFS и EXELFS спектроскопии. Получены параметры локальной атомной структуры: парциальные длины химических связей, координационные числа, параметры тепловой дисперсии атомов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части развития лабораторных и синхротронных методик получения данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и их обработки

Литература

1. Rehr J. J. and Albers R. C. Rev. Mod. Phys. 72, 621.
2. Бакиева О. Р., Немцова О. М., Сурнин Д. В. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 10. 2015. С. 53.
3. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. — М. : Наука, 1979. — 283 с.

РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УЛЬТРАТОНКИХ AlGa_xN/GaN ГЕТЕРОСТРУКТУР, ВЫРАЩЕННЫХ НА ГИБРИДНЫХ ПОДАТЛИВЫХ ПОДЛОЖКАХ SiC/porSi

П. В. Середин, Д. Л. Голощапов¹, Радам Али Обаид¹,
А. С. Леньшин^{1,3}, Н. С. Буйлов¹, А. М. Мизеров⁴,
С. А. Кукушкин⁵

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия

³Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт Петербург, Россия

e-mail: radam.ali@mail.ru, тел.: 8 (473) 2208363

В нашей работе с использованием метода Рамановской спектроскопии показано преимущество роста ультратонких наноструктурированных Al_xGa_{1-x}N/GaN гетероструктур на податливой гибридной подложке, имеющей в составе слой пористого кремния (porSi), полученный методом электрохимического травления исходной кремниевой подложки, и сформированный на его поверхности методом Кукушкина слой карбида кремния (SiC). Гетероструктуры на основе слоев системы Al-Ga-N выращивались методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА) на многоподложечной установке Veeco Gen 200 Для роста гетероструктур в едином МПЭ ПА процессе использовались двухдюймовые пластины кристаллического кремния cSi легированного бором, с ориентацией (111) и сопротивлением <10 Ом*см²: были использованы три типа подложек: исходная подложка кристаллического кремния — cSi, подложка кремния, на поверхности которой с помощью метода Кукушкина [1] был сформирован слой карбида кремния — SiC/cSi и подлож-

ка кремния с пористым подслоем и слоем карбида кремния, полученного методом Кукушкина — SiC/porSi. Диагностика образцов была выполнена с использованием Рамановского микроскопа RamMix 532 с лазерным возбуждением 532 нм. В соответствии с тензором комбинационного рассеяния монокристаллы GaN и AlN с кристаллической структурой вюрцита (пространственная группа $P3m1$), имеют в своем спектре характерный набор продольных оптических (LO) и поперечных оптических (TO) фононных мод вблизи центра зоны Бриллюэна [2]. Результаты Рамановской спектроскопии (см. Рис. 13) подтверждают результаты рентгеновской дифракции [3] obtained through electrochemical etching of the original silicon substrate, and a silicon carbide (SiC с вюрцитной (гексогональной) структуре слоев исследованных гетероструктур, и находятся в хорошем согласии с уже известными работами, в которых были исследованы выращенные различными эпитаксиальными методами (MOCVD, MBE, CVD) эпитаксиальные пленки GaN, AlN, AlGaIn, для которых кристаллической плоскость $[0001]$ эпислоя была параллельна $[111]$ плоскости кремниевой подложки. Для точного определения состава и частот низкоинтенсивных колебаний в спектрах комбинационного рассеяния образцов cSi, SiC/cSi и SiC/porSi мы выполнили разложение экспериментальных Рамановских спектров на составляющие. Моделирование было выполнено с использованием программной среды Fytk, предназначенной для деконволюции спектрального сигнала, в частности Рамановского рассеяния. Рассчитанная из Рамановских спектров величина двухосного напряжения в эпитаксиальном слое AlGaIn, определённая из сдвига моды E_2^{high} AlN, принимает величину -1,27GPa, -1,39GPa и -0,18GPa для образцов cSi, SiC/cSi и SiC/porSi соответственно. Выявленная тенденция снижения этой величины для AlGaIn в зависимости от типа подложки коррелирует с рассчитанной для слоя GaN по результатам рентгеновской дифракции [3] obtained through electrochemical etching of the original silicon substrate, and a silicon carbide (SiC. Сравнение полученных нами экспериментальных результатов и информации из уже известных литературных источников, показывает, что использование гибридной податливой подложки, содержащей пористую прослойку кремния и слой карбида кремния, имеет ряд неоспоримых преимуществ для роста ультратонких AlGaIn/GaN наногетероструктур без использования толстых буферных слоев $A_{III}N$. Непосредственный рост на гибридной податливой подложке и SiC/porSi приводит к существенной релаксации упругих напряжений между кремнием и карбидом кремния и, как следствие, к гораздо меньшей дефектности слоев карбида кремния, что в итоге отражается на структурном качестве и опти-

ческих характеристиках транзисторных ультратонких структур на основе нитридов $A_{III}N$.

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

Литература

1. Kukushkin S. A., Osipov A. V., J. Phys. Appl. Phys., 2014, 47, 313001.
2. Olivier A., Int. J. Nanotechnol., 2014, 11, 243.
3. Seregin P. V., Opt. Mater., 2022, 128, 112346.

СОЗДАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СУБСТАНЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОЛЛАГЕНОВ НА ОСНОВЕ ПЕРЕРАБОТКИ ШКУР ПРЕСНОВОДНЫХ ГИДРОБИОНТОВ

С. С. Антипов, М. В. Лиходзиевская, Д. В. Тарасова

ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1

e-mail: postofficeulia1520@gmail.com, тел.: 8 (900) 944-03-74

Предлагаемая технология предназначена для производства нового поколения биологически совместимых высокоэффективных продуктов пищевой и косметологической промышленности, а также, в перспективе, продуктов фармацевтического и медицинского назначения [1]. Основной идеей проекта является уникальная технология создания комплексных биологически-активных дисперсий на основе нативных фибриллярных белков гидробионтов, обладающих высокой проникающей способностью. В рамках данной технологии будет впервые реализован комплексный подход к получению дисперсий нативных фибриллярных белков гидробионтов, который заключается в использовании «мягкого» ультразвукового излучения для обработки и разволокнения шкуры гидробионтов, в результате чего происходит сокращение длительности технологического процесса (до нескольких часов), снижается кислотность конечного продукта и минимизируется деструкция нативных белков. Проведение комплексных физико-химических исследований позволяет установить оптимальные параметры получения компонентов дисперсии (состав, размер и тип белковых фибрилл, их устойчивость к воздействию различных

типов ферментов) для обеспечения формирования оптимальной композиции получаемой коллагеновой субстанции.

На сегодня выявлены закономерности растворения фибриллярных белков дермы гидробионтов под действием физического воздействия (ультразвуковая обработка) в результате чего обоснованы условия получения дисперсий. Идентификация состава аминокислот показала высокую аналогию с человеческим коллагеном. Методом электрофоретического фракционирования в полиакриламидном геле показано, что белковые фракции, присутствующие в дисперсии имеют молекулярную массу преимущественно в диапазоне свыше 100 кДа, а с использованием атомно-силовой микроскопии доказано, что планарные размеры белковых фибрилл составляют $\sim 3 \times 300$ нм. Характер продуктов протеолитического расщепления коллагенов анализировали с использованием электрофоретического фракционирования в полиакриламидном геле в денатурирующих условиях и времяпролетной масс-спектрометрии (MALDI-TOF). В результате сопоставления воздействия трипсина, коллагеназы и смеси слабобазисных протеаз было выявлено, что белки субстанции фибриллярных белков гидробионтов и коллагены из шкур крупного рогатого скота, в одних и тех же условиях деградируют на различные пептидные группы. Были проведены исследования молекулярной структуры коллагена клариевого сома (*Clarias gariepinus*) и показана возможность получения тонкого мембранного материала [2]. Коллагеновая мембрана характеризуется высокой гибкостью и пластичностью, а также механической прочностью, упорядоченностью поверхности, по мимо этого показана жизнеспособность клеток на поверхности коллагеновой мембраны в отсутствии вертикальной. Выполнено ремоделирование структуры клеточного матрикса с использованием рентгеновской томографии. Установлено, что каркасы, полученные из коллагена сома, характеризуются высокой степенью упорядоченности фибрилл, высокой шероховатостью поверхности и обеспечивают эффективный направленный рост культуры клеток. Полученный материал обеспечивает формирование внеклеточного матрикса и характеризуется коротким временем сорбции живыми тканями.

Литература

1. Тарасова Д. В., Бородин М. М., Лиходзиевская М. В. и др, Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация, 2023, 1, 75—81
2. Veronika Anohova, Lyudmila Asyakina, Olga Babich et al., Polymers, 2023, 15, 1220

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В 2p-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ ОКСИДА СКАНДИЯ Sc_2O_3

**К. А. Бакина¹, В. Н. Сивков¹, С. В. Некипелов¹,
О. В. Петрова^{1,2}, Р. Н. Скандаков¹**

¹ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия

²СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: tylxen@gmail.com, тел.: 8 (212) 391461

В современных исследованиях наноразмерных структур, биологических объектов и неорганических материалов эффективно применяются методы ультрамягкой рентгеновской абсорбционной спектроскопии, заключающиеся в анализе спектральных зависимостей сечений поглощения и связанных с ними сил осцилляторов в области ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS). Силы осцилляторов рентгеновских переходов являются фундаментальными параметрами, характеризующими электронную структуру вещества и позволяющими описать механизмы формирования резонансной структуры в рентгеновских спектрах поглощения.

В работе обсуждаются проблемы, связанные с проведением абсолютных измерений спектральных зависимостей сечений поглощения и определения из них распределений сил осцилляторов в области NEXAFS на примере оксида скандия Sc_2O_3 .

Исследования NEXAFS-спектров оксида скандия Sc_2O_3 проводились на канале НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ-Курчатов, г. Москва, Россия) и русско-немецком канале выхода и монохроматизации синхротронного излучения электронного накопителя BESSY-II (г. Берлин, Германия). Измерение сечений поглощения в области NEXAFS осуществлялось методом квантового выхода рентгеновского фотоэффекта, реализованного путём регистрации полного электронного выхода (total electron yield, TEY) с поверхности образца. Для подавления уровня длинноволнового немонохроматического рассеянного фона и излучения кратных порядков дифракции в интервале энергий квантов 450—900 эВ применялся титановый фильтр, закреплённый на металлической сетке.

С использованием методики измерения сечений поглощения методом TEY с корректным учётом аппаратных искажений и немонохроматического фона, детально описанной в работе [1], получены спектральные зависимости сечения поглощения $\sigma(E)$ в области 2p-края поглощения оксида скандия Sc_2O_3 , из которых определено распределение сил осцилляторов.

Спектральные зависимости сечения поглощения $\sigma(E)$ Sc_2O_3 получены путём деления зарегистрированного монохроматизированного сигнала ТЕУ Sc_2O_3 на величину, пропорциональную интенсивности падающего синхротронного излучения, которая была определена с применением фотокатода из золота (КИСИ-Курчатов) и кремния (BESSY-II). Для приведения зависимостей $\sigma(E)$ к абсолютным единицам использовались данные сечений поглощения из таблиц Хенке [2].

Работа выполнена при поддержке «Министерства науки и высшего образования России» в рамках соглашения № 075-15-2021-1351

Литература

1. Sivkov D., Petrova O., Mingaleva A., Ob'edkov A., Kaverin B., Gusev S., Vilkov I., Isaenko S., Bogachuk D., Skandakov R., Sivkov V., Nekipelov S. The Structure and Chemical Composition of the Cr and Fe Pyrolytic Coatings on the MWCNTs' Surface to NEXAFS and XPS Spectroscopy // *Nanomaterials*, 2020, V.10, 374.

2. Henke B. L., Gullikson E. M., Davis J. C. X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at $E = 50\text{--}30,000$ eV, $Z = 1\text{--}92$ // *Atomic data and nuclear data tables*, 1993, V. 54(2), pp. 181—342.

АТОМНОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МАГНЕТРОННЫХ ПЛЕНОК W-Si И Nb-Si

**К. А. Барков¹, Д. Н. Нестеров¹, В. А. Терехов², С. Хадырова²,
И. В. Михайлова², К. М. Моисеев², С. А. Ивков¹,
Е. С. Керсновский¹, И. В. Польшин¹, Н. В. Новолокина¹**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия*

e-mail: barkov@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 208363

Пленки W-Si и Nb-Si являются перспективным материалом для использования в однофотонных сверхпроводниковых детекторах ИК излучения. Однако при магнетронном нанесении пленок W-Si и Nb-Si могут формироваться метастабильные фазы, отсутствующие на диаграммах состояния [1]. Наличие в составе пленок W-Si и Nb-Si метастабильных соединений может существенно сказываться на их функциональных свойствах. Поэтому вопросы диагностики структуры и фазового состава подобных объектов важны и актуальны.

Исследуемые пленки $W_{75}Si_{25}$ и $Nb_{75}Si_{25}$ были получены на кремниевых Si(100) подложках совместным магнетронным распылением двух мишеней вольфрама и кремния. Толщина пленок варьировалась от 7 до 100 нм. Фазовый состав плёнок $W_{75}Si_{25}$ и $Nb_{75}Si_{25}$ определялся методами рентгеновской дифракции. Электронное строение пленок анализировалось по рентгеновским эмиссионным Si $L_{2,3}$ -спектрам с помощью уникального метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500 [2].

Результаты исследований методом рентгеновской дифракции показали, что в пленке $W_{75}Si_{25}$ с толщиной 100 нм формируется фаза дисилицида вольфрама WSi_2 . Анализ рентгеновских эмиссионных Si $L_{2,3}$ -спектров пленки $W_{75}Si_{25}$ также обнаруживает сходство распределения валентных электронов в пленке с эталоном WSi_2 . При этом присутствия фазы оксида кремния SiO_2 в значительном количестве не обнаружено даже в поверхностных слоях глубиной около 10 нм. Кроме того, в данной пленке часть атомов вольфрама находится в виде нанокристаллов со структурой $Pm-3n$. При уменьшении толщины пленки $W_{75}Si_{25}$ до 80 нм основной фазой все также является дисилицид вольфрама WSi_2 , при этом около 20 % кремния находится в виде оксида кремния SiO_2 . Дальнейшее уменьшение толщины пленки $W_{75}Si_{25}$ до 40 и 20 нм приводит к формированию сложной композитной пленки, содержащей фазы β -W, силицидов WSi_2 и W_3Si , а также оксидов кремния SiO_2 (около 20 % от общего содержания кремния) и вольфрама WO_x . Наконец в случае ультратонких пленок $W_{75}Si_{25}$ толщиной 7 нм наблюдается частичная кристаллизация вольфрама в фазу α -W, частичное окисление, а также взаимодействие с кремнием с образованием дисилицида вольфрама WSi_2 .

Совершенно иная ситуация наблюдается в случае пленки $Nb_{75}Si_{25}$. По данным рентгеноструктурного анализа пленка $Nb_{75}Si_{25}$ является рентгеноаморфной. В то же время по данным УМРЭС в поверхностных слоях пленки $Nb_{75}Si_{25}$ (до 10 нм) формируется фаза низшего силицида (например, N_5Si_3), о чем свидетельствует наличие в Si $L_{2,3}$ -спектре пленки высокоинтенсивного узкого максимума при $E = 90$ эВ и характерного плеча в области 92—100 эВ (Рис. 1). При увеличении глубины анализа до 60 нм, наблюдаются два максимума при $E = 90$ и 99 эВ, практически с одинаковой интенсивностью. Если максимум при $E = 90$ эВ по положению и полуширине характерен для низших силицидов, то наличие высокой плотности состояний вблизи потолка валентной зоны и резким ее падением в области 100 эВ является необычным результатом, поскольку такой резкий спад плотности состояний вблизи потолка валентной зоны характерен для спектров металлов, где положение уровня Ферми совпадает с положением потолка валент-

ной зоны. Похожая ситуация наблюдалась в работе [3], где рассматривались нанокластеры NbSi_2 с гексагональной $C11bI4/mmm$ (139) и орторомбической C49 ($Cmcm$, 63) структурой, проявляющие металлические свойства. Расчеты плотности электронных состояний в рамках теории функционала плотности, проведенные в работе [4] показали наличие состояний вблизи уровня Ферми, образованных гибридизованными $\text{Nb-}4d$ и $\text{Si-}3p$ орбиталями. Поэтому авторы данной работы делают вывод, что металлическое поведение данных структур может быть объяснено сильным металлическим взаимодействием между атомами ниобия и кремния. Данный тип спектра в соединениях Nb-Si на данный момент не изучен и является весьма интересным. Таким образом, по данным УМРЭС в поверхностных слоях толщиной ~ 10 нм пленки $\text{Nb}_{75}\text{Si}_{25}$ формируются фазы низших силицидов ниобия. При этом в более глубоких слоях (на глубине ~ 60 нм) наблюдается сильное увеличение плотности электронных состояний вблизи потолка валентной зоны и резкий спад, что согласно данным [4] может приводить к появлению металлических свойств в исследуемой пленке Nb-Si.

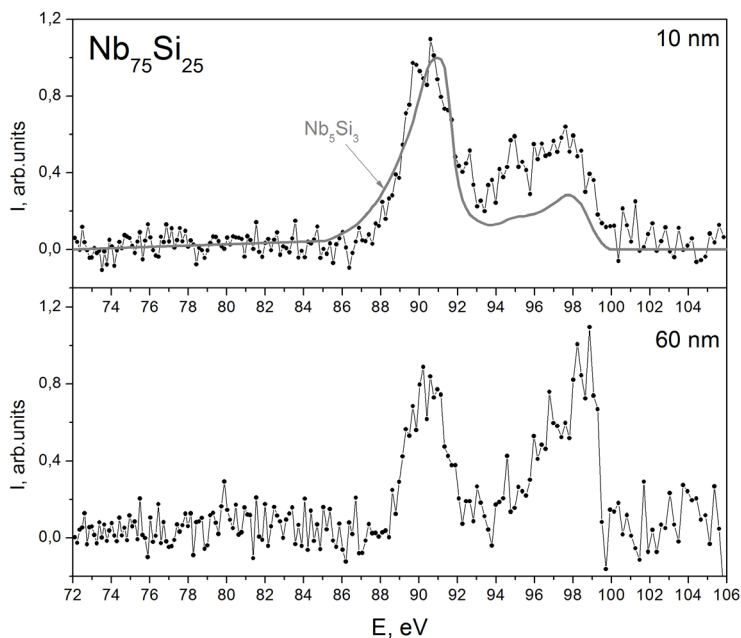


Рис. 1. Рентгеновские эмиссионные $\text{Si } L_{2,3}$ -спектры в пленке $\text{Nb}_{75}\text{Si}_{25}$, полученные при глубине анализа 10 и 60 нм, а также спектры эталонов NbSi_2 и Nb_5Si_3

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>. Доступ к оборудованию предоставлен за счет гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2). Методическая проработка выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Pan Y., Guan W. M., Journal Ceramics International, 2019, 45, 15649.
2. Зимкина Т. М. Ультратонкая рентгеновская спектроскопия. Изд-во Ленинградского университета, 1971. 132 С.
3. Wang S. et al., RSC advances, 2018, 8, 28693.
4. Wan B. et al., Journal of Alloys and Compounds, 2016, 681, 412—420.

СИНТЕЗ НАНОНИТЕЙ СЕРЕБРА В ПОРИСТОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ

А. Н. Бельтюков¹, И. А. Кузьмина^{1,2}, А. И. Чукавин¹

¹*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Ижевск, Россия*

²*Ижевский государственный технический университет
имени М. Т. Калашникова,
Ижевск, Россия*

e-mail: anb@udman.ru, тел.: 8 (3412) 431894

Нанонити серебра (AgNWs) обладают уникальным сочетанием свойств, что делает их привлекательным материалом для целого ряда приложений. Так высокая проводимость и слабое поглощение в видимом диапазоне позволяет использовать их в качестве прозрачных электродов, в том числе на гибких подложках, сенсоров температуры и давления [1, 2, 3]. Кроме того, они могут применяться для поверхностного усиления сигнала комбинационного рассеяния света (SERS — Surface Enhancement Raman Spectroscopy) [4]. При этом для практических приложений особенно важным становится получение надежных и воспроизводимых сигналов. Один из методов достижения этого — это создание чипов с упорядоченной периодической структурой. Традиционные

литографические методы микроэлектроники на нанометровом масштабе становятся весьма затратными, в связи с чем, в настоящее время широко развиваются различные методы самосборки [5, 6]. В настоящей работе предлагается электрохимический метод синтеза нанонитей серебра в упорядоченных в гексагональной ячейке порах анодного оксида алюминия (АОА). Пористый АОА толщиной 5 мкм выращивался в 0,3М растворе щавелевой кислоты ($\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$) при напряжении 40 В в соответствии с работой [7]. Как правило, при электрохимическом осаждении металлов пористый оксид алюминия отделяют от алюминия, на котором он выращивается, удаляя сплошной барьерный слой оксида и физическими методами осаждают на одну из поверхностей электрод из инертного металла [8]. Однако, полученные таким образом нанокомпозиты АОА с металлическими нанонитями являются достаточно хрупкими и требуют дополнительной защиты при эксплуатации. В данной работе алюминий не удалялся и играл роль электрода при осаждении серебра. Непосредственному осаждению металла на алюминий мешает барьерный слой оксида на дне поры и высокая электроотрицательность самого алюминия. Поэтому получение образцов осуществлялось в несколько этапов (Рис. 1): 1) синтез АОА толщиной 5 мкм; 2) утонение барьерного слоя до менее 10 нм в том же растворе в гальваностатическом режиме; 3) обработка в растворе цинката Na_2ZnO_2 , в процессе которой удаляются остатки оксида на дне поры и происходит осаждение цинка вследствие реакции замещения; 4) электроосаждение серебра из водного раствора нитрата AgNO_3 . Полученные образцы исследовались методами сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (Рис. 2).

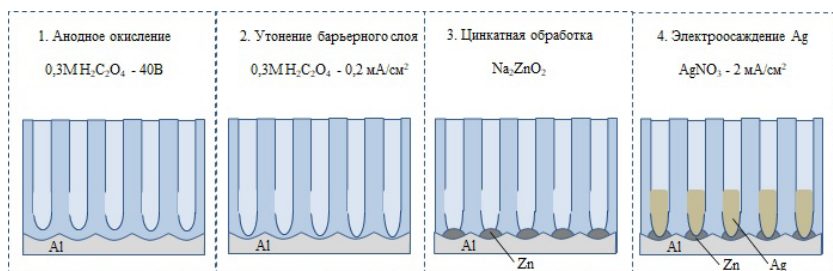


Рис. 1. Схема получения нанонитей серебра в пористом оксиде алюминия

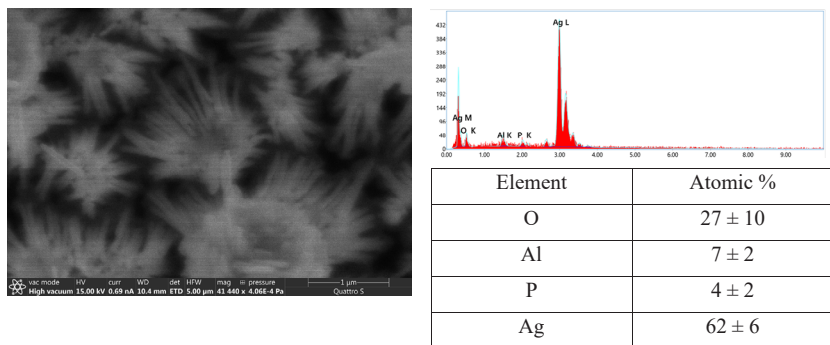


Рис. 2. СЭМ-изображения нанонитей серебра после удаления АОА и результаты микроанализа

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования России № 121030100002-0 и соглашения № 075-15-2021-1351 в части развития лабораторных и синхротронных методик получения данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и их обработки

Литература

1. Pyeongsam Ko, Tram Hoang Nhu Tran, Ly Thi Trinh et al. ACS Appl. Nano Mater. 2022, 5, 9, 12778—12786.
2. Jie Xia, Xuepei Wang, Junchang Zhang et al. ACS Appl. Nano Mater. 2022, 5, 8, 10652—10662
3. Shanlin Li, et al., Materials Today Communications, Volume 20, September 2019, 100546.
4. Pang, Y.; Jin, M. Nanomaterials 2023, 13, 1358.
5. Ye, Z., Li, C., Chen, Q., et al. Nanoscale 2021, 13, 5937—5953.
6. Pandey, P., Shin, K., Jang, A.-R., et al. J. Alloy Compd. 2021, 888, 161504.
7. Valeev R. G., Petukhov D. I., Chukavin A. I., Beltiukov A. N.. Semiconductors, 2016, vol. 50, no. 2, pp. 266—270.
8. Ноян А. А., Колесник И. В., Леонтьев А. П., Напольский К. С.. Электроника, 2023, Т. 59, № 7, стр. 378—390

МОДИФИКАЦИЯ ПРАВИЛА УЭЙДА-МИНГОСА ДЛЯ ПОИСКА СТАБИЛЬНЫХ СТРУКТУР КРЕМНИЙ-МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЭНДОКЛАСТЕРОВ

**Н. А. Борщ¹, Н. С. Переславцева¹, Е. И. Максимова¹,
В. Р. Радица²**

*¹Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия*

*²Воронежский государственный университет,
Воронеж, Россия*

e-mail: n.a.borshch@ya.ru, тел.: 8 (473) 2464222

Кластеры на основе элементов IV группы с замкнутой структурой (эндокластеры), допированные атомами различных металлов, представляют интерес как строительные блоки для формирования более крупных наноструктур — одномерных, двумерных или трехмерных [1]. Свойства таких кластеров зависят как от числа атомов в них, так и от сорта атома металла [2]. Одной из основных проблем является достоверное определение атомной структуры кластеров. В данной работе на примере кластера TaSi_{15}^- показаны закономерности формирования стабильных изомеров кластеров, которые рассматриваются в рамках 4n-модификации правила Уэйда-Мингоса. Представлены результаты расчета атомной структуры и электронного спектра кластера TaSi_{15}^- в рамках теории функционала плотности с использованием B3PW91-функционала с комбинированным базисом 6—311+g(2d) для Si и Jorge-TZP для Ta. Приводится сравнение рассчитанных электронных спектров наиболее стабильных изомеров кластера с экспериментальными фотоэлектронными спектрами [3], что позволяет подтвердить адекватность метода расчета и с высокой точностью установить структуры детектируемых в эксперименте изомеров.

Расчеты проводились с использованием пакета программ Gaussian 09. Для каждой оптимизированной структуры в результате расчета электронного спектра получались собственные значения энергии каждой молекулярной орбитали, т. е. энергетический спектр, в котором каждую молекулярную орбиталь можно представить в виде уровня. Для построения электронных спектров кластеров каждый энергетический уровень заменялся гауссовым распределением с полушириной 0.12 эВ и интенсивности всех распределений при каждом значении энергии складывались.

Моноанионный кластер TaSi_{15}^- имеет $4n+6$ валентных электронов, и структуры его изомеров могут относиться к так называемым *arachno*-структурам, которые получаются удалением двух вершин из *closo*-многогранников, являющихся стабильными изомерами кластера с $4n+2$ электронами, т. е. кластера TaSi_{17}^{3+} . Стабильные изомеры кластера TaSi_{17}^{3+} показаны на рис. 1. Изомер 17-CLOSO-I представляет собой искаженный многогранник Франка-Каспера с шестнадцатью вершинами и с дополнительным атомом кремния. Изомер 17-CLOSO-II имеет в основе сильно искаженную шестиугольную призму с дополнительными атомами кремния. Строго говоря, эти структуры не являются эндоэдральными, в отличие от *closo*-многогранников Уэйда-Мингоса. Однако удалением двух атомов кремния из этих изомеров и дальнейшей оптимизацией таких стартовых структур удалось получить стабильные изомеры кластера TaSi_{15}^- (рис. 1).

Изомеры 15A, 15B и 15C получаются удалением двух атомов кремния из вершин *closo*-многогранника 17-CLOSO-I. Эти изомеры можно отнести к дельтаэдрическим структурам, поскольку большинство граней в многогранниках 15A, 15B и 15C являются треугольными. Большинство атомов кремния в такой структуре образуют по пять связей Si-Si. Изомеры 15D и 15E формируются путем удаления двух атомов кремния из структуры 17-CLOSO-II. Эти структуры можно отнести к трехсвязным, поскольку большинство атомов кремния в них формируют по три связи Si-Si.

Основными можно считать изомеры 15A, 15B и 15C, поскольку средние энергии связи в них оказались наибольшими и практически равными. Так как качественно структуры 15A, 15B и 15C схожи, то и их рассчитанные электронные спектры имеют схожие профили, которые хорошо согласуются с экспериментальным фотоэлектронным спектром [9]. Кроме того, их суммарный спектр также совпадает с экспериментальным (рис. 1). Рассчитанные спектры структур 15D и 15E показывают значительно худшее согласие с экспериментальным спектром. Учитывая, что средние энергии связи в них значительно меньше, чем в изомерах 15A, 15B и 15C, можно утверждать, что формирование в эксперименте этих структур маловероятно.

Для представленных расчетов были использованы вычислительные ресурсы Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075—15—2021—1351.

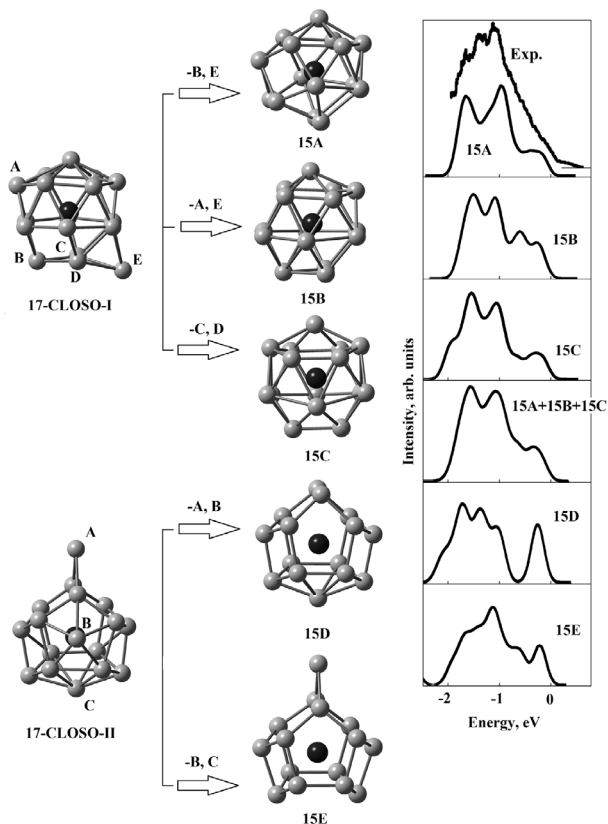


Рис. 1. Атомные структуры стабильных изомеров кластеров TaSi_{17}^{3+} и TaSi_{15}^{-} и сопоставление рассчитанных спектров изомеров кластера TaSi_{15}^{-} с фотоэлектронным спектром [3].

Серым цветом показаны атомы кремния, черным — атомы тантала

Литература

1. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И., Физика и техника полупроводников, 2010, Т. 44, № 8, 1021—1026.
2. Борщ Н. А., Курганский С. И., Неорганические материалы, 2015, Т. 51, № 9, 946—952.
3. Koyasu K., Atobe J., Furuse S., Nakajima A., J. Chem. Phys., 2008, V. 129, P. 214301.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ГЕРМАНИЕВЫХ ЭНДОКЛАСТЕРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ VB ГРУППЫ

**Н. А. Борщ¹, Н. С. Переславцева¹, Е. И. Максимова¹,
О. И. Дубровский²**

*¹Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия*

*²Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: n.a.borshch@ya.ru, тел.: 8 (473) 2464222*

Кластеры на основе элементов IVA группы вызывают интерес исследователей с тех пор, как был открыт фуллерен C_{60} . Появились гипотезы, что атомы той же группы, что и углерод, могут формировать подобные структуры. За последние десятилетия было проведено множество теоретических и экспериментальных исследований и было установлено, что атомы кремния, германия или олова формируют не только фуллереноподобные кластеры, но и кластеры с другими типами замкнутых структур [1, 2]. Такие кластеры могут формировать более крупные нанообъекты, свойства которых зависят от размеров и особенностей строения элементарных блоков, а также от сорта атома металла, которым эти блоки допированы. Это открывает новые возможности для конструирования новых функциональных материалов, свойства которых можно будет легко варьировать [3].

В данной работе представлены результаты компьютерного эксперимента по моделированию атомной структуры и электронного спектра стабильных изомеров кластеров германия, допированных атомами ванадия, ниобия или тантала. Эти переходные металлы принадлежат одной группе, однако они имеют существенные отличия, которые могут оказывать влияние на кластерообразование. Так, атом ванадия имеет существенно меньший атомный радиус, чем атомы ниобия и тантала, а атом ниобия имеет на один валентный d-электрон больше, чем атомы ванадия и тантала. Рассматривались кластеры $MeGe_n$, $n = 12, 16, 20$. Кластеры именно таких размеров являются наиболее перспективными строительными блоками для формирования более крупных наноструктур. Каждый кластер изучался в трех зарядовых состояниях — монокатионном, моноанионном и нейтральном. Это позволило проанализировать влияние заряда на особенности формирования основных изомеров.

Оптимизационные расчеты по поиску стабильных изомеров кластеров выполнены в рамках теории функционала плотности. Для расчетов исполь-

зованы четыре функционала — B3LYP, B3PW91, PBE и BP86 в комбинации с базисами SDD и def2-TZVPD каждый. В результате расчетов получался набор стабильных изомеров для каждого кластера, для каждого изомера были рассчитаны плотности электронных состояний. Для анионных кластеров проводилось сопоставление рассчитанных электронных спектров с экспериментальными фотоэлектронными спектрами. Это позволило оценить адекватность каждой комбинации функционала и базиса данной задаче, проанализировать влияние выбора функционала и базиса на результаты расчетов и предложить наиболее оптимальное из этих сочетаний.

Для представленных расчетов были использованы вычислительные ресурсы Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075—15—2021—1351.

Литература

1. Борщ Н. А., Курганский С. И., Неорганические материалы, 2015, Т. 51, № 9, 946—952.
2. Борщ Н. А., Курганский С. И., Журнал физической химии, 2018, Т. 92, № 9, 1720—1726.
3. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И., Физика и техника полупроводников, 2010, Т. 44, № 8, 1021—1026.

СТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК

Н. С. Буйлов¹, Х. С. Шихалиев¹, Н. В. Столповская¹

*¹ Лаборатория органических добавок для процессов химического и электрохимического осаждения металлов и сплавов, применяемых в электронной промышленности, Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: petrov@mail.ru, тел.: 8 (473) 2233322*

Увеличение показателей производительности и надежности интегральных схем (ИС) напрямую связано с плотностью размещения транзи-

стором на кристалле. На сегодняшний день наиболее изученная и дешёвая кремниевая технология изготовления ИС практически достигла размерного технологического предела [1]. В качестве одного из наиболее перспективных направлений развития кремниевой технологии рассматривается 3D интеграция. Одним из ключевых элементов в технологии 3D интеграции является интерпозер, представляющий собой кремниевую пластину со сквозными переходными отверстиями (through-silicon vias (TSV)). Наиболее подходящим материалом для заполнения колодцев в TSV технологии является медь, которая осаждается гальваническим способом. Однако Cu обладает высоким коэффициентом диффузии, что может привести к существенному ухудшению электрических характеристик приборов [2]. В связи с чем требуется предварительное осаждение барьерного/затравочного слоя. Наиболее перспективным способом осаждения барьерного/затравочного слоя является химическое никелирование. Желательным результатом является получение аморфного никелевого покрытия. Слои химического никеля с соответствующими характеристиками осаждают из электролитов высокого качества с применением органических добавок.

В данной работе была исследована структура и морфология химически осажденных никелевых покрытий, полученных с использованием разработанной нами стабилизирующей органической добавкой динатриевой соли 4,4-дифенилбензолдисульфокислоты (ДТБС). Ванна для химического осаждения Ni, Р - покрытия содержала 0,08 моль/л хлорида никеля, 0,28 моль/л гипофосфита натрия в качестве восстановителя, 0,2 моль/л аминокислоты в качестве комплексообразователя и буферной добавки, 0,12 моль/л ацетата натрия в качестве буферной добавки.

Т а б л и ц а 1

Обозначения образцов химически осажденных Ni покрытий в зависимости от концентрации органической добавки.

Номера образцов	ДТБС _0	ДТБС _1	ДТБС _2	ДТБС _3
Концентрация органической добавки ДТБС, г/л	0	0,02	0,035	0,08

Морфология поверхности полученных никелевых покрытий была исследована с использованием сканирующего зондового микроскопа Solver P47 (ЦКП НО ВГУ). Рентгеноструктурный анализ Ni покры-

тий проводился при комнатной температуре с помощью дифрактометра ДРОН-4.07 с $\text{CuK}\alpha$ излучением.

На рисунке 1 представлены АСМ изображения участков поверхности Ni покрытий 5×5 мкм. Анализ АСМ изображений показывает, что поверхность образца ДТБС_0 характеризуется глобулярными образованиями полусферической формы со средним размером порядка 1 мкм. В свою очередь на поверхности глобул обнаруживаются более мелкие зерна со средним размером ~ 100 нм. Величина среднеквадратичного значения (RMS) шероховатости поверхности образца ДТБС_0 составляет 13,63 нм. Внесение в электролит добавки ДТБС приводит к сглаживанию поверхности, при этом на поверхности покрытий формируется развитая мелкозернистая структура. Величина RMS образцов ДТБС_1, ДТБС_2 и ДТБС_3 составляет 2,09 нм, 2,62 нм и 2,70 нм соответственно. Уменьшение величины параметра RMS должно привести к улучшению барьерных свойств осажденных покрытий [3].

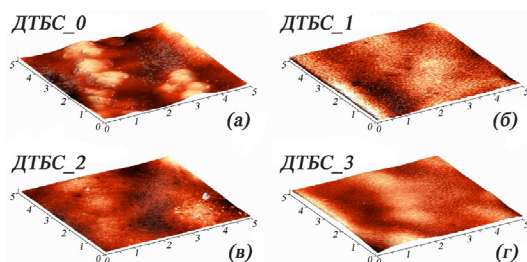


Рис. 1. АСМ изображения участков поверхности Ni покрытий 5×5 мкм:
а — ДТБС_0, б — ДТБС_1, в — ДТБС_2, г — ДТБС_3.

Экспериментальные дифрактограммы медной подложки и Ni покрытий, осажденных из электролита с содержанием разработанной органической добавки в разных концентрациях (таблица 1) приведены на рисунке 2. Рефлексы, наблюдаемые при углах $2\theta = 43.36, 50.48, 74.19, 89.98$ соответствуют отражениям от плоскостей подложки Cu (111), (200), (220), (311) соответственно [ICDD 00-004-0836]. Широкие максимумы в области углов $2\theta = 44.66, 51.83$ принадлежат исследуемому никелевому покрытию и соответствуют отражениям от плоскостей (111) и (200) Ni с границен-трированной кубической (ГЦК) решеткой [ICDD 00-004-0850]. По дан-ным рентгеноструктурных исследований химически осажденные никеле-вые покрытия находятся в нанокристаллическом состоянии [4].

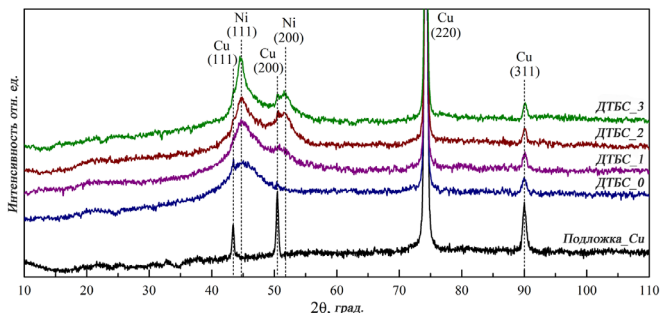


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы подложки (Подложка *Cu*) и образцов *Ni* покрытий, осажденных при разных концентрациях органической добавки (ДТБС *_0*, ДТБС *_1*, ДТБС *_2*, ДТБС *_3*)

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2022—2024 годы, проект № FZGU-2022-0003.

Литература

1. Wong H., IEEE, 2021, 9—15.
2. Bea J. et al. IEEE, 2011, 32, 7, 940—942.
3. Wang B. et al., IEEE, 2019, 1—3.
4. Buylov N. S., Sotskaya N. V., Kozaderov O. A. et al., Micromachines, 2023, 14, 6, 1151.

АКТУАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИБОРНОЙ БАЗЫ И ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ЦКП «ПОВЕРХНОСТЬ И НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ» УдмФИЦ УрО РАН

Р. Г. Валеев

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: rishatvaleev@mail.ru, тел.: 8 (3412) 430163

Последние годы уделяется большое внимание развитию возможностей центров коллективного пользования научным оборудованием и активному обновлению их дорогостоящей приборной базы. ЦКП «Поверхность и новые материалы» при УдмФИЦ УрО РАН, обладая высоким прибор-

ным и исследовательским потенциалом, также развивает экспериментальную базу и расширяет спектр оказываемых услуг как для внутренних исследований, так и для выполнения заказов сторонних организаций. Наиболее востребованными являются исследования физико-химических свойств и структуры материалов, заказчиками которых являются промышленные предприятия и ВУЗы Удмуртской Республики, а также российские организации (Воронежский государственный университет, МГУ им. М. В. Ломоносова, ИОНХ РАН, ФИЦ «Кристаллография и фотоника» и другие).

Данный доклад представляет актуальную информацию о приборных и методических возможностях ЦКП, а также наиболее интересные и значимые результаты, полученные, в основном, с использованием микроскопического и спектроскопического оборудования ЦКП: исследование слоев оксида графена, структур типа М-Хене, оксидов вентильных (Ti, V, Zn) и 3d (Fe, Ni, Co) металлов, наночастиц, выращенных с использованием «живых» реакторов и другие. Представление указанных выше сведений призвано увеличить интерес к приборной и исследовательской базе УдмФИЦ УрО РАН.

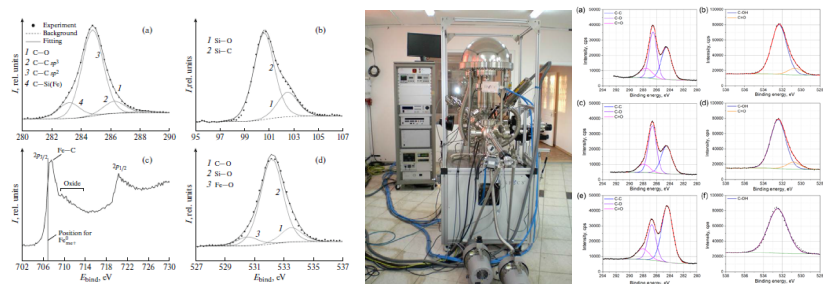


Рис. 1. Рентгеноэлектронный спектрометр Specs (в центре) и результаты анализа структур Fe-Si-C-O (слева) и газоселективных мембран на основе оксидов графена на поверхности пористого оксида алюминия.

Представленные в докладе результаты получены с использованием приборной базы ЦКП УдмФИЦ УрО РАН «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (договор № 075-15-2021-1351) в части разработки методологии рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ИОНОВ (НАНОСТРУКТУР) СЕРЕБРА В НАТРИЕВО-СИЛИКАТНЫХ МАТРИЦАХ/СТЕКЛАХ

**И. А. Викленко¹, В. В. Срабионян¹, В. А. Дурыманов¹,
Я. Н. Гладченко-Джевелекис¹, В. Н. Раздоров¹, Д. С. Рубаник¹,
Л. А. Авакян¹, Л. А. Бугаев¹**

*¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: viklenko@sfsedu.ru, тел.: 8 (928) 132 43 99*

Локальная атомная структура центров окраски может оказывать существенное влияние на физические свойства оптических стёкол и стекло-керамик, влияя как на прочностные, так и на оптические характеристики. Структура таких центров может изменяться с течением времени или при изменении внешних факторов, например, в результате термического воздействия, что может приводить к существенным изменениям в физических свойствах исходных образцов. Также центры окраски могут служить основой для создания различных наноструктур в объеме стеклянной матрицы, что активно используется при разработке и создании новых плазмонных материалов.

Стоит отметить, что в результате синтеза наночастиц, большая часть исходных центров окраски может оставаться в состоянии отдельных ионов и нанокластеров (димеров, тримеров, и т. д.) [1], что с одной стороны оказывает влияние на физические свойства получившихся объектов (не всегда положительное), а с другой стороны может затруднять структурный анализ получившихся объектов (например, большой вклад в спектры рентгеновского поглощения от атомов центров окраски затрудняет интерпретацию атомной структуры соответствующих образованных НЧ). (Знание структуры центров окраски может облегчить процесс структурного анализа, например, позволяя определить/учесть их процентное содержание в образце с НЧ).

Наиболее распространенным способом анализа локальной атомной структуры центров окраски в аморфных материалах является использование спектроскопии рентгеновского поглощения (XAFS), содержащей значительное количество информации о локальном окружении выделенного атома, однако, анализ и обработка данных XAFS является сложным и трудоемким процессом, что затрудняет получения непротиворечивых сведений о трехмерной структуре локального окружения выделенного атома.

В данной работе предлагается подход определения непротиворечащей экспериментальным данным трёхмерной структуры локального атомного окружения центров окраски серебра в натриево-силикатных стеклах, основанный на использовании байесовской оптимизации геометрии центра окраски с применением методов машинного обучения [2].

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-21-00526).

Литература

1. Srabionyan V. V., Avakyan L. A., Durymanov V. A., Rubanik D. S., Viklenko I. A., Skunova A. V., Bugaev L. A., Atomic structure and optical properties of color centers of silver in AgAu/glass irradiated by UV laser, J. Phys. Chem. Solids. 179 (2023) 111412. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2023.111412>.

2. Timoshenko J. et al. Supervised Machine-Learning-Based Determination of Three-Dimensional Structure of Metallic Nanoparticles // J. Phys. Chem. Lett. 2017. Vol. 8, № 20. P. 5091—5098.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА ПЛЁНОК В СИСТЕМЕ Cu-Sn-S МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

**А. В. Буданов¹, Г. И. Котов¹, Ю. Н. Власов¹, Е. В. Руднев²,
Д. Л. Голошапов², Е. Н. Белоусова²**

¹ФГБОУ ВО «ВГУИТ», Воронеж, Россия

²ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия

e-mail: youramail@mail.ru, тел.: 8 (903) 8511095

В настоящее время активно развивается тонкоплёночная технология прямозонных полупроводников, пригодных для использования в устройствах фотовольтаики [1]. В качестве альтернативы дорогостоящим соединениям $A^{III}B^V$, содержащим редкоземельные элементы и токсичный мышьяк, предлагаются тройные фазы системы Cu-Sn-S [2]. В конструкции солнечных элементов из этой системы наиболее подходящим с точки зрения моделирования однопереходных фотоэлектротрансформаторов представляется соединение Cu_2SnS_3 , для которого теоретический предел КПД по мощности составляет 20 % [3]. Однако, максимальный достигнутый КПД составляет 5,1 % [4], он ограничивается качеством тон-

ких плёнок Cu_2SnS_3 из-за наличия примесных фаз и присутствия дефектов кристаллической структуры [4]. Нашим научным коллективом показана возможность формирования тонких плёнок Cu_2SnS_3 или Cu_2SnSe_3 без включения примесных фаз по двухстадийной методике: напыления на подложку металлического слоя-прекурсора с последующим отжигом его в парах халькогена [5].

При анализе фазового состава плёнок Cu_2SnS_3 возникают сложности, вызванные тем, что данное соединение может кристаллизироваться в трёх модификациях — кубической, тетрагональной или моноклинной в зависимости от степени упорядочения Cu и Sn в катионной подрешётке кристалла. Рентгенофазовый анализ не позволяет отличить одну модификацию от другой, в то время как на спектрах комбинационного рассеяния света (КРС) такое отличие заметно.

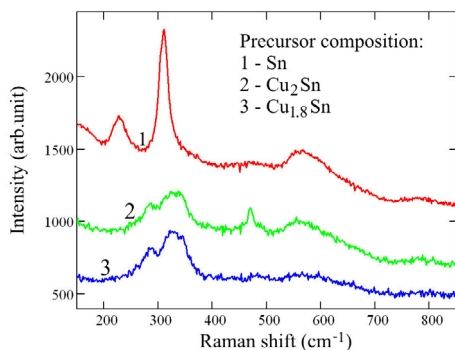


Рис. Спектры КРС для образцов сульфидов, сформированных в результате отжига в парах серы при температуре подложки 420°C в течение 20 минут из слоя металлизации различного состава. Давление паров серы при этом составляло 10^{-2} мм рт. ст.

В данной работе представлены результаты исследования КРС на плёнках сульфидов, сформированных из металлических слоёв различного состава (см. рисунок). Показано, что в условиях обеднения медью удаётся сформировать плёнку Cu_2SnS_3 смеси тетрагональной и моноклинной модификаций с некоторой степенью упорядочения в катионной подрешётке. Для этих модификации характерны пики КРС, с волновыми числами 290, 335 и 350 см^{-1} [4]. Наиболее разупорядоченная модификация Cu_2SnS_3 — кубическая даёт пики КРС на значениях волновых чисел 303 и 360 см^{-1} , каковых на рисунке не наблюдается.

Малые вариации состава металлического прекурсора существенно влияют на фазовый состав формируемой в ходе отжига плёнки сульфида. В частности, наличие нежелательной примеси сульфида меди CuS в плёнке Cu_2SnS_3 всегда наблюдается в условиях стехиометрического состава прекурсора $\text{Cu}:\text{Sn} = 2:1$ в атомных долях [4]. На рисунке соединению CuS отвечает пик KPC, соответствующий рамановскому сдвигу в 470 см^{-1} . Использование прекурсора, который обеднён медью, начиная с соотношения элементов $\text{Cu}:\text{Sn} = 1,8:1$ в атомных долях, позволяет сформировать плёнку Cu_2SnS_3 без примеси CuS. Этот эффект объясняется в литературе [2] особенностями физико-химических процессов, происходящих на границе раздела конденсированная среда — паровая фаза. В ходе высокотемпературного отжига могут формироваться молекулы относительно летучего сульфида олова SnS , которые покидают плёнку и вызывают в ней дефицит олова. Для предупреждения такого явления и приходится корректировать исходный состав металлизации-прекурсора.

Литература

1. *W. Herche*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017, 590—595.
2. *V. R. M. Reddy*, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 2019, 76, 39.
3. *Jie Jiang*, Solar Energy, 2019, 194, 986—994.
4. *M. Y. Zaki*, Scientific Reports - Nature, 2022, 12, 7958.
5. *A. B. Буданов*, Конденсированные среды и межфазные границы, 2019, 21, 24—29.

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА МЕЖСЛОЕВЫХ ОБЛАСТЕЙ МНОГОСЛОЙНЫХ ИНТЕРФЕРЕЦИОННЫХ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ БЕРИЛЛИЯ ДЛЯ ЭУФ ДИАПАЗОНА

А. У. Гайсин¹, С. С. Сахonenков¹, Е. О. Филатова¹

¹*Санкт-Петербургский государственный университет,
ул. Ульяновская, д. 1, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: a.gaisin@spbu.ru*

Благодаря малой плотности, а как следствие, малому поглощению практически во всем спектральном диапазоне рентгеновский лучей, бериллий является чрезвычайно перспективным материалом для исполь-

зования в качестве слабопоглощающего материала для многослойных интерференционных наноструктур в рентгеновском диапазоне и диапазоне экстремального ультрафиолета [1—3]. Более того, впервые было показано, что в диапазоне длин волн выше 17,1 нм Ве может действовать и как рассеивающий материал, одновременно обеспечивая рекордные значения пиковых коэффициентов отражения и спектральной селективности [4].

Перспектива использования многослойных зеркал на основе пар Mo/Ве и Ru/Ве на длине волны 11.2—12.4 нм для нужд нанолитографии и многослойных зеркал Al/Ве на длине волны выше 17.1 нм в качестве отражающих элементов космических телескопов для солнечной астрономии привела к возобновлению экспериментальных работ по созданию высокоотражающих многослойных наноструктур на основе бериллия, которые были прекращены в начале столетия во многом из-за высоких санитарных норм при работе с бериллием.

Однако, полученные ранее экспериментально показатели отражения для многослойных зеркал Mo/Ве [1], Ru/Ве [2] и Al/Ве [4] были существенно далеки от теоретически возможных. Исследователи связывают падение отражательной способности как правило с ростом межслоевой шероховатости и взаимодиффузии основных слоев. Для подбора эффективных методов интерфейс инжиниринга требуется детальное исследование состава и протяженности межслоевых областей. Помимо этого, не менее важны исследование стабильности поверхностных областей под действием низкотемпературных процессов окисления и влияния высокотемпературных процессов на качество интерфейсов во всей структуре.

Традиционные методы изучения состава межслоевой области, как правило, носят разрушающий характер, и поэтому не могут дать полной объективной информации о строении интерфейса. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), являясь неразрушающим методом, позволяет проводить послойный фазовый химический анализ структуры путем изменения угла эмиссии электронов при фиксированной энергии возбуждающих фотонов.

В рамках нашей работы методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии проведено исследование состава модельных систем и многослойных наноструктур Mo/Ве, Ru/Ве и Al/Ве. Показано формирование бериллидов молибдена в зависимости от порядка напыления в многослойных зеркалах Mo/Ве: MoBe₂ на границе Mo на Ве, MoBe₁₂ — Ве на Mo [5]. Продемонстрировано влияние на состав межслоевой области внесения барьерных слоев Si и В₄C [6]. Исследована термическая стабильность

многослойных структур Mo/Be с и без барьерных слоев [7]. В модельных системах Ru/Be обнаружено образование бериллидов рутения. Исследовано влияние на состав межслоевой области введения барьерного слоя молибдена, приводящего к росту отражательной способности зеркал. Проведен анализ влияния низкотемпературных процессов окисления на качество структуры приповерхностных областей в многослойных наноструктурах Al/Be.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-72-20125-П. Авторы также выражают свою благодарность Междисциплинарному ресурсному центру по направлению «Нанотехнология», ресурсным центрам «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Физические методы исследования поверхности» Научного парка СПбГУ и Курчатовскому комплексу синхротронно-нейтронных исследований НИЦ «Курчатовский институт» (Лабораторный модуль ЭСХА) за проведенные исследования.

Литература

1. Montcalm, C., Bajt, S., Mirkarimi, P. B., Spiller, E. A., Weber, F. J., & Folta, J. A. (1998, June). In *Emerging Lithographic Technologies II* (Vol. 3331, pp. 42—51). SPIE.
2. Bajt, S., Behymer, R. D., Mirkarimi, P. B., Montcalm, C., Wall, M. A., Wedowski, M., & Folta, J. A. (1999, November). In *EUV, X-Ray, and Neutron Optics and Sources* (Vol. 3767, pp. 259—270). SPIE.
3. Polkovnikov, V. N., Salashchenko, N. N., Svechnikov, M. V., & Chkhalo, N. I. (2020). *Physics-Uspekhi*, 63(1), 83.
4. Chkhalo, N. I., Pariev, D. E., Polkovnikov, V. N., Salashchenko, N. N., Shaposhnikov, R. A., Stroulea, I. L., ... & Zuev, S. Y. (2017). *Thin Solid Films*, 631, 106—111.
5. Kasatkov, S. A., Filatova, E. O., Sakhonenkov, S. S., Gaisin, A. U., Polkovnikov, V. N., & Smertin, R. M. (2019). *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(42), 25747—25755.
6. Filatova, E. O., Sakhonenkov, S. S., Kasatkov, S. A., Gaisin, A. U., Fateeva, E. S., Smertin, R. M., & Polkovnikov, V. N. (2020). *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(41), 22601—22609.
7. Gaisin, A. U., Karataev, A. V., Solomonov, A. V., Pleshkov, R. S., Chkhalo, N. I., & Filatova, E. O. (2021). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(41), 23978—23985.

ЛОКАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЕЙ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА

**О. А. Гогина^{1*}, Ю. В. Петров¹, О. Ф. Вывенко¹, S. Kovalchuk²,
К. Bolotin²**

¹*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия.*

²*Free University of Berlin, Berlin, Germany.*

**o_gogina@mail.ru*

Создание источников одиночных фотонов (ИОФ) является актуальной задачей для развития технологий квантовых вычислений и квантовой криптографии [1]. Благодаря люминесцентным свойствам собственных и ионно-индуцированных дефектов в широкозонном гексагональном нитриде бора (h-BN) возможно создание таких источников с последующим приложением в квантовых технологиях [2]. Поиск методов, которые бы позволили локально управлять свойствами таких источников — одно из приоритетных экспериментальных направлений исследования свойств этого материала. Основным преимуществом h-BN перед другими широкозонными полупроводниками является то, что возможно создание ИОФ, которые будут излучать фотоны как при низких температурах, так и при комнатной, а его характерные полосы люминесценции наблюдаются в широком диапазоне длин волн: 200—700 нм [3—4].

В работе исследовались различные тонкие кристаллы h-BN на кремниевых подложках. Облучение ионами выполнено на образцах, представленных К. Ватанабе и Т. Танигучи (National Institute for Materials Science, Japan), а сами тонкие чешуйки получены методом эксфолиации с последующим переносом на подложку Si₃N₄/Si [5]. На сканирующем ионно-гелиевом микроскопе Zeiss Orion образцы облучались ионами He⁺ с энергией $E_{\text{He}}=30$ кэВ с дозами в диапазоне $5 \cdot 10^{13} — 1 \cdot 10^{16}$ 1/см². Исследование влияния облучения электронным пучком на люминесцентные свойства h-BN проведено на образцах компании Ossila, которые также получены методом отщепления от большого монокристалла с заявленной чистотой 99.99 % и последующего переноса на подложку из кремния. Облучение электронами выполнено на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Zeiss SUPRA 40VP с системой регистрации Gatan Mono CL3+ в режиме непрерывного сканирования электронным пучком с энергией 5 кэВ и током 3 нА.

Установлено, что исследуемые образцы обладают характерными полосами люминесценции с энергиями 1.9 эВ, 3.9 эВ и 5.8 эВ. В результате облучения ионами He^+ практически полностью гасится люминесценция у всех наблюдаемых полос, что, вероятнее всего, связано с образованием центров безызлучательной рекомбинации, для полосы 5.8 эВ, и уменьшением концентрации точечных дефектов, отвечающих за полосы 1.9 и 3.9 эВ. Также было замечено, что при последующем длительном сканировании электронным пучком происходит не только восстановление интенсивности полосы 1.9 эВ, но и её дальнейший быстрый рост. Интенсивность люминесценции после такого комплексного воздействия в среднем на 20 % превосходит интенсивность исходного образца. Явление, которое могло бы описать такой эффект, описано в работе по исследованию свойств радиационных дефектов GaAs, где было показано, что воздействие электронным пучком стимулирует появление электронно-дырочных пар, вызывая рекомбинационно-усиленную миграцию дефектов, которая, в свою очередь, приводит к перестройке центров рекомбинации в новые центры люминесценции [6]. Эксперименты с образцами Ossila показали, что облучение электронным пучком приводит к образованию новых центров люминесценции с энергией 3.9 эВ. Можно предположить, что в процессе облучения произошло осаждение углеводородов из остаточных газов в камере, из-за чего увеличилась концентрация углеродосодержащих дефектов приписываемых данной полосе [7, 8].

Комбинированное ионное и электронное облучение стимулирует разгорание полосы 1.9 эВ, а полоса 3.9 эВ растёт при длительном электронном сканировании необлучённого ионами образца.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-22-00067, <https://rscf.ru/project/23-22-00067/>. Экспериментальная часть выполнена на оборудовании междисциплинарного ресурсного центра по направлению “Нанотехнологии” научного парка СПбГУ.

Литература

1. Aharonovich I., Englund D. and M. Toth., Nature Photonics, 2016, 10(10), 631—641.
2. Bourrellier R., Meuret S., Tararan A. et al, Nano letters, 2016, 16(7), 4317—4321.
3. Grosso G., Moon H., Lienhard B et al., Nature Communications, 2017, 8(1), 1—8.

4. Castelletto S., Inam F. A., Sato S. et al., Journal of Nanotechnology, 2020, 11, 740–769.
5. Taniguchi T., Watanabe K., Journal of crystal growth, 2007, 303, 525—529.
6. Pons D., Bourgoin J., Journal of Physics C: Solid State Physics, 1985, 18(20), 3839.
7. Pelini T., Elias C., Page R. et al., Physical Review Materials, 2019, 3(9), 094001.
8. Vokhmintsev A., Weinstein I. and Zamyatin D., Journal of Luminescence, 2019, 208, 363—370.

БИОМИМЕТИЧЕСКИЕ ГИБРИДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ БИОИНСПИРИРОВАННОГО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА

**Д. Л. Голощапов¹, А. А. Емельянова¹, Ю. А. Ипполитов¹,
Н. С. Буйлов¹, В. М. Кашкаров¹, П. В. Середин¹**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный медицинский университет
им. Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия
goloshchapov@phys.vsu.ru*

Биологический нестехиометрический нанокристаллический гидроксиапатит кальция (ГАп), из которого состоят минеральные фазы кости и зубов, сильно отличается от стехиометрического гидроксиапатита [1, 2]. При этом свойства минерализованной ткани напрямую зависят от локального химического и композиционного состава, стехиометрии, а также дефектной структуры ГАп, что обусловлено замещением основных функциональных молекулярных групп/ионов в кристаллической решетке биоапатита [2, 3].

Дефектный карбонат-замещенный гидроксиапатит (кГАп), приближённо может быть описан следующей формулой $\text{Ca}_{4-x}^{\text{I}}\text{Me}_x^{\text{I}}\text{Ca}_{6-y}^{\text{II}}\text{Me}_y^{\text{II}}(\text{HPO}_4)_z(\text{PO}_4)_{6-z-k}(\text{CO}_3)_k(\text{OH})_{2-l-m}(\text{Cl})_l(\text{F})_m$ [1]. При этом в биогенных материалах Me^{I} — это позиции в решетке ГАп, которые могут быть заняты атомами металлов Mg, Na, Fe, Sr etc. Низкоконцентрационные замещения обеспечивают реализацию биоапатитом различных биологических функций у минерализованной ткани [3], влияют на микроструктуру и т. д. В итоге это позволяет адаптировать

свойства создаваемых функциональных биоматериалов. Актуальной задачей является определение типа примесных элементов в структуре биоапатита, а также их концентрации и влияния на проявляемые минерализованной тканью свойства [1—3].

В данной работе исследовались образцы нестехиометрического нанокристаллического гидроксиапатита (кГАп), а также биомиметические композиты (БК) на их основе, разработанные для восстановления эмали и дентина зубов человека. Образцы кГАп были получены с помощью метода химического осаждения [4]. Изменение концентрации H_3PO_4 в растворе позволило синтезировать нанокристаллические материалы с различной степенью нестехиометрии. В результате изменения соотношения Са/Р были получены материалы с расчётным содержанием CO_3 в структуре нано-ГАп в пределах $1.7\% < x < 2.0\%$. Биомиметические композиты (БК), моделирующие свойства эмали и дентина, были получены с использованием кГАп с процентным содержанием $CO_3 \sim 1,8\%$ и набора основных полярных аминокислот, характерных для зубного матрикса (L-аргинин гидрохлорид, L-гистидин, и L-лизин гидрохлорид). Соотношение минеральной составляющей в композите было выбрано с учётом содержания апатита в эмали и дентине зубов: ~ 95 для композита БК-1 и $\sim 75\%$ для композита БК-2.

Образцы были исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии Libra 120 (Carl Zeiss, Германия). Рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (Thermo Fisher Scientific K-Alpha XPS спектрометра с полусферическим анализатором с двойной фокусировкой 180° и 128-канальным детектором, AlK_α излучение с варьируемым диаметром пучка (50–400 μm), 72W. Рентгеновской дифрактометрии ANKA-PDIFF синхротрона ANKA (Karlsruhe, Германия). $Cu\ Ka1 = 1.5405\ \text{\AA}$. Поток на образец сфокусированного излучения с энергией 10 кэВ составлял $\sim 2 \times 10^{16}$ Вт/м² при токе в канале 100 мА. Размер поперечного сечения пучка, падающего на образец, $\sim 0.5 \times 0.5$ мм. Рамановской микроспектроскопии (РамМикс EnSpectr M532 Scientific Edition, сопряжённого с микроскопом Olympus CX-41, $\lambda=532$ нм, 30 мВт).

С использованием комплекса структурноспектроскопических методик показано, что нанокристаллы гидроксиапатита, синтезированные с помощью метода химического осаждения и биогенного источника кальция, имитируют свойства биогенного апатита, а также имеют морфологическую организацию типа «ядро-оболочка». Для «ядра» нанокристалла СНАр характерен переизбыток по кальцию Са/Р ~ 1.9 . При этом «оболочка» с толщиной ~ 3 —5 нм образована из промежуточ-

ных апатитоподобных фаз, среди которых наиболее вероятными являются октокальций фосфат, дикальций фосфат дигидрат и трикальций фосфат.

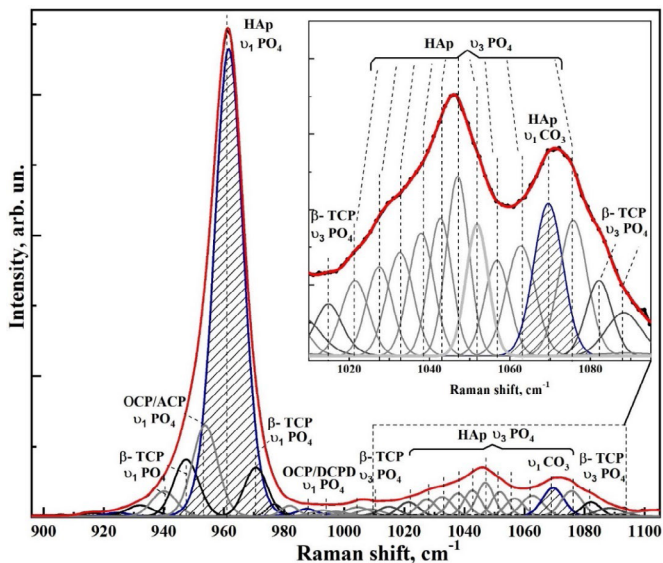


Рис. 1. Экспериментальный рамановский спектральный профиль в области 900—1100 см⁻¹ и его деконволюция для образца биомиметического композита БК-1

Предложенная нами многомодовая модель Рамановского профиля образцов СНАр и биомиметических композитов для спектральной области 900—1100 см⁻¹ (Рисунок 1). позволила точно выделить вклад В-типа замещения карбонатов, с учетом присутствия на поверхности «ядра» нанокристалла НАр различных сторонних промежуточных апатитоподобных фаз. Построенная на основе описанной модели калибровочная функция дает возможность достоверно определять малые концентрации карбоната в структуре гидроксиапатита с применением Рамановского экспресс метода диагностики.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-75-10005).

Литература

1. *Kuczumow A. et al.* Novel Approach to Tooth Chemistry: Quantification of Human Enamel Apatite in Context for New Biomaterials and Nanomaterials Development: 1 // Int. J. Mol. Sci. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. Vol. 22, № 1. P. 279.

2. *Cacciotti I.* Multisubstituted hydroxyapatite powders and coatings: The influence of the codoping on the hydroxyapatite performances // Int. J. Appl. Ceram. Technol. 2019. Vol. 16, № 5. P. 1864—1884.

3. *Tite T. et al.* Cationic Substitutions in Hydroxyapatite: Current Status of the Derived Biofunctional Effects and Their In Vitro Interrogation Methods // Materials. 2018. Vol. 11, № 11. P. 2081.

4. *Goloshchapov D. L.* et al. Importance of defect nanocrystalline calcium hydroxyapatite characteristics for developing the dental biomimetic composites // Results Phys. 2019. Vol. 13. P. 102158.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР И ИХ СЕНСОРНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ

К. А. Гончар

«МГУ имени М. В. Ломоносова», г. Москва, Россия
e-mail: k.a.gonchar@gmail.com, тел.: 8 (915) 0913917

Кремниевые нанонити (КНН), изготовленные методом металл-стимулированного химического травления, проявляют такие свойства, как фотолюминесценция в видимом и инфракрасном диапазонах спектра, низкий коэффициент отражения в видимом диапазоне спектра и усиление комбинационного рассеяния света по сравнению с исходной подложкой кристаллического кремния [1]. Эти свойства могут быть использованы для создания различных оптических сенсоров на их основе. А при покрытии КНН наночастицами благородных металлов данные структуры могут быть использованы в качестве усиливающей сигнал подложки в гигантском комбинационном рассеянии.

Было показано, что пористые кремниевые нанонити можно использовать в качестве чувствительного элемента оптического сенсора на кислород [2]. Кроме того, было впервые продемонстрировано неспецифическое связывание вирусов с поверхностью наноструктур

из массивов кремниевых нанонитей и показана возможность использования этого эффекта для изготовления неспецифического оптического [3] и импеданс-сенсора [4] для диагностики вирусов. А с помощью эффекта гигантского комбинационного рассеяния на КНН, декорированных золотыми наночастицами, был успешно обнаружен билирубин с пределом обнаружения 1 мкМ [5], а на КНН, декорированных серебром, был успешно обнаружен интерналин В, белок, связанный с патогенными бактериями *Listeria monocytogenes* [6].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, <https://rscf.ru/project/22-72-10062/>.

Литература

1. Osminkina L. A., Gonchar K. A., Marshov V. S., Bunkov K. V., Petrov D. V., Golovan L. A., Talkenberg F., Sivakov V. A., Timoshenko V. Yu., NRL, 2012, 7:524.
2. Georgobiani V. A., Gonchar K. A., Zvereva E. A., Osminkina L. A., Phys. Stat. Sol. A, 2018, 215(1), 1700565.
3. Gonchar K. A., Agafilushkina S. N., Moiseev D. V., Bozhev I. V., Manykin A. A., Kropotkina E. A., Gambaryan A. S., Osminkina L. A., Mater. Res. Express, 2020, 7, 035002.
4. Gongalsky M. B., Tsurikova U. A., Samsonova J. V., Gvindzhilii G. Z., Gonchar K. A., Saushkin N. Yu., Kudryavtseva A. A., Kropotkina E. A., Gambaryan A. S., Osminkina L. A., Res. in Mat., 2020, 6, 100084.
5. Kartashova A. D., Gonchar K. A., Chermoshentsev D. A., Alekseeva E. A., Gongalsky M. B., Bozhev I. V., Eliseev A. A., Dyakov S. A., Samsonova J. V., Osminkina L. A., ACS Biomater. Sci. Eng., 2022, 8 (10), 4175.
6. Гончар К. А., Алексеева Е. А., Гюппенен О. Д., Божьев И. В., Калинин Е. В., Ермолаева С. А., Осминкина Л. А., Оптика и спектроскопия, 2022, 130 (11), 1749—1754.

ИК СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ОКРУЖЕНИЯ ГИДРОФИЛЬНЫХ И ГИДРОФОБНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PbS

**И. Г. Гревцева, Т. С. Кондратенко, Е. П. Татьянанина,
Хашеми Джоман Хан**

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: grevtseva_ig@inbox.ru, тел.: 8(473)220-87-80*

Полупроводниковые квантовые точки на основе сульфида свинца (КТ PbS) являются одними из немногих коллоидных материалов с эффективным излучением в ближнем и среднем ИК диапазоне длин волн, что делает их перспективным материалом для современных приложений нанофотоники [1]. Для полупроводниковых КТ, полученных в рамках коллоидного синтеза, характерно значительное влияние поверхностного окружения (растворитель, пассивирующие лиганды, стабилизирующие полимеры, диэлектрические оболочки и др.) на их люминесцентные свойства [2]. Кроме того, поверхностное окружение коллоидных КТ определяет возможность формирования на их основе гибридных экситон-экситонных/плазмон-экситонных наноструктур, обеспечивающих управление люминесцентными свойствами КТ за счет обмена электронными возбуждениями [3]. Исследование механизмов пассивации интерфейсов КТ методом ИК-спектроскопии позволит оптимизировать условия синтеза и обеспечить направленную сборку гибридных систем с управляемыми люминесцентными свойствами.

В данной работе проведен детальный анализ ИК спектров поглощения молекул пассиваторов и КТ PbS, полученных как в рамках гидрофильной, так и гидрофобной методик синтеза (рис. 1).

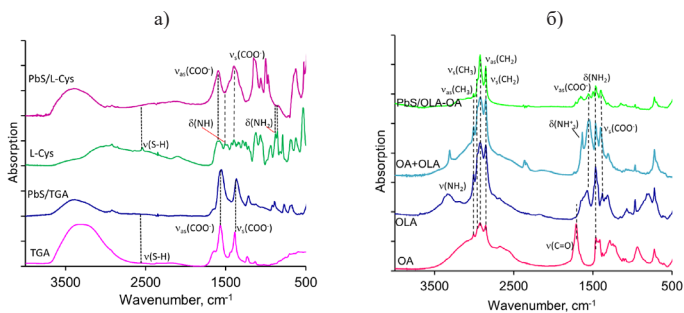


Рис. 1. ИК спектры поглощения пассивирующих лигандов и КТ PbS, полученных в рамках гидрофильного (а) и гидрофобного синтеза (б)

В рамках гидрофильного синтеза коллоидных КТ PbS в качестве пассивирующего лиганда использовали молекулы тиогликолевой кислоты (КТ PbS/TGA) и L-цистеина (КТ PbS/L-Cys) (рис. 2). Формирование гидрофобных КТ PbS осуществляли в присутствии одновременно олеиламина и олеиновой кислоты (КТ PbS/OLA-OA) (рис. 2).

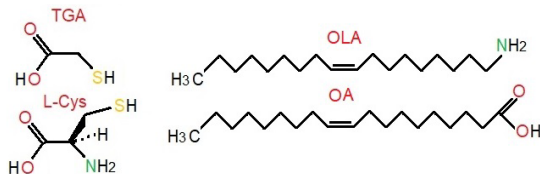


Рис. 2. Структурные формулы пассивирующих лигандов КТ PbS

Анализ ИК спектров поглощения гидрофильных КТ PbS и молекул пассиваторов (рис. 1а) показал, что молекулы TGA обеспечивают пассивацию поверхности КТ PbS за счет тиоловых групп, что подтверждает исчезновение в ИК-спектрах пика колебаний -SH групп (2567 см^{-1}) при адсорбции этих молекул на КТ PbS. В случае молекул L-Cys пассивация интерфейсов КТ PbS осуществляется одновременно посредством -SH и -NH₂ групп. Наряду с исчезновением пика колебаний -SH групп, также наблюдается снижение интенсивности и высокочастотное смещение внеплоскостных деформационных колебаний группы -NH₂ (879 см^{-1} и 855 см^{-1} к 911 см^{-1} и 865 см^{-1} , соответственно), а также низкочастотное смещение полосы деформационных колебаний -NH (от 1510 см^{-1} к 1460 см^{-1}) молекулы L-Cys, указывающее на ее взаимодействие с поверхностью нанокристаллов через аминогруппы. При этом появление в ИК спектрах пиков асимметричных 1567 см^{-1} и симметричных 1388 см^{-1} колебаний карбоксильной группы COO⁻ указывает на то, что молекулы TGA и L-Cys адсорбированы на интерфейсах КТ PbS со свободной карбоксильной концевой группой COO⁻. Такой механизм пассивации обеспечивает высокую гидрофильность поверхности КТ PbS и как следствие коллоидную стабильность с длительным сохранением структурных свойств КТ PbS.

Анализ ИК спектров гидрофобных компонентов синтеза КТ PbS (рис. 1б) указывает на то, что реакция между OLA и OA приводит к образованию аммонийной соли, о чем свидетельствует исчезновение в ИК спектре OA полосы поглощения 1710 см^{-1} карбонильной группы C=O и появлению двух характеристических полос при 1568 см^{-1} и 1400 см^{-1} асимметричных и симметричных колебаний карбоксильной группы

COO⁻. Данная реакция обусловлена способностью OLA отдавать электроны под действием температуры, о чем свидетельствует формирование пика деформационных колебаний -NH₃⁺ при 1633 см⁻¹. Получаемая в результате реакции OLA и OA, аммонийная соль является реакционной средой для формирования КТ PbS. Сопоставление ИК спектров КТ PbS/OLA-OA со спектрами отдельных компонентов синтеза демонстрирует, что пассивация интерфейсов КТ в данном случае преимущественно определяется молекулами OA. Значительное снижение интенсивности асимметричных и симметричных колебаний карбоксильной группы COO⁻ при формировании КТ PbS указывает на их взаимодействие с поверхностью КТ. При этом поверхность КТ PbS определяется преимущественно концевыми группами -CH₃ OA, о чем свидетельствует присутствие в ИК спектре высокоинтенсивных валентных асимметричных и симметричных колебаний -CH₃ (3006 см⁻¹, 2853 см⁻¹) и -CH₂ групп (2960 см⁻¹, 2924 см⁻¹).

Наличие -SH группы в структуре молекул TGA и L-Cys при различных условиях к синтезу (увеличении концентрации пассиватора, повышение температуры реакции), по-видимому, может приводить к нарушению стехиометрии состава КТ PbS, и как следствие формированию структурно-примесных дефектов вблизи интерфейсов КТ, которые в свою очередь являются центрами ловушечного свечения [4]. В свою очередь гидрофобный синтез обеспечивает формирование КТ PbS преимущественно с экситонной люминесценцией.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-3746.2022.1.2

Литература

1. Ushakova E. V., Litvin A. P., Parfenov P. S., Fedorov A. V., Artemyev M., Prudnikau A. V., Rukhlenko I. D., Baranov A. V. ACS Nano, 2012, 6(10), 8913—8921.,
2. Grevtseva I. G., Ovchinnikov O. V., Smirnov M. S., Kondratenko T. S., Alaa Hussein, Egorov N., Vozgorkova E. A. Journal of Nanoparticle Research, 2023, 25, 118.
3. Grevtseva I. G., Ovchinnikov O. V., Smirnov M. S., Tikhomirov S. A., Ponyavina A. N., Nguyen Thanh Binh, Pham Hong Minh, Turishchev S. Yu., Chuvankova O. A., Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2022, No. 6, Vol. 86.
4. Гревцева И. Г., Смирнов М. С., Чирков К. С., Овчинников О. В., Конденсированные среды и межфазные границы, 2023, № 2, 182—189.

ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ПОЛУПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК GaSb-MnSb

М. Джалолиддинзода¹, А. А. Биктеев², С. Ф. Маренкин^{1,3}

¹*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Факультет институт новых материалов и нанотехнологий, Москва, Россия*

²*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

³*Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова «РАН», Москва, Россия*

e-mail: muhammad.9095@mail.ru, тел.: 8 (926) 7212016

Интерес к композитам ферромагнетик-полупроводник обусловлен возможностью создания гранулированных структур. Гранулированная структура является альтернативой мультислоев, обладающих эффектами гигантского и туннельного магнитосопротивления (ГМС и ТМС). На основе этих эффектов создаются устройства спинтроники [1]. Получение гранулированных структур может проводиться более доступными технологиями чем молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ), которая обычно используется для получения мультислоев. Выбор объекта исследования был обусловлен тем, что MnSb ферромагнетик с высокой температурой Кюри (~ 580K) и полупроводник GaSb обладает высокой подвижностью носителей заряда, а также тем, что система GaSb-MnSb относится к системе эвтектического типа [2].

Для синтеза были выбраны эвтектический и заэвтектический составы. Синтез проведен из высокочистых элементов Sb и Ga с общим содержанием примесей 10^{-3} масс. %. Перед синтезом Mn был подвергнут дополнительной очистке, пересублимацией в вакууме. Синтез проводили в кварцевых ампулах вакуумно-ампульным методом. Были получены два сплава составов 30 мол. % GaSb — 70 мол. % MnSb и 59 мол. % GaSb — 41 мол. % MnSb. Используя разные скорости кристаллизации эти композиты были получены с разной степенью дисперсности. Идентификацию образцов проводили с помощью РФА, ДТА и исследованием микроструктур. На рис. 1—2 представлены рентгенограмма и микрофотография синтезированных образцов, анализ которых показал, что сплавы состояли из двух фаз GaSb и MnSb.

Было исследовано влияние дисперсности на электрические и магнитные свойства и установлена корреляция размеров ферромагнитной фазы

на температуру Кюри. Уменьшение размеров MnSb приводило к падению температуры Кюри, и появлению отрицательного магнетосопротивления. Это свидетельствовало о спиновой поляризации в композитах. Линейный характер изменения сопротивления от температуры и магнитного поля показывает возможность использования композитов в качестве сенсоров температуры и магнитного поля.

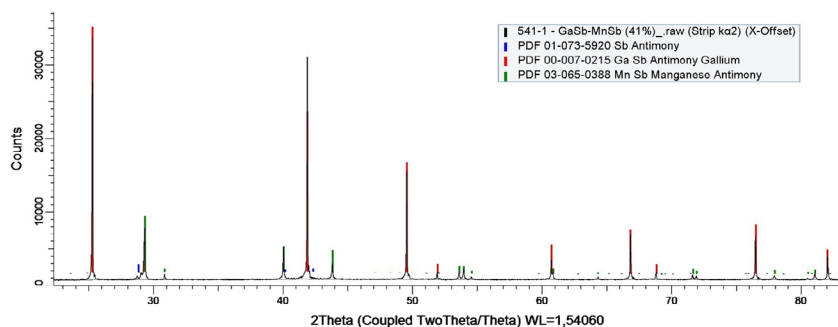


Рис. 1. Дифракционная картина полученного композита GaSb-MnSb (41 мол. %)

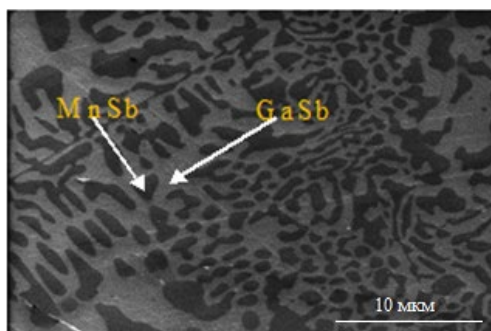


Рис. 2. Микрофотография синтезированного GaSb-MnSb (41 мол. %)

С увеличением скорости кристаллизации происходило уменьшение размеров и более равномерное распределение этих фаз. Данные РФА и СЭМ коррелировали с результатами магнитных и электрических измерений.

Данная выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20220.

Литература

1. Маренкин С. Ф., Изотов А. Д., Федорченко И. В., Новоторцев В. М., Синтез магнитогранулированных структур в системах полупроводник-ферромагнетик, Журнал Неорганической Химии, 2014, 60, С. 343—348.
2. Маренкин С. Ф., Трухан В. М., Труханов С. В., Федорченко И. В., Новоторцев В. М., Фазовые равновесия, электрические и магнитные свойства эвтектики системы GaSbMnSb, Журнал Неорганической Химии, 2013, 58, № 11, С. 1—6.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ MeO (Me = Ni, Cu) С ГРАФЕНЫМ СЛОЕМ В КОМПОЗИТЕ MeO_x/MWCNT (Me = Ni, Cu) НА ОСНОВЕ XANES СПЕКТРОСКОПИИ

**В. О. Дмитриев¹, В. А. Шматко¹, И. В. Ершов²,
М. Бржезинская³, Г. Э. Яловега¹**

¹Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия

²Донской государственный технический университет,
г. Ростов-на-Дону, Россия

³Берлинский центр материалов и энергии имени Гельмгольца,
Берлин, Германия

e-mail: vdmित्रiev@sfedu.ru, тел.: 89094359357

Композиты на основе углеродных нанотрубок и оксидов переходных металлов обладают уникальными физическими и химическими свойствами, что делает их подходящими для множества применений, включая использование в суперконденсаторах. Целью работы было исследование атомной и электронной структуры и межфазного взаимодействия нанокompозитных материалов на основе оксидов переходных металлов (Cu, Ni) и многостенных углеродных нанотрубок (MWCNT) с помощью метода ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure) или XANES (X-ray absorption near edge structure).

NEXAFS спектры в области К-края поглощения углерода были получены методом полного электронного выхода в Русско-Германской лаборатории на BESSY II. NEXAFS спектры в области К-края поглощения меди были получены с использованием излучения канала вывода КМС-2 на BESSY II [1]. NEXAFS спектры в области К-края поглощения никеля были получены с использованием излучения канала вывода КМС-2 на

BESSY II [2]. NEXAFS спектры за К-краем углерода нанокompозитов по сравнению со спектрами чистых нанотрубок имеют отличия, указывающие на смену гибридизации атомов углерода с sp^2 на sp^3 , наличие связей С-О и образование связей Me—O—C, вследствие взаимодействия нанотрубок с наночастицами оксидов металлов. Анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения за К-краем никеля и меди композитов CuOx/MWCNT и NiOx/MWCNT показал, что локальная структура окружения меди в композите соответствует CuO [1, 3], а никеля — NiO [2]. Анализ изменений локальной и электронной структуры атомов металлов в наночастицах при формировании композитов также проводился по характерным изменениям L-края спектров рентгеновского поглощения меди и никеля. Спектры нанокompозитов CuOx/MWCNT соответствуют спектрам оксида меди CuO с небольшой примесью Cu_2O . NEXAFS спектры за L-края никеля в NiOx/MWCNT схожи со спектрами NiO и $Ni(OH)_2$.

Были созданы структурные модели для расчетов спектров XANES. Модели представляли собой фрагмент одностенной хиральной нанотрубки диаметром около 5 нм и фрагмент кристалла NiO или CuO с поверхностью, соответствующей кристаллографическим плоскостям (111), (200) и (220), ориентированной к графеновому слою стенки нанотрубки (Рисунок 1).

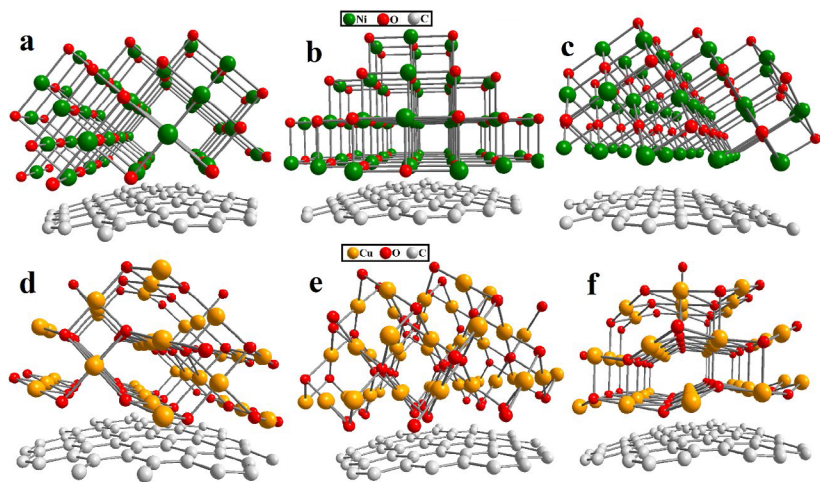


Рис. 1. Структурные модели для расчёта XANES спектров: NiO, ориентированный к графеновому слою стенки нанотрубки плоскостью (220), (200), (111) (a-c); CuO ориентированной к графеновому слою стенки нанотрубки плоскостью (220), (200), (111) (d-f)

Расчёт теоретических XANES спектров за К-краями никеля и меди показал, что хорошее согласие с экспериментом имеет модель, в которой фрагмент кристалла NiO ориентирован к поверхности нанотрубки плоскостью (200), а наиболее вероятной ориентацией CuO является плоскость (220). Согласие теоретических и экспериментальных спектров подтверждает, что взаимодействие оксидов металлов с атомами углеродной нанотрубки происходит с образованием связей Ni-O-C Cu-O-C.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459.

Литература

1. Shmatko V., Yalovega G., Barbashova A., Kuriganova A., Bogoslavskaya E., Smirnova N. Key Engineering Materials, 2016, 683, 215—220.
2. Shmatko V., Leontyeva D., Nevzorova N., Smirnova N., Brzhezinskaya M., Yalovega G. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 2017, 220, 76—80.
3. Shmatko V. A., Ulyankina A. A., Smirnova N. V., Yalovega G. E. Optics and Spectroscopy, 2018, 124 (4), 478—482.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ И СОСТАВА НА ОСАЖДАЕМЫЕ ОРГАНО/МИНЕРАЛЬНЫЕ ПОКРЫТИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЁВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ЭМАЛИ

Д. Л. Голощапов¹, А. А. Емельянова¹, Ю. А. Ипполитов²,
Н. С. Буйлов¹, В. М. Кашкаров¹, Х. С. Шихалиев¹,
А. Ю. Потапов¹, П. В. Середин¹

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Воронежский государственный медицинский университет

им. Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия

anna.liviero238@mail.ru

Исследование процессов роста и кристаллизации нанокристаллического гидрок시아патита кальция (н-ГАп) — материала аналога минеральной составляющей зубного матрикса человека на биогенных подложках вызывает повышенный интерес и обусловлено концепцией биомиметики в стоматологическом материаловедении [1]. В работах ведущих научных

групп показано, что иерархическая организация гидроксиапатита определяется набором условий и зависит от используемой органической матрицы в биокompозитах и покрытиях [2]. В виду этого жидкофазное формирование слоёв гидроксиапатита на поверхности биогенной эмали зубов, рассмотрение роста и кристаллизации требует прецизионных исследований.

В нашем исследовании для создания биотемплейтов использовались образцы зубной ткани, которые были изъяты у пациентов в возрасте 20—25 лет. С использованием низкоскоростного (120 об / мин) алмазного лезвия с водяным охлаждением образцы зубов были разделены на сегменты толщиной ~2 мм. Предобработка поверхности эмали была выполнена путем помещения каждого образца на в щелочной раствор $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Время защелачивания 30 с. После процедуры предобработки образцы были промыты и подвергнуты минерализации. Сопоставление данной процедуры проводилось с классическим применяемым травлением с использованием 38 % раствора ортофосфорной кислоты H_3PO_4 в течении 30 с для получения структурированной поверхности эмали. После процедуры предобработки образцы были промыты и подвергнуты минерализации.

Минерализацию проводили с использованием раствора высокодисперсного наноразмерного карбонат-замещенного гидроксиапатита кальция, который был получен методом химического осаждения [3]. Для формирования биомиметических органоминеральных слоёв в данной работе использовался аминокислотный бустер, в состав которого входит комплекс слабоконцентрированных (до 12 %) предельных и непредельных полифункциональных органических кислот (малеиновая кислота, полиакриловая кислота, лимонная кислота, дистиллированная вода) и полярных аминокислот (аргинин — 0,2 %-1,6 %, лизин — 0,05 %-0,4 %, гистидин — 0,01 %-0,2 %).

Образцы были исследованы с использованием сканирующего зондового микроскопа Femtoscan-001 NT MDT в режиме атомно-силовой микроскопии. Рамановские спектры были получены с использованием микроскопа РамМикс 532 (EnSpectr, Москва, Россия) с длиной волны возбуждающего излучения 532 нм. Сканирование осуществлялось с использованием 60х объектива. Мощность в фокусном пятне 30 мВт. Спектры детектировались в диапазоне $100\text{—}2000\text{ см}^{-1}$ и спектральным разрешением 1 см^{-1} . Наноиндентирование проводилось на установке Nanoindentation Tester (CSM Instruments) по методу Оливера и Фарра. Максимальная величина нагрузки на индентор (алмазная пирамида Берковича) составляла 10.0 мН. Для всех измерений использовали линейный режим нагружения

и разгрузки индентора; время нагружения составляло 45 с, выдержки при максимальной нагрузке 1 с, разгрузки 30 с.

Результаты исследований показывают, что предобработка биотемплекта в растворе фосфорной кислоты приводит к формированию специфической морфологии поверхности эмали с характерным вытравливанием эмалевых стержней [4]. Анализ АСМ изображений образцов этого типа выявил наличие областей неоднородной минерализации со слабой адгезией к эмали и перепадом высот более ~ 350 нм (Рисунок 1 слева).

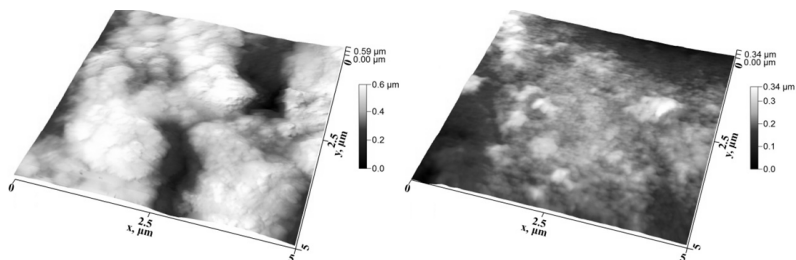


Рис. 1. 3D АФМ изображения участков поверхности эмали: слева — после предобработки поверхности с использованием H_3PO_4 и последующей минерализации, справа — после предобработки поверхности с использованием $Ca(OH)_2$ и аминокислотного бустера, и, последующей минерализации

Предобработка биотемплектов с использованием щелочного раствора привела к образованию более однородной и гомогенной микроморфологии минерализованного слоя с наличием текстуры на всей поверхности (Рисунок 1 справа). На поверхности наблюдается образование более крупных частиц ~ 70 нм в результате срачивания нанокристаллов ГАп в агломераты. Такое поведение может быть следствием дополнительной обработки эмали раствором аминокислотного бустера, который, как показано в ряде работ [5], способствует направленной агрегации нанокристаллического гидроксиапатита.

Исследования методом рамановской микроспектроскопии и наноиндентирования коррелируют с результатами АСМ и показывают, что, что предобработка биотемплекта в щелочном растворе $Ca(OH)_2$ и аминокислотном бустере и выполненная последующая минерализация с использованием н-ГАп приводят к формированию минерализованного слоя с высокой структурной организацией, однородностью и улучшенными механическими характеристиками. В частности, наноиндентирование показывает увеличение (~ 15 %) величины нанотвердости в области

эмалевых стержней по сравнению с аналогичной величиной для здоровой природной эмали.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-15-00026).

Литература

1. Zhao H. et al. Natural tooth enamel and its analogs // Cell Rep. Phys. Sci. 2022. Vol. 3, № 7. P. 100945.
2. Li Q. et al. Biomimetic mineralization based on self-assembling peptides // Chem. Soc. Rev. 2023. Vol. 52, № 5. P. 1549–1590.
3. Buddhachat K. et al. Elemental Analysis of Bone, Teeth, Horn and Antler in Different Animal Species Using Non-Invasive Handheld X-Ray Fluorescence // PLOS ONE. 2016. Vol. 11, № 5. P. e0155458.
4. Tanaka O. et al. Dental enamel roughness with different acid etching times: Atomic force microscopy study // Eur. J. Gen. Dent. 2012. Vol. 1, № 3. P. 187–191.
5. Erceg I. et al. Comparison of the Effect of the Amino Acids on Spontaneous Formation and Transformation of Calcium Phosphates: 7 // Crystals. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. Vol. 11, № 7. P. 792.

РАМАНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В СЛОЯХ СВЕРХСТРУКТУРЫ GaN/ AlN, ВЫРАЩЕННОЙ НА КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

**К. А. Еремеев¹, Н. А. Курило¹, П. В. Середин¹,
Д. Л. Голощапов¹, Н. С. Буйлов¹, А. С. Леньшин¹,
А. М. Мизеров², Ш. Ш. Шарофиддинов^{2,3}**

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

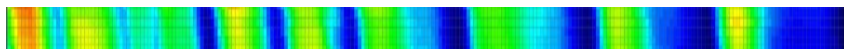
²Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия

³ФТИ им А. Ф. Иоофе РАН, Санкт Петербург, Россия
e-mail: kjcnz2001@gmail.com, тел.: 8 (473) 2208363

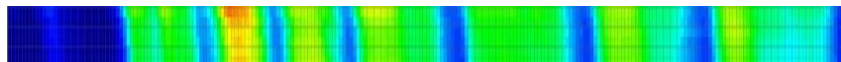
Исследование эпитаксиального роста нитрида галлия на подложке SiC является актуальным в связи с поиском новых материалов для создания эффективных полупроводниковых приборов. Актуальной

задачей является снижение остаточных напряжений в слоях сверхрешетки, вызванных несоответствием параметров решетки между материалом и подложкой, а также различие в коэффициенте температурного расширения (КТР) этих материалов. Целью исследований было определение величины остаточных напряжений в сформированной сверхрешетке GaN/AlN, выращенной на карбиде кремния. Исследования были проведены с использованием метода Рамановской микроспектроскопии. Спектры были получены с использованием конфокального Рамановского микроскопа РамМикс 532 (EnSpectr, Москва, Россия) с длиной волны возбуждающего излучения 532 нм. Сканирование осуществлялось с использованием 60хобъектива. Мощность в фокусном пятне 30 мВт. Спектры детектировались в диапазоне 100—2000 см^{-1} и спектральным разрешением 1 см^{-1} . Исследование пространственной области образца производилось с использованием двухосевой моторизованной подвижки с шагом 0.3 мкм вдоль всей структуры образца.

С использованием Рамановского микроскопа были получены спектры в геометрии $x(zy)\bar{x}$ и выполнено гиперспектральное картирование исходя из расчета интегральных площадей мод $E_2^H(\text{GaN})$ (рис. 1) и $E_2^H(\text{AlN})$ (рис. 2). Для каждой пространственной точки образца измерялся спектр Рамановского рассеяния и регистрировалась интенсивность Рамановской моды E_2^H . Значения интенсивности были соотнесены со значениями цветовой шкалы, где синий соответствует минимальному значению, а белый максимальному.



*Рис. 1. Картирование образца сверхрешетки
на основе выбранной полосы $E_2^H(\text{GaN})$ в геометрии $x(zy)\bar{x}$*



*Рис. 2. Картирование образца сверхрешетки
на основе выбранной полосы $E_2^H(\text{AlN})$ в геометрии $x(zy)\bar{x}$*

Определение величины остаточных напряжений в слоях сверхструктуры было основано на вычислении спектрального сдвига мод

$E_2^H(\text{GaN})$ и $E_2^H(\text{AlN})$ в сравнении с их положением в ненапряженном материале. Результаты представлены с помощью графика зависимости остаточных напряжений от расстояния до подложки, т. е. от толщины структуры (рис. 3). Результат исследования позволяет сделать вывод, что для получения наименее напряженного слоя, достаточно вырастить 4 слоя сверхрешетки.

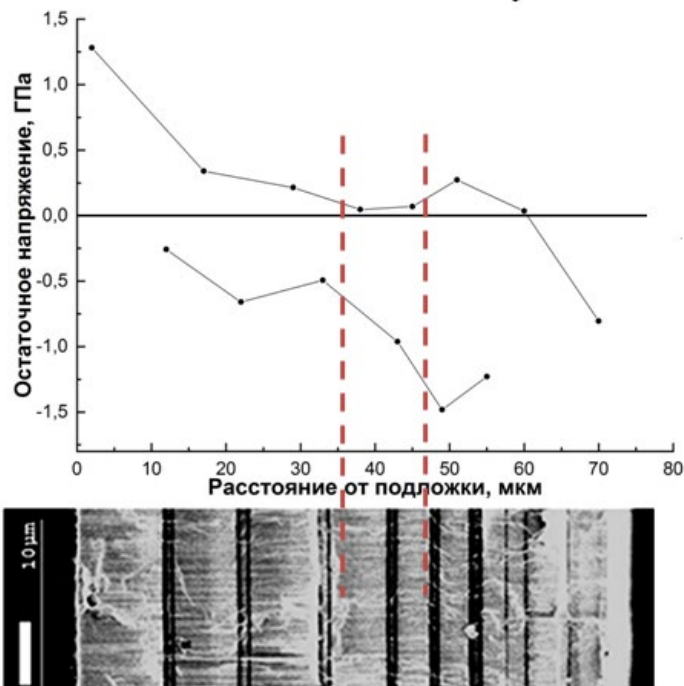


Рис.3. Зависимость напряжений в слоях GaN/AlN и AlN от расстояния от подложки (толщины сверхструктуры)

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

КОМПОЗИТНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ДЕКОРИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА И ЗОЛОТА КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ БАКТЕРИЙ

**А. А. Ерохина¹, Д. А. Назаровская¹, О. Д. Гюппенен¹,
П. А. Домнин¹, И. И. Циняйкин¹, С. А. Ермолаева²,
К. А. Гончар¹, Л. А. Осминкина¹**

¹*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия*

²*Национальный исследовательский центр эпидемиологии
и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи, Москва, Россия
e-mail: erokhina.aa19@physics.msu.ru, тел.: +7 (916) 2811300*

Бактериальные инфекции являются одной из наиболее распространенных проблем здравоохранения во всем мире. Они могут вызывать различные заболевания, от легких до тяжелых, и даже стать причиной смерти. Важными факторами успешного и эффективного лечения являются простые и быстрые методы выявления возбудителя заболевания. Существует множество способов диагностики бактерий, но многие из них являются слабоэффективными, затратными, требуют много времени или не обладают достаточной точностью [1].

Одним из наиболее перспективных материалов для создания сенсоров для быстрой диагностики бактерий, являются композитные наноструктуры кремния, декорированные наночастицами благородных металлов [2—4]. При этом диагностика осуществляется с использованием неразрушающего неинвазивного оптического метода гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). Наноструктуры кремния имеют уникальные оптические свойства, которые позволяют эффективно адсорбировать бактерии с высокой эффективностью [4]. Метод ГКР, в свою очередь, позволяет анализировать молекулярные свойства образцов, в том числе бактерий, и определять их химический состав [5].

Целью исследования являлась разработка новых функциональных сенсорных систем на основе массивов нанонитей кремния, декорированных наночастицами золота и серебра (AuAg@КНН), для быстрой идентификации бактерий методом ГКР. В качестве модельного объекта для исследования выбраны внутриклеточные бактерии рода *Listeria* *Innocua*. Листерияоз (заболевание, вызываемое видом *Listeria monocytogenes*) трудно поддается лечению и вызывает смертельный исход примерно у 20 %

инфицированных, причём значительная часть смертей вызвана длительной диагностикой и несвоевременным лечением.

В результате были получены композитные материалы на основе КНН и наночастиц AuAg, исследована морфология полученных образцов и дсорбция бактерий на их поверхность методами сканирующей электронной микроскопии. Продемонстрирована возможность детектирования бактерий *L. Inpposua*, адсорбированных на AuAg@КНН методом ГКР, вплоть до концентраций $6.4 \cdot 10^6$ кое/мл. Такие биосенсоры имеют ряд преимуществ по сравнению с другими методами идентификации бактерий, а именно быстрый (время снятия отклика составляет 2 с) и точный результат, возможность использования в реальном времени, отсутствие необходимости в окрашивании и применении специальных маркеров.

Представленные результаты являются перспективными для разработки новых экспрессных высокочувствительных методик идентификации микроорганизмов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, <https://rscf.ru/project/22-72-10062/>.

Литература

1. Дудчик Н. В. и др. Сравнительный анализ результатов культурального и молекулярно-генетического метода при выявлении и идентификации бактерий *Listeria monocytogenes* в смывах в модельном эксперименте // Здоровье и окружающая среда. — 2018. — № 28. — С. 24—27.
2. Agafilushkina S. N. et al. Raman signal enhancement tunable by gold-covered porous silicon films with different morphology // Sensors. — 2020. — Т. 20. № 19. — С. 5634.
3. Kartashova A. D. et al. Surface-enhanced Raman scattering-active gold-decorated silicon nanowire substrates for label-free detection of bilirubin // ACS Biomaterials Science & Engineering. — 2021. — Т. 8. № 10. — С. 4175—4184.
4. Gongalsky M. B. et al. Double etched porous silicon films for improved optical sensing of bacteria // Journal of The Electrochemical Society. — 2017. — Т. 164. № 12. — С. B581.
5. Gonchar K. A. et al. Optical Express Monitoring of Internalin B Protein of *Listeria Monocytogenes* Pathogenic Bacteria Using SERS-Active Silver-Decorated Silicon Nanowires // Optics and Spectroscopy. — 2022. — Т. 130. № 9. — С. 521—526.

МЕХАНИЗМ МЕЗОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРОКСИДА ЛИТИЯ В ХОДЕ РАЗРЯДА ЛИТИЙ- КИСЛОРОДНОГО АККУМУЛЯТОРА

Т. К. Захарченко^{1,2}, В. В. Исаев^{1,2}, М. В. Авдеев³, А. А. Гулин¹,

А. А. Вольхов^{2,4}, Д. М. Иткис¹, Л. В. Яшина^{1,2}

¹ФИЦ ХФ РАН им. Н. Н. Семенова, Москва, РФ

²МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, РФ

³ОИЯИ, Дубна, РФ

⁴ИОНХ РАН им. Н. С. Курнакова, Москва, РФ

e-mail: t.zakharchenko@chph.ras.ru, тел.: 8 (916) 7003924

На данный момент поиск и разработка новых химических источников тока (ХИТ) с высокой энергоемкостью требует фундаментальных научных исследований и представляет собой актуальную задачу современной электрохимии и химии твердого тела. Одним из перспективных направлений является разработка металл-кислородных аккумуляторов, для которых теоретическая удельная энергия от 2 до 10 раз больше, чем для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА), широко использующихся на данный момент. Наиболее энергоемким среди металл-кислородных аккумуляторов является литий-кислородный аккумулятор (ЛКА), поскольку литий обладает наибольшей удельной емкостью и крайне отрицательным электродным потенциалом. Использование в качестве окислителя кислорода воздуха вместо оксидов переходных металлов также существенно снижает массу таких ХИТ по сравнению с ЛИА.

К сожалению, достижимые на практике удельные характеристики оказываются значительно ниже теоретических вследствие ряда проблем [1]. Образование твердого продукта разряда Li_2O_2 с низкой удельной электропроводностью на поверхности электрода приводит как к снижению разрядной емкости ЛКА, так и к высоким энергозатратам на заряд аккумулятора. Особенностью формирования таких частиц является образование упорядоченных агломератов из пластин — мезокристаллов. Установление механизма формирования таких частиц и выявление влияния внешних параметров на этот процесс является одним из ключевых факторов для разработки заряжаемых высокеемких ЛКА.

В ходе данной работы с использованием методов синхротронной рентгеновской дифракции, малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния и растровой электронной микроскопии продуктов разря-

да предложен механизм формирования агломератов пероксида лития со сложной иерархической структурой. Он включает гомогенную нуклеацию наночастиц и формирование мезокристаллов в поле электрода, их дальнейшее разрастание за счет встраивания ионов в торцы пластин с участием процессов рекристаллизации. Частицы Li_2O_2 , формирующиеся в пористом электроде, содержат пластинчатые мезокристаллические фрагменты, количество которых в ходе разряда увеличивается одновременно с увеличением количества кристаллической фазы Li_2O_2 . Толщина отдельных пластин и период их упаковки в мезокристаллических фрагментах увеличиваются при увеличении плотности тока разряда. При этом общие тенденции формирования мезокристаллов сохраняются при изменении состава электролита — донорности растворителя и содержания воды в нем.

Литература

1. W.-J. Kwak, Rosy, D. Sharon, C. Xia, H. Kim, L. R. Johnson, P. G. Bruce, L. F. Nazar, Y.-K. Sun, A. A. Frimer, M. Noked, S. A. Freunberger, D. Aurbach, Lithium-Oxygen Batteries and Related Systems: Potential, Status, and Future., Chem Rev., 2020, 120, 6626—6683.

ПРОЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТОВ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СПЕКТРАЛЬНЫХ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВАХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S В ПРИСУТСТВИИ ЗОЛОТЫХ НАНОСТЕРЖНЕЙ

А. И. Звягин, Т. А. Чевычелова, О. В. Овчинников

Воронежский государственный университет,

г. Воронеж, Россия

e-mail: andzv92@yandex.ru, тел.: 8 (473) 220-87-80

Экспериментально установлено проявление эффектов плазмон-экситонного взаимодействия в спектральных и люминесцентных свойствах коллоидных квантовых (КТ) точек (Ag_2S , $\text{Zn}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{S}$) в присутствии наночастиц (НЧ) серебра и золота для случаев их различной морфологии (размера, геометрии). Методами ПЭМ показана адсорбция КТ на наночастицы металла, спектроскопическим проявлением данного эффекта являлась трансформация спектров экстинкции света смеси КТ и НЧ. Тушение люминесценции КТ и ускорение ее кинетики также свидетельствует о вза-

имодействии, достаточном для резонансного безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от центров рекомбинационной люминесценции КТ к плазмонным наночастицам.

Формировались структуры на основе квантовых точек Ag_2S средним размером 2.6 нм и плазмонных наностержней золота средним размером 4×25 нм по данным ПЭМ. Подбор компонентов осуществлялся с учетом настройки оптических резонансов в люминесценции КТ Ag_2S (881 нм) и продольного плазмонного резонанса наностержней Au (910 нм) [1]. Подобная настройка резонансов в экстинкции света и люминесценции наноструктур предполагает возможность обмена электронными возбуждениями между компонентами наносистемы [2—3]. В спектрах экстинкции смесей КТ Ag_2S и Au НС гибридная ассоциация проявилась в исчезновении особенности, связанной с экситонным поглощением в КТ Ag_2S , и уменьшением экстинкции двух компонентов в области 400 нм — 600 нм. Полученный спектр экстинкции не является суммой спектров экстинкции компонентов гибридного ассоциата, что косвенно свидетельствует о проявлении взаимодействия в полученной смеси. Спектр люминесценции КТ Ag_2S в присутствии золотых наностержней демонстрирует снижение интенсивности люминесценции в 27 раз. Стоит отметить, что данное тушение нельзя объяснить одним лишь фильтр-эффектом. Аппроксимация кинетики затухания люминесценции позволяет установить время затухания люминесценции. Чистые КТ Ag_2S продемонстрировали среднее время затухания люминесценции в 5.2 нс, в то время как для смеси с золотыми наностержнями — 1.5 нс, то есть в 3.5 раза меньше. Тушение люминесценции, сопровождаемое сокращением времени затухания люминесценции, свидетельствует о резонансном безызлучательном переносе энергии возбуждения от центров излучательной рекомбинации к плазмонным наночастицам в результате плазмон-экситонного взаимодействия. При этом отсутствуют характерные особенности проявления эффекта Перселла в КТ Ag_2S в присутствии Au НС.

Для наблюдения гибридной ассоциации КТ Ag_2S и плазмонных наностержней золота изучали ПЭМ изображение исследуемой смеси. Обнаружено, что плазмонные наночастицы являются центрами адсорбции для квантовых точек. Полученные с помощью ПЭМ, изображения демонстрируют наибольшее скопление КТ вблизи плазмонных наночастиц металлов.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-4408.2022.1.2.

Литература

1. *Vincenzo Amendola et al.*, J. Phys.: Condens. Matter, 2017, 29, 203002;
2. *Grevtseva I. G., et al.*, RSC Advances, 2022. V. 12., № 11, P. 6525—6532.
3. *Grevtseva I.*, Optics Express, 2022, V. 30. № 4. P. 4668—4679.

ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В EsO_2

**Ю. А. Тетерин^{1,2}, М. В. Рыжков³, А. Е. Путков²,
К. И. Маслаков^{1,2}, А. Ю. Тетерин², К. Е. Иванов²,
С. Н. Калмыков¹, В. Г. Петров¹**

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

²НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

*³Институт химии твердого тела УрО РАН,
Екатеринбург, Россия*

e-mail: Teterin_YA@nrcki.ru, тел.: 8 (499) 1969252

На основе результатов расчета плотности электронных состояний EsO_2 релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) построены гистограмма спектра РФЭС (рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) валентных электронов EsO_2 в диапазоне энергий связи от 0 до ~40 эВ (рис. 1) и схема молекулярных орбиталей (МО), позволяющие понять особенности природы химической связи в EsO_2 .

На рис. 1 видно, что электроны внешних валентных (ВМО, от 0 до ~15 эВ) и внутренних валентных (ВВМО, от ~15 до ~40 эВ) молекулярных орбиталей (МО) вносят вклад в сложную структуру спектра РФЭС EsO_2 . Интенсивность линий ВМО в большой степени связана с $\text{Es } 5f$ - и $6d$ -электронами, а ВВМО — с $\text{Es } 6p_{3/2}$ - и $\text{O } 2s$ -электронами.

На основе состава МО рассчитан эффективный заряд Es (для электронной конфигурации (РДВ) $6s^2 6p^6 5f^{10.39} 6d^{1.38} 7s^{0.22} 7p^{0.54}$) в EsO_2 , равный +0.47 электрона, что меньше значения +4, принимаемого в ионном приближении. Такая величина эффективного заряда согласуется с данными, полученными для диоксидов легких актиноидов [1, 2].

Из анализа расчета заселенностей перекрытия АО Es и O по Малликену найдено, что электроны ВВМО на ~33 % ослабляют химическую связь в EsO_2 , обусловленную электронами ВМО.

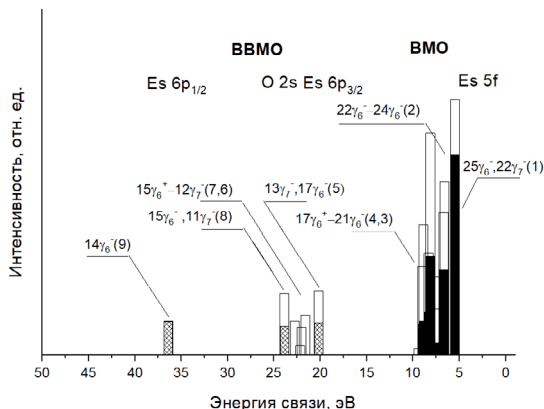


Рис. 1. Гистограмма рассчитанного (РДВ) спектра РФЭС валентных электронов EsO_2 : черным отмечен вклад $\text{Es } 5f$ -электронов, штрихами отмечен вклад $\text{Es } 6p$ -электронов в интенсивность линий

Литература

1. Teterin A. Yu, Ryzhkov M. V., Teterin Y. A., Vukcevic L., Terekhov V. A., Maslakov K. I., Ivanov K. E., Nuclear Technology and Radiation Protection, 2008, 23(2), 34—42.
2. Maslakov K. I., Teterin Yu. A., Ryzhkov M. V., Popel A. J., Teterin A. Yu., Ivanov K. E., Kalmykov St. N., Petrov V. G., Farnan I., International Journal of Quantum Chemistry, 2019, 119(24), e26040.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ FmO_2

**Ю. А. Тетерин^{1,2}, А. Е. Путков², М. В. Рыжков³,
К. И. Маслаков^{1,2}, А. Ю. Тетерин², К. Е. Иванов²,
С. Н. Калмыков¹, В. Г. Петров¹**

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

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: Teterin_YA@nrcki.ru, тел.: 8 (499) 1969252

Полностью релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) выполнен расчет плотности электронных состояний и спектра РФЭС

(рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) валентных электронов FmO_2 в диапазоне энергий связи от 0 до ~ 40 эВ. Показано, что в структуру спектра РФЭС FmO_2 вносят вклад электроны внешних валентных (ВМО, от 0 до ~ 15 эВ) и внутренних валентных (ВВМО, от ~ 15 до ~ 40 эВ) молекулярных орбиталей (МО). Построены гистограмма спектра РФЭС и схема МО, позволяющие понять особенности природы химической связи в FmO_2 .

Рассчитанный спектр РФЭС FmO_2 в диапазоне энергий связи от 0 до ~ 40 эВ можно условно разделить на две области (рис. 1). В первой области спектра от 0 до ~ 15 эВ наблюдается структура, связанная с электронами ВМО. Интенсивность этой полосы в большой степени зависит от Fm 5f- и 6d-электронов, поскольку сечение фотоэффекта для этих электронов значительно выше, чем у Fm 7s-, 7p- и O 2p-электронов.

Во второй области спектра от ~ 15 до ~ 40 эВ наблюдается структура, обусловленная электронами ВВМО, которая возникает из-за сильного перекрытия Fm $6p_{3/2}$ и O 2s АО ближайших атомов.

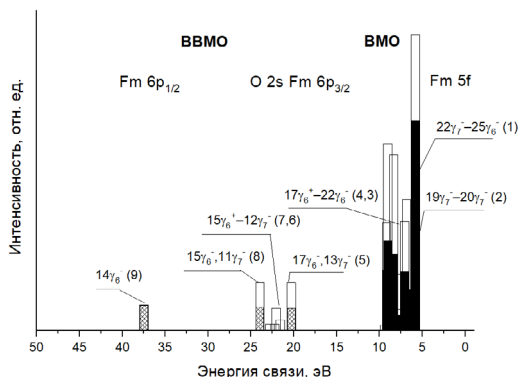


Рис. 1. Гистограмма рассчитанного (РДВ) спектра РФЭС валентных электронов FmO_2 ; черным отмечен вклад Fm 5f-электронов, штрихами отмечен вклад Fm 6p-электронов в интенсивность линий

Из-за ковалентного перекрытия АО фермия и кислорода эффективный заряд фермия Q_{Fm} в FmO_2 становится другим, чем в ионном приближении ($\text{Fm } 6s^2 6p^6 5f^{10} 6d^0 7s^0$, $Q_{\text{Fm}} = +4$ электрона). В этом случае эффективный заряд равен разности зарядов рассчитанной (РДВ) конфигурации Fm $6s^2 6p^6 5f^{11.44} 6d^{1.32} 7s^{0.24} 7p^{0.58}$ для FmO_2 и заряда валентной атомной конфигурации Fm $6s^2 6p^6 5f^{12} 6d^0 7s^2 7p^0$. Эта величина

($Q_{Fm} = +0.42$ электрона) существенно меньше значения ($Q_{Fm} = +4$ электрона), полученного в ионном приближении.

Для оценки вклада электронов различных МО в химическую связь FmO_2 в приближении Малликена в работе методом РДВ были рассчитаны величины заселенностей перекрывания различных МО. В совокупности электроны ВВМО на ~33 % ослабляют связь, обусловленную электронами ВМО.

СТРУКТУРНЫЕ, ТРАНСПОРТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛИРОВАННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(TiO_2)_{100-x}$

С. А. Ивков¹, Э. П. Домашевская¹, К. А. Барков

Воронежский государственный университет,

Воронеж, Россия

e-mail: ivkov@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 2208363

Композитные пленки, состоящие из магнитных металлических наногранул, равномерно распределенных в неметаллической матрице, являются перспективными материалами СВЧ-электроники и спинтроники. Наряду с особыми электрическими, магнитными и оптическими свойствами данных структур одной из наиболее значимых характеристик таких нанокompозитов является наличие в них гигантского магнитосопротивления. Сочетание уникальных особенностей позволяет считать этот класс соединений перспективным для всестороннего изучения и использования в различных областях науки и техники.

В лаборатории физики твердого тела ВГТУ методом ионно-лучевого распыления двух мишеней (одна из сплава $Co_{40}Fe_{40}B_{20}$, вторая из TiO_2) на ситалловую подложку получена серия образцов с градиентом состава и толщины композита $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(TiO_2)_{100-x}$. Толщины нанокompозитов (НК) варьировались от 0,9 мкм до 2,1 мкм. С помощью метода рентгеновской дифракции показано аморфное состояние НК во всем диапазоне концентраций (рис. 1). Сопротивление гранулированных нанокompозитов варьировалось в диапазоне от 3 Ом до 3,65 кОм (рис. 2). Максимальное значение эффекта гигантского магнитосопротивления достигает 44 % в нанокompозите $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_{57}(TiO_2)_{43}$.

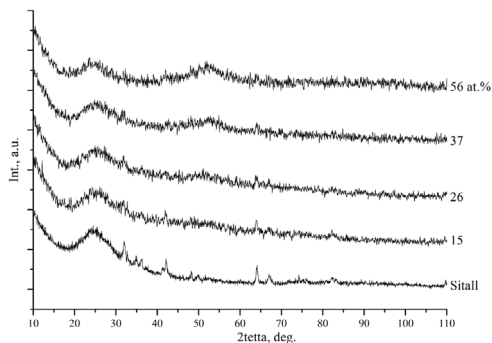


Рис. 1. Дифрактограммы образцов
 $HK (Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(TiO_2)_{100-x}$

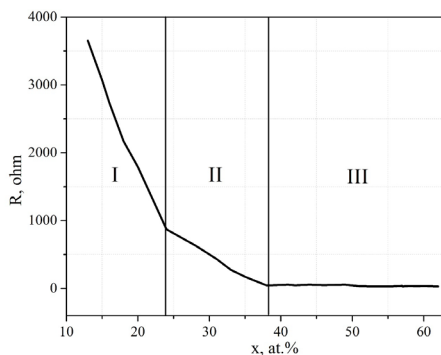


Рис. 2. Концентрационная зависимость сопротивления
 $HK (Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(TiO_2)_{100-x}$

Работа выполнена при поддержке фонда (проект № 075-15-2021-1351).

Методическая проработка выполнена при поддержке гранта № ФЗГУ-2023-0006.

ИЗМЕНЕНИЯ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ ЗУБНОЙ БИОПЛЕНКИ У ЛЮДЕЙ С РАЗЛИЧНОЙ КАРИОГЕННОЙ СИТУАЦИЕЙ

**П. В. Середин¹, Д. Л. Голощапов¹, В. М. Кашкаров¹,
А. Н. Лукин¹, Я. А. Пешков¹, И. Ю. Ипполитов²,
Ю. А. Ипполитов², J. Vongsvivut³, B. Chae⁴, R. Freitas⁵**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный медицинский университет
им. Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия*

³*Australian Synchrotron (Synchrotron Light Source Australia Pty
LTD), Clayton, Australia*

⁴*Pohang Accelerator Laboratory, Pohang, Republic of Korea*

⁵*Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Campinas, Brazil
e-mail: paul@paul.phys.ru, тел.: 8 (473) 2208363*

В нашей работе показано, что предсказание вторичной структуры белковой сети биоплёнки может быть выполнено исходя из анализа полного спектрального профиля полосы Amide I и Amide II, которые являются весьма чувствительными к конформационному окружению в этих структурах [1]. Амидные полосы расположены в той части ИК-спектрального диапазона, которая зачастую является свободной от значительного поглощения фосфолипидами и даже более сложными молекулярными смесями, в т. ч. из состава бактериальных пленок [2, 3]. Для этого были установлены значимые внутригрупповые и межгрупповые различия во вторичной структуре протеинов зубной биопленки для пациентов в норме и при кариозной патологии ротовой полости. Инфракрасные спектры поглощения от образцов биопленки были собраны на оборудовании Infrared Microspectroscopy (IRM) beamline (Australian synchrotron, Victoria, Australia). Для этого использовалась сборка на основе ИК-спектрометра Bruker Vertex 80v, соединенного с FTIR-микроскопом Hyperion 2000 и охлаждаемым жидким азотом узкополосным ртутно-кадмий-теллуридным (МСТ) детектором (Bruker Optik GmbH, Эттлинген, Германия). Для определения влияния кариесогенного статуса, в т. ч. при внешней модуляции, вторичная структура была изучена и визуализирована на основе деконволюции профиля Amide I и Amide II полос в ИК-спектрах. Для проведения указанной процедуры спектральные профили в области 1800—1600 cm^{-1} были проанализированы с помощью программных пакетов обработки данных и моделирования нелинейных кривых Fituk (версия) [4] и Origin Lab (версия). Учитывая выявленные по результатам анализа осо-

бенностей во вторичной структуре белковой сети зубной биопленки в норме, при кариозной патологии, а также с учетом применения таблетированного минерального комплекса с глицерофосфатом кальция, можно убедиться в том, что идеальным кандидатом для скрининга патологий компонента Parallel β -strands. Изменение частоты и процентного содержания этой компоненты в спектрах зубной биопленки являются следствием присутствия в ней кариесогенных бактерий *Mutans streptococci*. Полученные в работе результаты могут лечь в основу методики спектроскопической диагностики изменений (сдвигов) в микробиоме, приводящих к развитию кариозного процесса в ротовой полости, а также фундаментом для выбора оптимальных терапевтических путей лечения кариеса за счет профилактических мероприятий.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 23-15-00060).

Литература

1. Seredin P., Goloshchapov D., Ippolitov Y., Vongsvivut J., Vib. Spectrosc. 2020, 108, 103058.
2. Cheeseman S., Shaw Z. L., Vongsvivut J., Crawford R. J., Dupont M. F., Boyce K. J., Molecules, 2021, 26, 3890.
3. Chirman D., Pleshko N., A Review. Appl. Spectrosc. Rev., 2021, 56, 673–701.
4. Wojdyr M., J. Appl. Crystallogr., 2010, 43, 1126–1128.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК Cu-Si, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

**Е. С. Керсновский¹, И. В. Польшин¹, В. А. Терехов¹,
К. А. Барков¹, Д. А. Нестеров¹, С. А. Ивков¹, А. В. Ситников²**

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия

e-mail: kersnovsky@phys.vsu.ru, тел.: 8 (919) 242-62-29

Система Cu-Si является перспективной для использования в качестве материала анода в литий-ионных аккумуляторах поскольку Si обладает большей теоретической ёмкостью, чем используемый на данный момент графит, а встраивание наноточек Cu в матрицу Si показало улучшение

циклических характеристик аккумуляторных батарей. Кроме того, фаза Cu_3Si включенная в матрицу нанопроволоки Si улучшает свойства переноса электронов. [1, 2] Однако получение таких нанокompозитов подразумевает использование высокоэнергетических методов, таких как магнетронное напыление, ионно-лучевое распыление и т. д. При этом в композитном слое могут происходить сложные межфазные взаимодействия с формированием метастабильных фаз. [3] Поэтому исследование атомного и электронного строения нанокompозитов Cu-Si важны и актуальны.

Нанокompозитные пленки Cu-Si (толщиной ~ 300 нм) с различным содержанием Cu (от 15 до 68 %) были получены с помощью ионно-лучевого распыления составной мишени на подложки Si (100) в вакууме при давлении $1 \cdot 10^{-5}$ торр. Рентгенофазовый анализ проводился на дифрактометре PANalytical Empyrean B. V., элементный состав исследовался на РЭМ JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250, электронное строение валентной зоны пленок Cu-Si анализировалось по ультрамягким рентгеновским эмиссионным $\text{Si L}_{2,3}$ -спектрам на рентгеновском спектрометре-монокроматоре PCM-500 [4] при энергии первичных электронов 1kV и 2kV, что соответствует глубинам анализа 10 и 35 нм соответственно.

По данным рентгеновской дифракции (рис. 1) в плёнке с содержанием Cu — 15 вес. % наблюдаются только низкоинтенсивные дифракционные линии характерные для фазы Cu_3Si , а кремний является рентгенаморфным. С увеличением содержания меди до 36 вес. % на дифрактограмме появляются более интенсивные дифракционные рефлексы при значении угла $2\theta \approx 44.51^\circ$ и 44.96° , соответствующие фазе Cu_3Si в двух модификациях, при этом рефлексы от фазы Cu_3Si пропадают. При дальнейшем увеличении содержания меди до 68 вес. % появляются два низкоинтенсивных рефлекса от фазы Cu_3Si при значениях угла $2\theta \approx 65.36^\circ$ и 82.51° , так же формируется достаточно интенсивный рефлекс при значении угла $2\theta \approx 42.51^\circ$, который характерен фазе оксида меди Cu_2O , а кремний также остается рентгенаморфным.

В тоже время, результаты анализа фазового состава плёнок Cu-Si по рентгеновским эмиссионным $\text{Si L}_{2,3}$ -спектрам показывают, что в плёнке с содержанием меди 15 вес. % формируется фаза аморфного кремния (a-Si), что видно при сравнении спектров данной плёнки и эталона аморфного кремния (рис. 2). С увеличением содержания меди в плёнке до 36 вес. % (рис. 2) в спектре происходит перераспределение интенсивности в пользу максимума при 89,5 эВ, характерного для силицидов. Далее с ростом содержания меди до 68 вес. % выделяются два ярко выраженных максимума интенсивности в области 89,5 эВ (max. А на рис. 2) и 95 эВ (max. В на рис. 2). Наличие максимума А характерно для силицидов металлов, а нали-

чие максимума В свидетельствует о наличии в пленке фазы оксида кремния. Таким образом по данным УМРЭС спектроскопии рост содержания меди в плёнке приводит к формированию силицидов и окислению кремния.

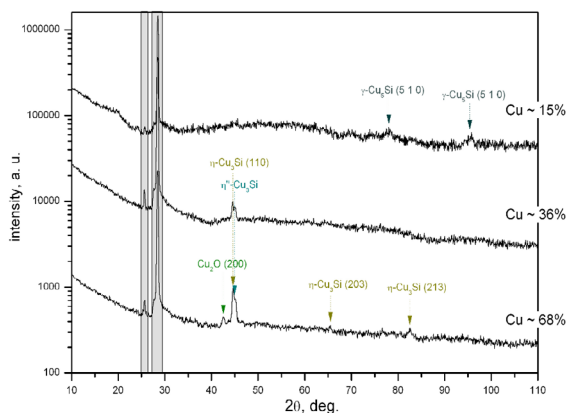


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы нанокompозитных плёнок Cu-Si с содержанием меди 15, 36 и 68 вес. %

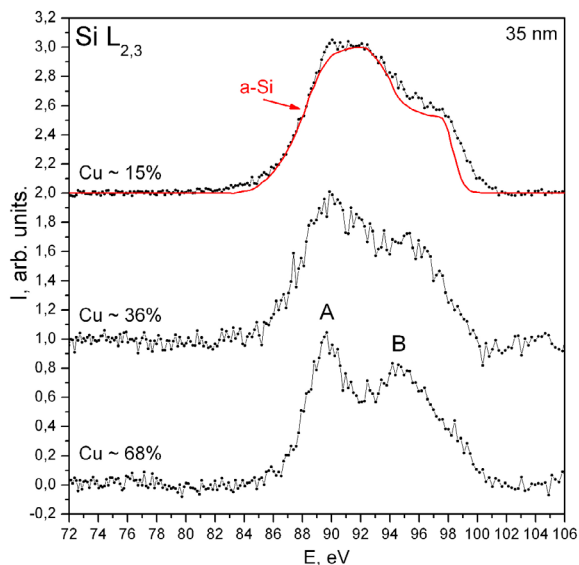


Рис. 2. Рентгеновские эмиссионные Si L_{2,3}-спектры нанокompозитных пленок Cu-Si с содержанием меди 15, 36 и 68 вес. %, а также эталона аморфного кремния (a-Si), полученных при глубине анализа 35 нм

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2).

Работа частично поддержана грантом FZGU-2023-0006 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части получения данных рентгеновской спектроскопии.

Литература

1. H.-J. Ahn et al. Journal of Power Sources 163 211–214 (2006)
2. J. Mater. Chem et al. Journal of The Royal Society of Chemistry 20 (2010)
3. V. A. Terekhov et al. Phys. Solid State 60 p. 1021–1028 (2018)
4. Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев Ультратонкая рентгеновская спектроскопия (Изд-во Ленинградского университета) 132 с. (1971).

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПЛЕНКИ ОКСИДА ОЛОВА НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ МЕТОДОМ ТЕРМИЧЕСКОГО ВАКУУМНОГО НАПЫЛЕНИЯ

**К. Б. Ким¹, С. С. Черненко¹, С. И. Нифталиев¹,
А. С. Леньшин^{1,2}**

¹*Воронежский государственный университет инженерных
технологий, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: ktmkeniya@yandex.ru*

В настоящее время пористый кремний активно применяется в мультисенсорных системах, так как он имеет большую удельную поверхность, что обеспечивает высокую чувствительность к газам [1]. Для увеличения стабильности и селективности системы подложку пористого кремния покрывали пленкой оксида олова. Образцы пористого кремния были получены из пластин монокристаллического кремния (КЭФ, ориентация 100, удельное сопротивление 0,2 Ом·см) электрохимическим анодированием в электролите на основе плавиковой кислоты [2]. Пластины пористого кремния покрывали оксидом оло-

ва методом термического вакуумного напыления (ВУП-4). Давление остаточных газов в камере установки порядка $5 \cdot 10^{-5}$ — 10^{-4} мм рт. ст. Толщина металлической плёнки составляла 200 нм, скорость напыления — 3—5 нм/с.

Морфология полученных гетероструктур была исследована на атомно-силовом микроскопе (АСМ) SOLVER P47 PRO, статистический анализ морфологии поверхности проведен в программе NOVA. Результаты, полученные методом ИК-спектроскопии, позволяют сделать вывод о химических связях и их возможных деформациях на поверхности образцов por-Si (спектрометре Vertex 70 (Bruker) с использованием приставки для НПВО). Фотoluminesцентные свойства измерялись на автоматическом спектрально-люминесцентном комплексе на основе монохроматора МДР-4, длина волны возбуждающего излучения 405 нм.

Полученные результаты показали, что при использовании вакуумно-термического испарения олово гораздо лучше осаждается на пористый, чем на кристаллический кремний. Наблюдается существенное изменение поверхности (пленка распределена равномерно, уменьшается шероховатость поверхности), что существенно влияет на положение и форму полосы ФЛ пористого кремния. Результаты XPS анализа показали, что на поверхности присутствует окисленное олово со степенью окисления ближе к SnO_2 , а также в меньшей степени наблюдается наличие чистого Sn. Полученные нанокomпозиты могут быть использованы для разработки датчиков обнаружения легковоспламеняющихся и токсичных газов. Таким образом, отработанная в рамках исследования методика может успешно применяться для создания композитных материалов с улучшенными свойствами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 22-73-00154 от 28.07.2022 г.)

Литература

1. Al-Enizi A. M., Naushad M., Al-Muhtaseb A. H., Ruksana, Alshehri S. M., Alothman Z. A., Ahamad T. Chem. Eng. J., 2018, 345, 58—66.
2. Kashkarov V. M., Len'shin A. S., Popov A. E., Agapov B. L., Turishchev S. Yu. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2008, 72 (4), 453—458.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФАЗ ШЕВРЕЛЯ

Г. Д. Комаров^{1,2}, А. М. Ионов¹, С. Г. Протасова¹,
Р. Н. Можчиль¹, О. Г. Рыбченко¹

¹ИФТТ РАН, Московская область, г. Черноголовка,
ул. Академика Осипьяна, д.2

²ГУП, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24
e-mail: komarov-2001@yandex.ru, тел.: 8 (985) 8962718

Тройные халькогениды молибдена $M_xMo_6X_8$ (X = халькоген), известные как фазы Шевреля, представляют собой семейство материалов, обладающих многочисленными интересными свойствами. Большой интерес к этим соединениям, открытым более 40 лет назад, вызван их сверхпроводящей критической температурой и верхними критическими полями (50 Тесла при 4,2 К), а также сосуществование магнитного порядка со сверхпроводящим состоянием. В последнее время фазы Шевреля привлекают большое внимание в качестве материала для современных ионных аккумуляторов и в качестве гетерогенных катализаторов фундаментальных каталитических реакций благодаря их уникальному сочетанию низкоординатных атомов молибдена; настраиваемой степени окисления; электронным резервуарам кластера Mo_6 и термостабильности.

Для исследования электронной структуры фаз Шевреля ранее был синтезирован целый ряд соединений. Образцы $PbMo_6S_8$, $SnMo_6S_8$, $CuMo_6S_8$, а также $Mo_6S_6I_2$ были получены методом ампульного синтеза. Стехиометрическая смесь металлов, их сульфидов и серы спекается в запаянной ампуле при температуре 900—1100 градусов в течение 12—24 часов. Затем полученное соединение перетиралось в порошок, прессовалось в таблетку и спекалось при тех же температурах в течение 24—96 часов для достижения гомогенности. Образцы $EuMo_6S_8$ и $LaMo_6S_8$ были приготовлены в газостате в атмосфере аргона под давлением 2000 атм. и температуре 2000°C.

Были измерены критическietемпературы сверхпроводящего перехода некоторых образцов. Образцы фаз Шевреля $LaMo_6S_8$, $SnMo_6S_8$ и $PbMo_6S_8$ демонстрировали переход в сверхпроводящее состояние при температурах 11К, 12,5К и 13К (рис. 3).

На рис.3 представлен дифракционный спектр фазы $EuMo_6S_8$, имеющей ромбоэдрическую кристаллическую решетку $R\bar{3}$ с параметрами $a=6.551\text{\AA}$ и $\alpha=89.06^\circ$. В образце присутствуют примеси фаз MoS_2 и Eu_2SO_2 в суммарном количестве менее 3 %.

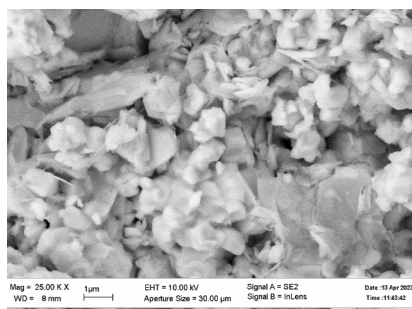


Рис. 1. Электронное микроскопическое изображение образца фазы EuMo_6S_8

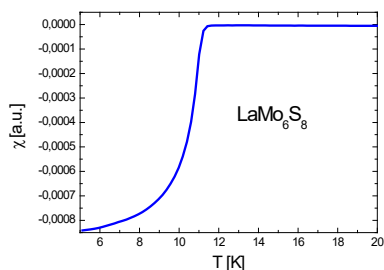


Рис. 2. Пример кривой восприимчивости фазы Шевреля

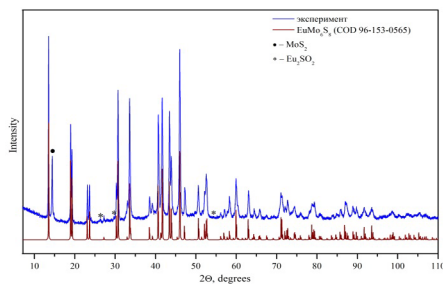


Рис. 3. Дифракционный спектр фазы EuMo_6S_8

Исследование электронной структуры образцов проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, позволяющих получить физическую и химическую информацию об электронной структуре валентной зоны и основных уровней, а также об электронных свойствах поверхности и приповерхностных слоев.

Исследования электронной структуры фаз Шевреля проводились на оборудовании центра коллективного пользования ИФТТ РАН на электронном спектрометре со сферическим секторным анализатором «Kratos AXIS Ultra DLD» с использованием излучения $\text{AlK}\alpha(\text{mono})$ ($E = 1486,69$ эВ) и $\text{MgK}\alpha$ ($E = 1253,6$ эВ).

На рис. 4 представлен обзорный спектр фазы Шевреля $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$.

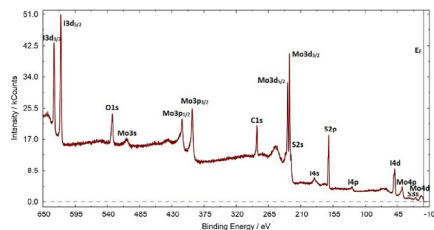


Рис. 4. Обзорный спектр фазы $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$

В спектре наблюдаются характерные линии молибдена $\text{Mo3d}_{5/2}$ (229,4 эВ), серы S2p (162 эВ) и характерные линии интеркалированных в решетку элементов (в представленном случае $\text{I3d}_{5/2}$). Так же наблюдаются характерные линии O1s (531 эВ) и C1s (284,7 эВ), появление которых связано с хранением образцов на воздухе.

Отдельно была рассмотрена валентная зона. Валентная зона фазы $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ образована 4d состояниями молибдена вблизи уровня Ферми с максимумом в интервале 2—5 эВ и 3s состояния серы около 14 эВ (рис. 5).

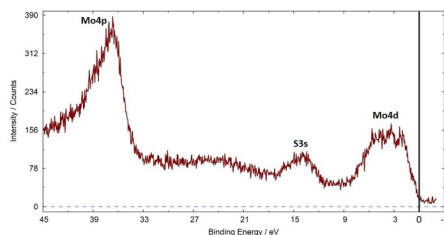


Рис. 5. Спектр валентной зоны $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$

Mo4p состояния расположены около 38 эВ. Аналогичное распределение электронной плотности наблюдалось для фаз Шевреля состава PbMo_6S_8 , SnMo_6S_8 , EuMo_6S_8 , LaMo_6S_8 .

Литература

1. Octavio Peña, Chevrel phases: Past, present and future, *Physica C: Superconductivity and its Applications* Volume 514, 15 July 2015, Pages 95—112
2. Lin Mei, Jiantie Xu, Zengxi Wei, Huakun Liu, Yutao Li, Jianmin Ma, Shixue Dou, Chevrel Phase Mo₆T₈ (T = S, Se) as Electrodes for Advanced Energy Storage, *Nano-Micro Small*, Volume 13, Issue 34, September 13, 2017
3. Jyah Strachan, Anthony F. Masters, Thomas Maschmeyer, The Catalytic Nature of Chevrel Phases (M_xMo₆S₈) in Review, *Materials Research Bulletin*, Volume 139, July 2021
4. J. Richard, A. Benayad, J.-F. Colin, and S. Martinet, Charge Transfer Mechanism into the Chevrel Phase Mo₆S₈ during Mg Intercalation, *J. Phys. Chem. C* 2017, 121, 32, 17096—17103, July 21, 2017

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ УЗЛОВ [NiN₂O₂] В КОМПЛЕКСАХ [Ni(Schiff)] ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С СИНХРОТРОННЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

**П. М. Корусенко^{1,2}, Е. В. Храмов³, О. В. Петрова^{1,4},
А. А. Верещагин¹, О. В. Левин¹, Д. В. Сивков^{1,4}, К. А. Бакина⁴,
Р. Н. Скандаков⁴, В. А. Гаас¹ и А. С. Виноградов¹**

¹*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия*

²*Омский государственный технический университет,
Омск, Россия*

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

⁴*ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: korusenko_petr@mail.ru, тел.: 8 (812) 428-44-98*

Электропроводящие полимеры, получаемые на основе комплексов переходных металлов (М) с лигандами — основаниями Шиффа [M(Schiff)] — являются перспективными материалами и находят многочисленные применения от разработки антибактериальных препаратов до создания промышленных катализаторов и электродов для электрохимических устройств хранения энергии [1]. Основные достоинства этих полимеров обусловлены тем, что координационные узлы (редокс-центры) [MN₂O₂] способны

к реакциям окисления-восстановления (редокс-реакциям), а проводимость между редокс-центрами обеспечивается за счет протяженной сопряженной системы π -связей. Однако, для понимания механизмов редокс-реакций в этих полимерах требуются детальные сведения об атомно-электронном строении их структурных единиц (мономерных комплексов).

Целью настоящей работы является получение, с использованием методов NEXAFS и EXAFS, новой информации об изменении зарядового (химического) состояния атома никеля, а также структурных изменениях координационного узла $[\text{NiN}_2\text{O}_2]$ при замене в salenовых комплексах никеля лиганда: $\text{Salen} \rightarrow \text{CH}_3\text{Salen} \rightarrow \text{CH}_3\text{OSalen} \rightarrow \text{Saltmen}$. Схематическое изображение указанных комплексов представлено на рис. 1.

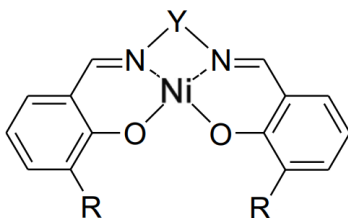


Рис. 1. Схематическое изображение комплексов $[\text{Ni}(\text{Schiff})]$:

$R = \text{H}$, $Y = \text{CH}_2\text{-CH}_2$ $[\text{Ni}(\text{Salen})]$; $R = \text{CH}_3$, $Y = \text{CH}_2\text{-CH}_2$ $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{Salen})]$;

$R = \text{OCH}_3$, $Y = \text{CH}_2\text{-CH}_2$ $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{OSalen})]$;

$R = \text{H}$, $Y = \text{C}(\text{CH}_3)_2\text{-C}(\text{CH}_3)_2$ $[\text{Ni}(\text{Saltmen})]$

NEXAFS и EXAFS эксперименты были проведены с использованием экспериментальной станции «Структурное материаловедение» Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов».

К-спектры поглощения Ni были зарегистрированы в диапазоне энергий квантов от 8083 до 9133 эВ с шагом в ~ 1 эВ в режиме на пропускание. Для проведения EXAFS анализа для всех комплексов были использованы кристаллографические данные для мономерного комплекса $[\text{Ni}(\text{Salen})]$, которые были взяты из работы [2].

В результате проведенных исследований было установлено, что присоединение различных заместителей (рис. 1) как к фенильным кольцам лиганда (R), так и к иминному фрагменту (Y) слабо влияют на структуру координационного узла $[\text{NiN}_2\text{O}_2]$.

Исследование выполнено в рамках гранта РФФ № 21-72-10029.

Литература

1. Freire C., Nunes M., Pereira C., et. al. Coord. Chem. Rev., 2019, 394, 104—134
2. Siegler M. A. M., Lutz M. Cryst. Growth Des., 2009, 9, 1194—1200.

РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ (XANES/EXAFS) В «ЖЕСТКОМ» ДИАПАЗОНЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ В ЦКП СЦСТИ

В. В. Кривенцов

*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: kriven@mail.ru, тел.: +7 (923) 2392649*

Бурное развитие источников СИ, начиная с последней трети 20 века по настоящее время, привело к тому, что метод рентгеновской спектроскопии поглощения в «жестком» диапазоне (XANES/EXAFS) стал общепризнанным мощным инструментом исследования состояния и локальной структуры для разнообразных систем в различных агрегатных состояниях: сплавов, высокодисперсных систем, растворов, стекол, ультраразбавленных систем. Разные варианты методик XANES/EXAFS успешно развиваются в Центрах синхротронного излучения, как за рубежом, так и в России (в Москве и Новосибирске).

Рассматриваемый метод наиболее эффективен, когда применение традиционных структурных методов проблематично, например, при изучении наноразмерных систем «сложного» состава (с характерным размером ~1—10 нм и низким содержанием по исследуемому элементу), к данным наносистемам можно отнести значительную часть функциональных наноматериалов.

В докладе, на примере работ выполненных на станции EXAFS спектроскопии Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового излучения (СЦТСИ, Новосибирск), рассмотрены аппаратные и методические особенности, методики обработки экспериментальных данных и анализа полученной структурной информации. Для широкого круга исследованных функциональных наноматериалов продемонстрированы возможности рентгеновской спектроскопии поглощения в «жестком» диапазоне (XANES/EXAFS), как самостоятельного метода, так и в комплексе с другими физическими методами исследования — РФА СИ, ПЭМВР, СЭМ, РФЭС и др.

Показана перспективность использованного комплексного подхода для исследования функциональных наноматериалов: капсулированных упорядоченных наноструктур, биологических наноматериалов, нанокompозитных катализаторов, тестовых образцов сложного состава.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-263). Эксперименты проводились с использованием УНУ «Станция EXAFS спектроскопии». В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ «Комплекс ВЭПП-4 — ВЭПП-2000» в ИЯФ СО РАН.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

В. В. Кривенцов¹, В. Ю. Байрамукوف²

¹Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

²ПИЯФ, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

e-mail: kriven@mail.ru, тел.: +7 (923) 2392649

Технологии длительного хранения отходов ядерного топлива и другие задачи атомной промышленности, ядерной медицины сегодня требуют разработки и создания новых функциональных материалов. Нанолуглеродные структуры (фуллерены, углеродные нанотрубки и другие формы углерода) являются перспективными материалами. Их свойства — термостойкость, электропроводность, теплопроводность, прочность — могут быть улучшены за счет введения металлов. Ключевым принципом изоляции радиоактивных отходов является наличие нескольких барьеров, сдерживающих распространение радионуклидов в окружающей среде. Одним из методов первичной иммобилизации радиоактивных отходов является использование металлоуглеродных нанокомпозиционных матриц. Также эти наноматериалы могут быть использованы в ядерной медицине — в качестве контрастирующих средств. Существуют различные традиционные способы создания металлоуглеродных нанокомпозиционных, то есть введения атомов различных металлов в углеродную матрицу. Была разработана новая технология, основанная на пиролизе (термическом разложении

в бескислородной среде) соединений-предшественников - молекул дифталоцианина металла.

Первые эксперименты были проведены на наносистеме иттрия и углерод. В качестве предшественников использовались металлоорганические соединения иттрия. Методом рентгеновской спектроскопии поглощения (EXAFS) были исследованы образцы новых металлоуглеродных наноконпозитов Y/C, разработанных в Петербургском институте ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт» (Гатчина). Спектры EXAFS (Y-K) всех исследованных образцов были зарегистрированы в SSTRC (ИЯФ СО РАН, Новосибирск). Установлено, что в зависимости от температуры пиролиза Y может стабилизироваться в различных формах — в виде атомарно диспергированного иттрия, иттриевых кластеров и наночастиц. Показано наличие коротких прочных связей Y-C, которые жестко фиксируют кластеры иттрия в углеродной матрице. Данные EXAFS хорошо согласуются с результатами ПЭМВР, РФЭС, РФА.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-263). Эксперименты проводились с использованием УНУ «Станция EXAFS спектроскопии». В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ «Комплекс ВЭПП-4 — ВЭПП-2000» в ИЯФ СО РАН.

ИЗУЧЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОВ ЦИРКОНИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

В. В. Кривенцов

*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: kriven@mail.ru, тел.: +7 (923) 2392649*

На сегодняшний день смешанные оксиды, имеющие структуру флюорита базового состава ZrO_{2-x} , модифицированные переходными металлами, имеют широкое применение для упрочнения ферритных сталей, для специальных приложений. Так, например, данный материал используется для создания оболочки ТВЭЛов реакторов нового поколения на быстрых нейтронах, работающих в условиях высоких температур и жесткого облучения.

В представленном докладе показаны результаты рентгеноспектрального исследования (XANES/EXAFS) состояния и локальной структуры

образцов оксидов циркония (модифицированных иттрием магнием), приготовленных соосаждением и прокаленных при различных температурах. Спектры XANES/EXAFS (Zr-K, Y-K) исследуемых образцов регистрировались в СЦСТИ, г. Новосибирск. Установлено, что со стороны иттрия спектры XANES исследованных образцов однотипны. Можно предположить, что зарядовое состояние и ближайшее окружение иттрия также практически не изменяется в зависимости от состава образцов. Со стороны циркония, спектры XANES имеют незначительные различия. Видимо для циркония, при неизменном состоянии заряда, изменения в ближайшем кислородном окружении обусловлены различным составом образцов. Установлено, что кривые радиального распределения атомов (РРА), полученные из спектров EXAFS исследуемых образцов, имеют ряд характерных особенностей. Наблюдаются только первые координационные сферы Me-O и Me-Me, однако дальние координационные сферы (в области $\sim 4.0\text{--}6.5\text{\AA}$) практически отсутствуют, что указывает на значительные искажения дальнего порядка. Локальное окружение иттрия стабильно, при изменении состава образцов, что может свидетельствовать о формировании кластеров, включающих только элементы Y и O.

Локальное окружение циркония зависит от состава и предыстории образцов, так как наблюдаются некоторые различия в кривых РРА. Таким образом, амплитуды пиков, отнесенных к координационным сферам Zr-O и Zr-Me, значительно снижены (более чем на 25 %) для Y, Mg — модифицированного образца по сравнению с таковыми для Y — модифицированного образца, что свидетельствует об искажениях исходной структуры флюорита. Показано, что изменения расстояний Zr-O и Zr-Me (более $0,05\text{\AA}$) больше, чем таковые, обусловленные различиями в параметрах ячеек для сравниваемых образцов. Было высказано предположение, что наличие Y-O кластеров препятствует уточнению структур с использованием модели статистического твердого раствора со структурой флюорита. Рассчитаны длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Детально рассмотрены возможные варианты структурных моделей. Дополнительно образцы были исследованы методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Данные, полученные различными методами, хорошо согласуются между собой.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-263). Эксперименты проводились с использованием УНУ «Станция EXAFS спектроскопии». В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ «Комплекс ВЭПП-4 — ВЭПП-2000» в ИЯФ СО РАН.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ НАНОСИСТЕМ ПЛАТИНОИД/УГЛЕРОД МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

В. В. Кривенцов

*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: kriven@mail.ru, тел.: +7 (923) 2392649*

В работе представлены результаты исследования методом рентгеновской спектроскопии поглощения XANES/EXAFS особенностей состояния и локальной структуры металл-углеродных наноконкомпозитных катализаторов, содержащих наноразмерные формы платиноидов. Известно, что каталитические наносистемы, содержащие платиноиды, нанесенные на различные углеродные носители, вызывают большой интерес исследователей, вследствие своей практической значимости; возможности варьирования каталитических свойств и применения для широкого ряда процессов конверсии промышленных субстратов, гидрирования, дебензилирования аминов, низкой стоимости конечных продуктов, легкости утилизации и извлечения дорогостоящих компонентов из отработавших катализаторов. Модельные образцы были приготовлены, из предшественников различной природы, при варьировании способов синтеза и формирования нанесенного компонента, режимов восстановления и активации.

Спектры XANES/EXAFS (Ir-L₃, Pt-L₃, Pd-K, Ru-K) исследованных образцов были записаны на УНУ станция EXAFS спектроскопии (СЦСТИ, Новосибирск). Состояние и локальная атомная структура платиновых металлов в катализаторах исследовались методом XAFS (XANES/EXAFS) спектроскопии по выходу флюоресценции с селективной отсечкой фона. Установлены длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Дополнительно методами РФЭС, ПЭМВР, РФА исследовались химический и фазовый составы, морфология образцов. Данные, полученные различными методами хорошо согласуются между собой. Подробно рассмотрены возможные варианты структурных моделей. Установлены корреляции между строением активного компонента и каталитическими свойствами исследованных образцов. Продемонстрирована перспективность предлагаемого подхода для исследования каталитических наносистем платиноид/углерод.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-263). Эксперименты проводились с использованием УНУ «Станция EXAFS спектроскопии». В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ «Комплекс ВЭПП-4 — ВЭПП-2000» в ИЯФ СО РАН.

ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА В УСЛОВИЯХ СВЕРХВЫСОКОГО ВАКУУМА НА СОСТАВ ТОНКИХ СЛОЕВ GaAs, ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

**Р. Н. Крюков¹, Ю. А. Данилов¹, В. П. Лесников¹,
С. Ю. Зубков¹**

¹Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
г. Нижний Новгород, Россия
e-mail: kriukov.ruslan@yandex.ru, тел.: 8 (831) 4623120

GaAs, выращенный при пониженной температуре подложки ($T_s < 500^\circ\text{C}$), (low temperature, LT-GaAs) является важным материалом современной микроэлектроники. LT-GaAs используется в качестве буфера при совмещении достаточно дешевых подложек из неполярных полупроводников (Si, Ge) и приборных структур на основе соединений A^3B^5 при выращивании методами газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (ГФЭ МОС) [1] и молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [2]. Благодаря тому, что LT-GaAs обладает ультракоротким временем захвата фотовозбужденных носителей заряда, большим темновым удельным сопротивлением и хорошей подвижностью электронов, этот материал часто используется для проектирования фотопроводящих антенн [3]. Остаются актуальными задачи создания и отработки технологии формирования слоев, определения влияния технологических условий и параметров постростовой обработки на физико-химические свойства слоев LT-GaAs. Так, большие успехи достигнуты при формировании слоев методом импульсного лазерного нанесения (ИЛН) [4], при проведении исследований химического состава таких слоев хорошо зарекомендовал себя метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС).

В ходе представленной работы анализировались структуры LT-GaAs/GaAs, созданные по технологической карте, представленной в [4]. При этом толщина слоев составляла 10 нм. После создания структуры были помещены в вакуумный объем СВВ комплекса Omicron Multiprobe RM (Omicron, Германия). Два образца были подвергнуты длительному (5 часов) низкотемпературному отжигу при температурах 275 и 350°C в условиях СВВ (5×10^{-9} Па). На следующем этапе исходная и отожжённые структуры были подвергнуты исследованию методом РФЭС, дополненным приставкой для ионного профилирования [4, 5].

Установлено, что для слоев GaAs толщиной ~ 10 nm, выращенных при температуре 200°C методом импульсного лазерного нанесения, свойственно обогащение поверхности атомами Ga, а объема слоя — атомами As. Низкотемпературный длительный отжиг таких слоев GaAs в условиях сверхвысокого вакуума приводит к диффузии из слоя и последующему испарению атомов As. Происходит увеличение доли атомов Ga на поверхности. Отжиг провоцирует перераспределение кислорода от атомов As к атомам Ga. Повышение температуры постростового отжига увеличивает интенсивность соответствующих процессов.

Работа выполнена в рамках проекта, финансируемого грантом Президента РФ МК-265.2022.1.2.

Литература

1. Demir I., Kasapoglu A. E., Budak H. F., Gur E., Elagoz S., Eur. Phys. J. Appl. Phys., 2020, 90, 20301.
2. Gopalakrishnan N., Baskar K., Kawanami H., Sakata I., J. of Crystal Growth, 2003, 250 (1—2), 29—33.
3. Клочков А. Н., Климов Е. А., Солянкин П. М., Конникова М. Р., Васильевский И. С., Виниченко А. Н., Шкуринов А. П., Галиев Г. Б., Оптика и спектроскопия, 2020, 128 (7), 1004—1011.
4. Крюков Р. Н., Данилов Ю. А., Лесников В. П., Вихрова О. В., Зубков С. Ю., Письма в ПЖТФ, 2023, 49 (4), 11—14.
5. Boryakov A. V., Surodin S. I., Kryukov R. N., Nikolichiev D. E., Zubkov S. Yu., J. of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 2018, 229, 132—140.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ Cu-MOR С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ XANES СПЕКТРОСКОПИИ В СОЧЕТАНИИ С МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**К. Д. Кулаев¹, Г. Б. Сухарина¹, Я. Н. Гладченко-Джевелекис¹,
А. М. Ермакова¹, Л. А. Авакян¹, В. В. Прядченко¹,
Л. А. Бугаев¹**

*¹Южный федеральный университет,
г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: kulaev@sfsu.ru, тел.:*

Медьсодержащие цеолиты Cu-MOR являются перспективными материалами для создания эффективных катализаторов процессов превращения метана в метанол. Каталитическая активность таких материалов во многом определяется локальной атомной структурой медных центров, поэтому задача определения локального окружения меди в каркасе цеолита является значимой для создания материалов с необходимыми свойствами.

Сложность определения структуры медных центров обусловлена неравномерным распределением меди в каркасе цеолита, поэтому несмотря на множество работ в этой области [1—3] понимание взаимосвязи между атомным строением и каталитической активностью требует дальнейших исследований.

В данной работе для определения структуры медных центров цеолитов Cu-MOR был предложен подход, сочетающий спектроскопию рентгеновского поглощения XANES в сочетании с компьютерным моделированием с элементами машинного обучения. Были получены модели локальной атомной структуры медных центров цеолитов типа MOR и выполнены расчеты Cu K-XANES для полученных моделей медных центров разных типов. Атомные модели отличаются кольцами цеолита, в которых расположены атомы меди, а также расположением атомов меди относительно атомов кремния и кислорода каркаса цеолита. Спектры, соответствующие каждой модели, были рассчитаны в программном комплексе FDMNES на основе метода конечных разностей. В результате был сформирован обучающий набор данных, содержащий более двух тысяч спектров для соответствующих моделей медных центров.

Применение методов кластеризации к полученным модельным данным показало, что Cu K-XANES спектры, соответствующие моделям

медных центров, находящихся в одном структурном фрагменте, локализируются в одной области пространства признаков рисунок 1.

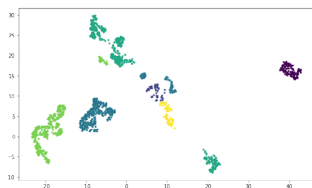


Рис. 1. Кластеры, полученные методом UMAP, характеризующие схожесть в Cu K-XANES медных центров, находящихся в определенных частях цеолита

Возможность разбиения признаков по кластерам позволяет определить на основании Cu K-XANES спектров тип атомного строения, в частности конкретные кольца цеолита, в которых расположены атомы меди. Для демонстрации этой возможности было выполнено обучение нейросети (MLP — многослойный перцептрон) используя теоретические спектры. Точность полученного описания характеризуется высоким значением 0.95. Далее модель машинного обучения будет применена для анализа экспериментальных Cu K-XANES спектров имеющихся образцов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 23-22-00438).

Литература

1. Srabionyan V. V., Sukharina G. B., Kurzina T. I., Durymanov V. A., Ermakova F. M., Avakyan L. A., Alayon E. M. C., van Bokhoven J. A., Bugaev L. A., J. Phys. Chem. C 2021, 125, 46, 25867–25878
2. Bozbag S. E., Alayon E. M. C., Pecháček J., Nachtegaal M., Ranocchiari M., van Bokhoven J. A., Catal. Sci. Technol. 2016, 6 (13), 5011–5022.
3. Alayon E. M. C., Nachtegaal M., Kleymenov E., Van Bokhoven J. A., Microporous Mesoporous Mater. 2013, 166, 131–136.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛУПОЛЯРНОГО НИТРИДА ГАЛЛИЯ, ВЫРАЩЕННОГО НА *m*-САПФИРЕ ХЛОРИДНОЙ ГАЗОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЕЙ

**Н. А. Курило¹, П. В. Середин¹, Н. С. Буйлов¹,
Д. Л. Голошапов¹, С. А. Ивков¹, И. Н. Арсентьев²,
А. В. Нашекин²**

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН,

Санкт-Петербург, Россия

e-mail: kurilo@vsu.ru, тел.: 8 (473) 220-75-24

Все возрастающий интерес к полупроводникам АІІІN обусловлен возможностями этих соединений, обеспечивающих создание на их основе широкого спектра новых устройств электронной компонентной базы [1]. Нитриды третьей группы являются полярными материалами, то есть у них отсутствует инверсионная симметрия, что обуславливает их поляризационные свойства, которые исключительно важны при рассмотрении механизмов рекомбинации в светоизлучающих приборах, характеристик двумерного электронного газа в СВЧ-транзисторах и в других приложениях. Эпитаксиальные пленки АІІІN в большинстве случаев выращивают на инородных экономически доступных подложках (сапфир, кремний, карбид кремния) имеют вюрцитную, гексагональную модификацию. При этом, для того чтобы исключить появление трещин в процессе роста основного слоя GaN, а также снизить значения упругих деформаций используются буферные слои AlN. Однако для получения качественных гетероструктур GaN/AlN на инородных подложках необходима отработка оптимальных технологических условий, чему и посвящена данная работа.

В данной работе рост гетероструктуры GaN/AlN методом хлоридной газофазной эпитаксии (ХГЭ) проводился на подложке *m*-сапфира (*m*-Al₂O₃) в два этапа. На первом этапе осуществлялось осаждение буферного слоя AlN при температуре $T = 1080^{\circ}\text{C}$. Время осаждения буферного слоя составляло $t = 3$ мин. На втором этапе на буферном слое AlN осуществлялось осаждение основного слоя GaN при температуре $T = 1050^{\circ}\text{C}$.

Диагностика образцов была выполнена с использованием набора структурно-спектроскопических методов анализа. Микроскопические исследования были выполнены с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ) JSM-7001F (Jeol) и сканирующего зондового

микроскопа Femtoscan-001 (NT MDT). Данные рентгеновской дифракции были получены с помощью дифрактометра ДРОН-4-07 и с использованием характеристического излучения кобальтовой трубки. Спектры микро-рамановского рассеяния были получены с использованием Рамановского микроскопа RamMix 532 с лазерным возбуждением 532 нм. Спектры фотолюминесценции образцов были получены на установке измерения фотолюминесценции и оптического отражения Accent RPM Sigma. Исследования проводились при комнатной температуре при возбуждении лазером с длиной волны излучения 266 нм, $W = 5 \text{ Вт/см}^2$.

Согласно данным РЭМ слои AlN и GaN в выращенной гетероструктуре GaN/AlN/m-Al₂O₃ росли сплошным слоем. При этом буферный слой AlN имел относительно шероховатую морфологию, в то время как в процессе роста основного слоя GaN происходило постепенное изменение морфологии GaN от шероховатой, наблюдающейся вблизи интерфейса GaN/AlN к более гладкой морфологии GaN слоя. Также следует отметить отсутствие микротрещин в обоих слоях. В тоже время по данным атомно-силовой микроскопии пленка GaN имеет морфологию ступенчатой террасы, с особенностями поверхности в виде перьев (V-образных элементов), ориентированных вдоль направления (0001) сапфировой подложки.

Анализ качества кристаллической структуры гетероструктуры GaN/AlN/m-Al₂O₃ проводился по рентгеновским дифрактограммам, полученным в режиме $\omega/2\theta$ сканирования. Эксперимент показывает, что на $\omega/2\theta$ скане присутствуют два отражения от плоскости (112⁻²) вюрцитных слев GaN и AlN. С помощью теории упругости для кристаллов с вюрцитной решеткой были проведены оценки деформации в плоскости роста ϵ_{xx} (вдоль оси *a*) и биаксиальных напряжений в плоскости роста σ_{xx} . Расчет показывает, что деформации в плоскости роста являются растягивающими ($\epsilon_{xx} \sim 0,00088$), в то время как возникающие биаксиальные напряжения в плоскости роста σ_{xx} лежат около $\sim 420 \text{ МПа}$

Неоднократно демонстрировалось, что спектроскопия комбинационного рассеяния является методом определения тонких структурных свойств кристаллов и весьма чувствителен к примесям, составу, кристаллической структуре, ориентации кристалла и механическим напряжениям. В Рамановском спектре исследуемого полуполярного GaN присутствуют максимумы, которые могут быть соотнесены с фоновыми модами A₁(TO), E₁(TO), E₂^{high} для кристалла со структурой вюрцита. Известно, что интенсивность и полуширина (FWHM) фоновой моды E₂^{high} GaN отражает структурное качество кристаллов эпитаксиальной пленки. Исходя из полученных нами результатов микро-рамановского рассеяния FWHM

фононной моды E_2^{high} в спектре составляет $\sim 7 \text{ см}^{-1}$. Сравнение с результатами аналогичных предыдущих работ [2], показывает, что ширина моды E_2^{high} в Рамановском спектре для полуполярного $(112\bar{2})$ GaN была существенно больше и лежала в области $9.5\text{—}12 \text{ см}^{-1}$. Наблюдение узкого пика E_2^{high} GaN и интенсивного пика $E_1(\text{TO})$ в спектрах комбинационного рассеяния указывает на то, что были получены высококачественные семиполярные $(112\bar{2})$ пленки GaN практически без деформации.

Оптическое качество эпитаксиального слоя может быть оценено исходя из фотолюминесценции (ФЛ). Спектр ФЛ исследуемого слоя GaN имеет максимум, локализованный около 3.4154 эВ . Полуширина на половине максимума пика фотолюминесценции составляет $\sim 0.16 \text{ эВ}$, что значительно меньше многих описанных ранее в литературе значений для GaN выращенного на m-сапфире, тем не менее наблюдаемый достаточно широкий спектр ФЛ может свидетельствовать об относительно высокой плотности дефектов в выращенном слое. Следует отметить, что в спектре не наблюдается дополнительно никакой эмиссии в низкоэнергетической области около $3.0\text{—}3.1 \text{ эВ}$, связанной либо с сильно локализованными экситонами либо желтой люминесценцией, что указывает на достаточно хорошее кристаллическое качество GaN слоя.

Таким образом, в данной работе мы проанализировали результат влияния неполярной m-плоскости сапфировой подложки на структурные, морфологические, оптические свойства и Рамановское рассеяние эпитаксиальной пленки GaN, выращенной методом ХГЭ. Мы обнаружили, что выбранные технологические условия хлорид гидридной эпитаксии позволяют получить образцы структурно качественного полуполярного вюрцитного нитрида галлия с $(112\bar{2})$ ориентацией на m-сапфире. С использованием комплекса структурно-спектроскопических методов анализа изучены структурные, морфологические и оптические свойства пленок, определен уровень остаточных биаксиальных напряжений.

Оптимизация использованной технологической методики в будущем может стать многообещающим подходом роста качественных GaN структур на подложках m-сапфира.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007. Отработка формирования гибридной подложки выполнена при поддержке гранта Министерство науки и высшего образования РФ (grant № FZGU-2023-0006). Исследования образцов методами ФЛ и РД проводились в рамках выполнения Государственного

задания № FSRM-2023-0006. В части доступа к научному оборудованию и методологии данное исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России по договору № 075-15-2021-135.

Литература

1. Hibberd M. T. et al., Solid State Communications, 2016; 24768.
2. Zeng Y. et al., Applied Sciences, 2020; 10, 8814.

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ — ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ АНАЛИЗА КОНФОРМАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ ФЕРМЕНТОВ

**М. С. Лавлинская^{1,2}, Д. А. Файзуллин³, А. В. Сорокин^{1,2},
М. Г. Холявка^{1,2}, Ю. Ф. Зуев³, В. Г. Артюхов¹**

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Севастопольский государственный университет,
Воронеж, Россия

³Казанский институт биохимии и биофизики ФИЦ КазНЦ РАН,
Казань, Россия

e-mail: maria.lavlinskaya@gmail.com, тел.: 8 (473) 220-85-86

Ферменты — природные белковые катализаторы биохимических реакций в живых организмах, находят все большее применение в различных сферах деятельности человека. Интерес к этому классу биологически активных веществ обусловлен не только их высокой активностью, на несколько порядков превосходящую химические аналоги, и селективностью, но и соответствием современным направлениям развития науки и технологий, включающих в себя отказ от использования токсичных и горючих компонентов. С этой точки зрения ферменты, характеризующиеся оптимумами работы в водных средах при достаточно низких температурах и значениях pH, являются перспективными компонентами для разработки новых биотехнологических и пищевых продуктов, инновационных лекарственных средств и др.

Каталитическая активность ферментов, их структурно-функциональные зависимости отличаются в условиях разных типов микроокружения, что обусловлено не только влиянием внешних факторов (например, затруднение массопереноса или диффузии субстрата и продуктов, локальные флуктуации значений кислотности среды и др.), но и изменениями во

вторичной и/или третичной структуре глобул белковых молекул. В связи с этим, представления о конформационных изменениях являются ключевыми в понимании механизмов функционирования биокаталитических систем в различных условиях.

Одним из наиболее доступных и эффективных методов для решения этой задачи является ИК-спектроскопия. В результате взаимодействия ИК-излучения с белковыми молекулами в их спектре образуется ряд характеристических полос поглощения, наиболее информативными из которых являются полосы амид I при $\sim 1650\text{ см}^{-1}$ и амид II при $\sim 1550\text{ см}^{-1}$, представляющие собой суперпозиции мод валентных колебаний карбонильных групп и валентных колебаний C-N и деформационных колебаний N-H пептидных связей белков, соответственно. Анализ и обработка спектральных данных в этой области позволяют выявить количественные изменения в соотношении α -спиралей и β -складок — основных элементов вторичной структуры белков.

Настоящая работа резюмирует опыт кафедры биофизики и биотехнологии ВГУ в коллаборации с КИББ ФИЦ КазНЦ РАН в применении метода ИК-спектроскопии для анализа вторичной структуры некоторых цистеиновых протеаз (бромелина, папаина и фицина) в условиях микроокружения, состоящего из различных полисахаридов [1—6]. Также в работе освещен ряд проблем, связанных с применением современных физико-химических методов исследования в изучении биокаталитических систем.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-74-20053).

Литература

1. Olshannikova S. S., Malykhina N. V., Lavlinskaya M. S., Sorokin A. V., Yudin N. E., Vyshkvorkina Yu. M., Lukin A. N., Holyavka M. G., Artyukhov V. G., Polymers, 2022, 14, 3233.
2. Sorokin A. V., Olshannikova S. S., Lavlinskaya M. S., Holyavka M. G., Artukhov V. G., Faizullin D. A., Zuev Y. F., Polymers, 2022, 14, 2279.
3. Holyavka M. G., Goncharova S. S., Sorokin A. V., Lavlinskaya M. S., Redko Yu. A., Faizullin D. A., Baidamshina D. R., Zuev Yu. F., Kondratyev M. S., Kayumov A. R., Artyukhov V. G., Polymers, 2022, 14, 5110.
4. Sorokin A. V., Goncharova S. S., Lavlinskaya M. S., Holyavka M. G., Faizullin D. A., Kondratyev M. S., Kannykin S. V., Zuev Yu. F., Artyukhov V. G., Polymers, 2023, 649.

5. Sorokin A. V., Goncharova S. S., Lavlinskaya M. S., Holyavka M. G., Faizullin D. A., Zuev Y. F., Kondratyev M. S., Artyukhov V. G., International Journal of Molecular Sciences, 2023, 24, 11246.

6. Сорокин А. В., Гончарова С. С., Лавлинская М. С., Холявка М. Г., Зуев Ю. Ф., Файзуллин Д. А., Кондратьев М. С., Артюхов В. Г., Биофизика, 2023, 68, 248—256.

ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТИАКАЛИКСАРЕНОВ НА СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТКА/ОУНТ ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**С. А. Лаврухина¹, В. И. Сысоев¹, А. Д. Федоренко¹,
Г. И. Семушкина¹, Л. Г. Булушева¹, А. В. Окотруб¹**

¹Институт неорганической химии им. А. В. Николаева,
Новосибирск, Россия

e-mail: x-rayspectroscopy@mail.ru, тел.: 8 (913) 7749731

Диоксид азота (NO_2) — один из основных загрязнителей воздуха, выбрасываемых в атмосферу при сжигании различных видов топлива. Поскольку даже следы NO_2 могут вызвать серьезные последствия для здоровья, его точное и быстрое обнаружение является важной задачей. Для этих целей в настоящее время широко используются газовые сенсоры на основе оксидов металлов. Однако они работают при повышенных температурах и обладают низкой селективностью [1]. Актуален поиск новых сенсорных материалов, обладающих высокой чувствительностью и работающих при комнатной температуре. В настоящее время широко исследуются различные газовые сенсоры на основе углеродных нанотрубок (УНТ) для обнаружения токсичных газов с высокой селективностью, таких как NO_2 [2], NH_3 [2, 3], H_2S [4], пары органических веществ и др., позволяющий получить отклик при комнатной температуре, благодаря быстрому отклику, большой абсорбционной способности и устойчивости к окружающей среде [5].

Сенсорные свойства УНТ также можно улучшить, используя принципы молекулярного распознавания и молекулярного рецептора. Тиакаликсарены (ТКА) представляют собой молекулярные рецепторы, имеющие гидрофобные и гидрофильные полости, способные инкапсулировать молекулы газа, а также обладают способностью к легкой функционали-

зации их верхнего или нижнего ободов, что позволяет создать рецептор с желаемыми свойствами для конкретного аналита [6]. Однако низкая электропроводность ТКА является основным препятствием для создания химрезистивного сенсора только на его основе. В связи с этим перспективно использование ТКА/ОУНТ гибридного сенсорного материала для создания высокоэффективного сенсора, работающего при комнатной температуре.

Параметры сенсорного отклика во многом определяются характером взаимодействия анализируемого газа с чувствительным слоем датчика. Формирование гибридных структур на основе тонких пленок (графена, углеродных нанотрубок), выступающих в роли носителя, и ТКА, нанесенных на их поверхность, может быть связано со значительным изменением электронной структуры как самой пленки, так и ТКА, что в свою очередь, может привести к изменению рецепторных и селективных свойств. Таким образом, необходимой информацией для разработки новых сенсоров является обнаружение связи между геометрической и электронной структурой чувствительного слоя и параметрами сенсорного ответа для прогнозирования рецепторных и селективных свойств молекул ТКА.

ТКА могут находиться в различных конформациях — конус, частичный конус, 1,2-альтернат и 1,3-альтернат, а также существуют их ациклические аналоги. Конформация конус стабилизируется циклической цепочкой водородных связей нижнего обода, которая разрывается при переходе к конформации 1,3-альтернат. Влияние водородных связей на физические свойства, а также на электронную структуру различных соединений велико. В этой связи возникает вопрос как влияет конформация молекул ТКА на их селективные рецепторные свойства и ТКА/ОУНТ гибридных материалов.

В данной работе проведено изучение электронной структуры ТКА и ТКА/ОУНТ гибридных сенсорных материала высоко характеристичными и эффективными методами рентгеновской фотоэлектронной (РФЭС), рентгеновской эмиссионной (РЭС) и рентгеновской абсорбционной спектроскопии (XANES) в совокупности с методами квантовой химии. В данной работе изучены особенности электронной структуры молекул ТКА, а также влияние конформации молекул на электронную структуру ТКА конформации конус и 1,3-альтернат и его ациклический аналог, с использованием рентгеновских эмиссионных ОК α 1,2-спектров и К-краев поглощения углерода. Для интерпретации экспериментальных спектров были проведены квантово-химические расчеты в про-

граммном комплексе ADF методом DFT. XANES спектра углерода были выполнены в основном состоянии молекул и модели Z+1, РЭС — спектры для основного состояния с использованием функционала SAOP, обеспечивающего правильное асимптотическое поведение. В программе Orca 4.2.1 был выполнен расчет по методу Фукуи для определения наиболее предпочтительных мест электрофильной и нуклеофильной атак. На основании полученных экспериментальных и теоретических данных изучены состав и энергетическое положение ВЗМО и НСМО молекул, определены возможные донорные и акцепторные центры. Теоретически изучено взаимодействия молекул ТКА с донорными (NH_3) и акцепторными (NO_2) газовыми молекулами, а также рассчитана энергия адсорбции. На основании полученных экспериментальных и теоретических данных определены состав и энергетическое положение ВЗМО и НСМО молекул; определены возможные донорные и акцепторные центры. Рецепторные, селективные и сенсорные свойства сопоставлены с электронной структурой изученных соединений. Разработана и оптимизирована методика синтеза гибридного материала на основе одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) и КА\ТКА. Экспериментально изучены сенсорные реакции гибридных материалов по отношению к электрондонорным и акцепторным молекулам. Проведен анализ влияния конформации ТКА на сенсорные свойства ТКА/ОУНТ гибридных материалов. Определен механизм взаимодействия ТКА и ОУНТ, а также газовых молекул и ТКА.

Литература

1. Yang, S.; Lei, G.; Xu, H.; Lan, Z.; Wang, Z.; Gu, H., A Review. *Nanomaterials*, 2021, 11, 1026.
2. G. P. Evans, D. J. Buckley, N. T. Skipper, I. P. Parkin, *RSC Adv.*, 2014, 4, 51395–51403.
3. F. Rigoni, S. Tognolini, P. Borghetti, G. Drera, S. Pagliara, A. Goldoni, L. Sangaletti, *Analyst*, 2013, 138, 7392–7399.
4. Zhao, Y., Zhang, J., Wang, Y. et al., *Nanoscale Res Lett*, 2020, 15, 40
5. J. Chaste, A. Eichler, J. Moser, G. Ceballos, R. Rurali, A. Bachtold, *Nat. Nanotechnol.*, 2012, 7, 301–304.
6. Sarkar, T., Srinives, S., Rodriquez, A., & Mulchandani, A. (2018). Single-Walled Carbon Nanotube-Calixarene Based Chemiresistor for Volatile Organic Compounds. *Electroanalysis*. doi:10.1002/elan.201800199

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

А. С. Леньшин^{1,2}

¹ВГУ, Воронеж, Россия

²ВГУИТ, Воронеж, Россия

e-mail: lenshinas@mail.ru, тел.: 8 (920) 4073394

Материалы, содержащие наноразмерные структуры, вызывают серьезный научный и практический интерес в силу своих уникальных физических свойств, которые не могут быть реализованы в объемных материалах и материалах с неоднородностями больших размеров. В настоящее время развитие методик получения и обработки функциональных наноматериалов включено перечень критических технологий Российской Федерации. Наноматериалы на основе кремния, такие как пористый кремний, нанокompозиты и гибридные структуры на основе por-Si являются перспективным классом объектов для создания на их основе широкого спектра компонентов нано и оптоэлектроники, а также сенсорных элементов и материалов для биомедицинских применений.

В зависимости от методики формирования пористый кремний перспективен для создания оптических волноводов и лавинных светодиодов, может использоваться для создания микроактюаторов, самоуничтожающихся кремниевых чипов, различных кремниевых мембран. На основе слоев por-Si создаются микрореакторы, микрорезонаторы, фотонные кристаллы. Одной из перспективных возможностей использования пористого кремния является использование его в качестве чувствительного элемента в различных датчиках. Возможность интеграции с элементами электроники в едином устройстве предоставляет существенные преимущества по сравнению с другими подходами. Несмотря на интенсивную люминесценцию в видимом диапазоне por-Si и простоту его получения, этот материал обладает достаточно нестабильными свойствами, которые по многим параметрам варьируются в широком диапазоне. Из-за развитой поверхности por-Si подвержен внешним воздействиям, что проявляется в деградации («старении») материала на атмосфере, в условиях повышенной влажности, направленного освещения. Дополнительная сложность состоит в том, что состав подобных структур может меняться от поверхности к объему, что приводит к необходимости привлечения широкого комплекса раз-

личных высокоточных методов исследований рентгеновской и оптической спектроскопии.

Композитные структуры на основе por-Si, такие как нанокompозиты металл (оксид металла)/пористый кремний или гибридные органо-неорганические композиты, представляют собой еще более сложные многокомпонентные объекты для исследования, с одной стороны сочетающие преимущества компонентов системы, с другой стороны частично наследующие их недостатки, которые необходимо учитывать и контролировать. Эти структуры имеют большие перспективы для создания широкого спектра качественно новых материалов, проявляющих сенсорные, люминесцентные, магнитные свойства для применения в современной оптоэлектронике, сенсорике, персонализированной медицине.

При этом, ввиду большого разнообразия методов и материалов для получения наноструктур на основе por-Si, очевидно, что научным фундаментом для исследований таких систем является выявление общих закономерностей и взаимосвязей между морфологией, атомным и электронным строением, составом поверхности наноструктур на основе por-Si и их свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ (Проект № 19-72-10007).

ОСОБЕННОСТИ МОРФОЛОГИИ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕНА ПРЕСНОВОДНЫХ ГИДРОБИОНТОВ

М. В. Лиходзиевская, Д. В. Тарасова, С. С. Антипов

ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1

e-mail: lihodzievskaya.rita@gmail.com, тел.: 8 (915) 501 08 21

Белки коллагены, относящиеся к фибриллярным белкам, являются наиболее распространенными структурными белки и основой для межклеточного матрикса соединительных тканей. Фибриллярные коллагены придают прочность, эластичность, улучшают заживляемость. Плёночные структуры на основе коллагенов используются в косметологии и медици-

не в качестве барьерного или инфильтрационного скэфолда или покрытия [1]. Однако, функционализация таких пленок или скэфолдов наночастицами имеет важное значение для многих биомедицинских применений, включая доставку лекарств и тканевую инженерию [2].

Целью данного исследования являлось изучение морфологии и физико-химических свойств плёночных структур на основе коллагена пресноводных гидробионтов. В ходе исследования были получены пленки с использованием коллагена *Clarias gariepinus*, которые были функционализированы наночастицами меди и нанесены на кремниевую подложку. Исследования морфологии пленок проводили с помощью атомно-силовой микроскопии на микроскопе SOLVER P47 (NT-MDT, Россия) оснащенного кантилеверами NSC12 tip-C (MikroMasch, Эстония) в бесконтактном режиме. Возможность сорбции наночастиц оценивали с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием сканирующего электронного микроскопа JSM-6390LV (JEOL, Япония) как в режиме анализа морфологии, так и в режиме энергодисперсионного анализа.

Результаты исследований морфологии методом атомно-силовой микроскопии свидетельствуют о высоком упорядочении волокон коллагена с D-периодом составляющим 65 нм. При этом высокоупорядоченные участки достигали свыше 10 мкм. В режиме анализа морфологии пленок было установлено, что размер ячеек пленки составляют преимущественно около 5 мкм. В результате исследований в режиме энергодисперсионного анализа было установлено, что наночастицы меди размером 30 нм локализованы в тех же областях, где и атомы углерода, соответствующие областям локализации молекул белка. Области, не содержащие молекул белка, давали сигнал только кремния. Таким образом, полученные плёночные структуры на основе нативного коллагена высоко упорядочены и имеют потенциал к функционализации наночастицами, что подтверждается результатами картирования областей их локализации с использованием СЭМ, совмещённой с EDX. В дальнейшем стоит оценить типы химических связей, которые вовлечены в процесс сорбции наночастиц меди.

Литература

1. Тарасова Д. В., Бородина М. М., Лиходзиевская М. В. и др., Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация, 2023, 1, 75—81
2. Anohova V., Asyakina L., Babich O. et al., Polymers. 2023, 15, 5. 1220

РАЗРАБОТКА ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ NEXAFS-СПЕКТРОВ НА ОСНОВЕ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА FDMNES

П. А. Макаров, С. В. Некипелов, В. Н. Сивков

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия

e-mail: makarovpa@ipm.komisc.ru

Прекрасно зарекомендовавшими себя экспериментальными средствами исследования внутреннего строения, электронной конфигурации, электрических, магнитных и оптических свойств различных природных и искусственно-синтезированных материалов, являются методы, основанные на поглощении и эмиссии рентгеновских лучей [1], в числе которых особенно выделяются техники, основанные на анализе NEXAFS- (или иначе XANES-) и EXAFS-спектров. Успешность данных методик объясняется уникальным характером тонкой структуры соответствующих спектров. Известно, что EXAFS-спектры достаточно хорошо описываются теоретически, однако полная количественная теория взаимодействия рентгеновского излучения с веществом вблизи края поглощения (т. е. в NEXAFS-области) ещё не построена [1—3].

В то же время, NEXAFS-спектроскопия широко используется на практике для решения самых разнообразных задач физики конденсированного состояния, физической химии и материаловедения. В связи с этим, теоретические исследования особенностей поглощения рентгеновских квантов различными веществами и материалами вблизи краёв поглощения является актуальной задачей и требует привлечения самых современных методов моделирования и вычислительных технологий.

Сказанное выше подтверждает актуальность дальнейших теоретических исследований в области NEXAFS-спектроскопии. В данной работе представляются материалы для выполнения лабораторных работы по моделированию NEXAFS-спектров на основе пакета FDMNES [2, 3]. Разработанные материалы включают в себя: теоретическую часть, служащую необходимым методическим обеспечением лабораторных работ; примеры конфигурационных файлов; методические заметки и инструкции по проведению исследований; а также контрольные вопросы и наборы индивидуальных заданий для исследования.

В качестве конкретных примеров систем, для которых предлагается выполнение моделирования, выбраны некоторые углеродсодержащие вещества (такие как молекулы угарного CO и углекислого CO₂

газов, метана CH_4 , этана C_2H_6 в разных конформациях) и углеродные материалы (включая α -, β -графиты и алмаз). Данный выбор продиктован тем, что соединения на основе атома углерода повсеместно распространены и хорошо известны широкому кругу специалистов. В то же время, в силу поражающего воображение многообразия проявляемых физико-химических свойств, исследования новых материалов на углеродной основе не только не прекращаются [4—8], но и продолжают стимулировать бурное развитие современной науки и прикладных технологий.

В ходе выполнения разработанных лабораторных работ отрабатывается методика проведения теоретических исследований в области NEXAFS-спектроскопии, вырабатывается навык использования программного пакета FDMNES [2, 3]. Это позволяет для избранных материалов вычислять уровни Ферми, а также строить энергетические зависимости сечения фотопоглощения и сравнивать их с экспериментальными данными. Такого рода исследования могут быть полезны как теоретикам, так и экспериментаторам, для объяснения наблюдаемых ими на опыте спектральных закономерностей.

Созданные лабораторные работы могут применяться в образовательных целях как в составе курсов, входящих в образовательные программы высшего образования уровней бакалавриата, магистратуры или специалитета, так и в качестве практической составляющей на дополнительных профессиональных программах повышения квалификации таких специалистов как: научные сотрудники и работники РАН, научно-педагогические работники образовательных организаций системы высшего образования, аспиранты, а также специалисты в области физики, химии, геологии, биологии, материаловедения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351

Литература

1. *van Bokhoven J. A., Lamberti C., X-Ray Absorption and X-ray Emission Spectroscopy: Theory and Applications*, 2016, Wiley.
2. *Joly Y.*, Phys. Rev. B, 2001, 63, 125120—125129.
3. *Bunau O., Joly Y.*, J. Phys.: Condens. Matter, 2009, 21, 345501—345512.
4. *Kroto H., Heath J., O'Brien S., et al*, Nature, 1985, 318, 162—163.
5. *Krätschmer W., Lamb L., Fostiropoulos K., et al.*, Nature, 1990, 347, 354—358.

6. *Iijima S.*, Nature, 1991, 354, 56—58.
7. *Novoselov K. S., et al.*, Science, 2004, 306, 666—669.
8. *Novoselov K. S., et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2005, 102, 10451—10453.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ
В ОПТИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ
НА ПРИМЕРЕ АНАЛИЗА ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО
РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ
НИОБАТА ЛИТИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЦИНКОМ**

**Д. В. Мануковская¹, Н. В. Сидоров¹, М. Н. Палатников¹,
С. Л. Шевырев²**

¹*Институт химии и технологии редких элементов
и минерального сырья им. И. В. Тананаева (ИХТРЭМС КНЦ РАН),
Апатиты, Россия*

²*Дальневосточный геологический институт (ДВГИ ДВО РАН),
Владивосток, Россия*

*e-mail: d.manukovskaia@ksc.ru, тел.: 8 (921) 2862164;
shevirev@mail.ru, тел.: 8 (924) 5245172*

Монокристалл ниобата лития (LiNbO_3) имеет уникальное сочетание свойств, благодаря которому он применяется в оптоэлектроннике, акустооптике и т. д. Свойства материала можно варьировать в широких пределах путем легирования. Причем легирование ниобата лития обычно носит скачкообразный характер, называемый «концентрационным порогом» [1]. Одним из важнейших явлений, определяющих характер развития исследований ниобата лития, является фоторефрактивный эффект — изменение показателя преломления под действием лазерного излучения вследствие линейного электрооптического эффекта и возникновения фотовольтаической ЭДС. В кристаллах, обладающих фоторефракцией, при освещении лазерным излучением на выходной грани возникает картина фоторефрактивного рассеяния света (ФИРС). ФИРС является основой для голографической записи информации в материалах на основе LiNbO_3 , однако для остальных применений это явление паразитное вследствие потери мощности и рассеяния фронта лазерного луча при прохождении сквозь кристалл. Поэтому данное явление необходимо всесторонне изучить, в том числе важно понять связь между структурой кристалла, концентрацией

легирующего компонента при моно- и со-легировании и условиями возникновения и развития ФИРС под действием лазерного излучения.

Оптически нелинейное явление ФИРС представляет собой трехслойную спекл-структуру, раскрывающуюся во времени [1]. Причем установлена связь между фрактальной размерностью изображения слоя ФИРС и количеством лазерно-индуцированных дефектов в этом слое [2]. Кроме того, фрактальный анализ слоев ФИРС на данный момент — единственная возможность оценить изменение количества лазерно-индуцированных дефектов в слое в процессе раскрытия ФИРС.

Суть метода фрактального анализа состоит в следующем: картина ФИРС, снятая на цифровую камеру на определенной секунде облучения лазером, сначала переводится в режим оттенков серого, затем разделяется на шесть уровней освещенности, каждый из уровней сохраняется отдельно и подвергается снятию фрактальной размерности по методу покрытия квадратами. Эмпирически было установлено, что физически значимыми являются только первые четыре самые яркие уровня освещенности. Далее строится зависимость фрактальной размерности уровня от времени облучения лазером. Однако существующая методика довольно громоздка и требует большого количества человеко-часов для анализа даже одного раскрытия ФИРС. Поэтому нами была разработана программа, позволяющая сделать это автоматически.

ФИРС были получены в кристаллах, легированных цинком: $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ (0.03, 0.18, 0.52, 0.62, 0.88, 2.05 вес. %). Образцы для исследования вырезались из монокристаллов в виде параллелепипедов размерами $6 \times 7 \times 8 \text{ мм}^3$, ребра которых по направлению совпадали с основными кристаллофизическими осями. Грани параллелепипедов тщательно полировались. ФИРС возбуждалось лазером Nd:YAG (MLL-100) ($\lambda_0 = 532.0 \text{ нм}$, $P = 160 \text{ мВт}$). Рассеянное кристаллом излучение падало на полупрозрачный экран и регистрировалось цифровой видеокамерой. Картины ФИРС были зарегистрированы на 1, 30, 60, 120, 180, 270, 330, 390, 600 секундах облучения.

Разработанная программа Python вычисляет фрактальную размерность Минковского для 6 цветовых градаций изображения разложения когерентного излучения в кристалле. «Ноутбук» Jupyter, в среде которого была реализована программа использует две директории in для хранения в ней фотографий для поточной обработки и out для сохранения туда таблицы экспериментальных данных CSV (excel-совместимый формат таблиц) и построенных графиков. Табличные данные обрабатываются в библиотеке pandas.

Алгоритм:

1. Программа получает список файлов изображений, находящихся в каталоге сканирования;
2. Каждое изображение переводится в 8-битное одноканальное изображение формата RGB;
3. Для изображения вычисляется 6 градаций яркости пиксели градации формируют монохромное изображение;
4. Для каждой из градаций программа вычисляет фрактальную размерность Минковского методом квадратов [3];
5. Визуализация расчетов выполняется в matplotlib, формируется изображение, содержащее исходное изображение, его 6 градаций серого и вычисление фрактальной размерности методом квадратов;
6. Вывод результатов осуществляется в виде таблицы экспериментальных данных (ТЭД) в формате CSV.

Данный алгоритм и созданная на его основе программа позволят более глубоко изучить оптическое нелинейное явление ФИРС, возникающее в фоторефрактивных кристаллах ниобата лития. Это позволит раскрыть больше деталей в исследовании связи оптических свойств и структуры материалов на основе кристалла ниобата лития. В будущем программу можно будет применять для других оптически нелинейных явлений и систем, подходящих по конфигурации.

Работа выполнена при поддержке научной темы 0186-2022-0002 (регистрация # FMEZ-2022-0016) и ДВГИ ДВО РАН.

Литература

1. Сидоров Н. В., Волк Т. Р., Маврин Б. Н., Калинин В. Т. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны. — М. : Наука, 2003. — 255 с.
2. Manukovskaya D. V. Comparison of fractal analysis and photoinduced light scattering in $\text{LiNbO}_3\text{:Zn}$ (0.018–2.05 wt %) single crystals. Optics & Laser Technology 2020, 127, 106166 <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2020.106166>
3. Кроновер Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. — М. : Постмаркет, 2000. — 352 с.

DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ NbO_2

М. Д. Манякин, С. И. Курганский

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: manyakin@phys.vsy.ru, тел.: +7 (473) 228-11-60 доб. 1873

Диоксид ниобия NbO_2 относится к классу рутилоподобных оксидов — большой группе материалов, состоящей из оксидов переходных металлов и оксидов элементов 14 группы Периодической таблицы. При температуре 1080 К NbO_2 претерпевает фазовый переход от высокотемпературной тетрагональной фазы, с пространственной структурой классического рутила (группа симметрии $P4_2/mnm$) к низкотемпературной фазе с пространственной структурой искаженного рутила (группа симметрии $I4_1/a$) [1]. Этот фазовый переход сопровождается изменением типа электропроводности NbO_2 с металлической на диэлектрическую. NbO_2 активно исследуется с целью создания новых запоминающих устройств, а также для выработки и хранения энергии [1].

Электронная структура тетрагональной рутилоподобной фазы NbO_2 была рассчитана полнопотенциальным методом ЛППВ с использованием программного пакета Wien2k. Использовались экспериментальные значения параметров элементарной ячейки [2]. Учет обменно-корреляционного взаимодействия проводился в рамках приближения обобщенного градиента. Была рассчитана энергетическая зонная структура, спектры полной и парциальных плотностей электронных состояний, спектры тонкой структуры вблизи Nb К и О К краев рентгеновского поглощения (XANES). Наблюдается хорошее согласие между результатами расчетов и известными литературными теоретическими и экспериментальными данными, что свидетельствует о достоверности результатов вычислений и правильности использованных методов моделирования. На рисунке 1 приведено сравнение рассчитанного XANES спектра Nb К-края с экспериментальным спектром из работы [3]. Расчетный спектр воспроизводит все основные особенности тонкой структуры края поглощения, зарегистрированные в ходе эксперимента. При этом расчетный спектр получен для основного энергетического состояния, без применения метода моделирования остовой дырки и суперъядейки, что позволяет существенно сократить время расчета.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 22-72-00145.

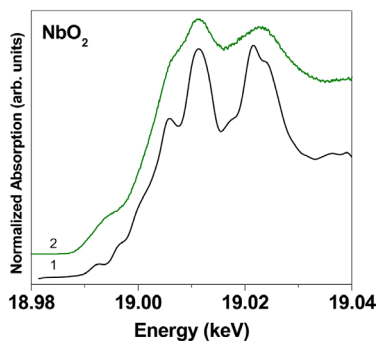


Рис. 1. Рассчитанный (1) и экспериментальный [3] (2) XANES спектры Nb K

Литература

1. Music D., Krause A. M., Olsson P. A.T., Crystals, 2021, 11, 217.
2. Bolzan A. A., Fong C., Kennedy B. J., Howard C. J., Acta Cryst., 1997, B53, 373—380.
3. Morea R., Gonzalo J., Siegel J., Solis J., Gawelda W., ESRF REPORT № HE-3822, 2013.

БИМОДАЛЬНЫЙ ОПТИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ДЕКОРИРОВАННЫХ ЗОЛОТОМ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ДИАГНОСТИКИ БАКТЕРИЙ

**Д. А. Назаровская¹, К. А. Гончар¹, П. А. Домнин^{2,3},
О. Д. Гюппенен¹, А. А. Ерохина¹, М. Ван¹, И. И. Циняйкин¹,
С. А. Ермолаева², Л. А. Осминкина¹**

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия

²Национальный исследовательский центр эпидемиологии
и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи, Москва, Россия

³МГУ им. М. В. Ломоносова, биологический факультет,
Москва, Россия

e-mail: nazarovskaia.da22@physics.msu.ru, тел.: +7 (996) 7634975

Рост бактериальных инфекционных заболеваний представляет собой острую проблему, к тому же снижена эффективность лечения против

болезней, вызываемых антибиотико-резистентными бактериями (туберкулез, сальмонеллез, гонорея и др.). Поэтому важно уметь идентифицировать патогенные микроорганизмы и их чувствительность к антибиотикам в максимально короткие сроки. Высокоточная и быстрая диагностика может быть обеспечена с использованием оптических сенсоров. Для преобразования сигнала можно использовать эффекты интерферометрии, поверхностного плазмонного резонанса и др. [1].

В качестве материала для изготовления оптического биосенсора большим потенциалом обладают нанонити пористого кремния (pSiNWs). Ранее пленки pSiNWs уже применялись для мониторинга белков [2], вирусов [3] и других биомолекул методом интерференционной спектроскопии. Однако возможности биосенсора могут быть расширены за счет функционализации поверхности pSiNWs наночастицами серебра (Ag) и золота (Au), а полученные композитные наноструктуры AuAg@pSiNWs способствуют усилению сигнала комбинационного рассеяния (КР) благодаря эффекту локального плазмонного резонанса [4, 5]. Таким образом, подложки AuAg@pSiNWs будут включать возможности диагностики бактерий двумя методами: по изменению эффективной оптической толщины (ЕОТ) и появлению характерных сигналов в спектрах гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) после адсорбций бактерий на подложки.

Данное исследование посвящено разработке бимодального сенсора на основе AuAg@pSiNWs для идентификации бактерий (*Listeria innocua*), а также определения их антибиотико-чувствительности. Наноструктуры получали методом металл-стимулированного химического травления (МСХТ) монокристаллического кремния с последующим восстановлением наночастиц Ag и Au из солей металлов на поверхности нанонитей. Оптический сигнал от бактерий, адсорбированных на AuAg@pSiNWs, получали методами спектроскопии отражения и ГКР. Рассчитано изменение ЕОТ пленки после адсорбции бактерий на подложки AuAg@pSiNWs. Получен ГКР спектр *Listeria innocua* и рассчитан предел обнаружения бактерий. Проведена оценка антибиотико-чувствительности бактерий, где наблюдалось исчезновение ГКР-сигнала от бактерий в течение 1—3 часов их инкубации с лекарством. Полученные результаты открывают практический потенциал полученных композитных наноструктур AuAg@pSiNWs как бимодального оптического сенсора для диагностики патогенных микроорганизмов и их реакции на антибиотик.

Работа выполнена при поддержке Российского научного (проект № 22-72-10062).

Литература

1. M. Nirschl, F. Reuter, J. Vörös. Biosensors, 1(3), 70 (2011).
2. Cui, Y., et al. science, 2001, 293(5533), 1289—1292.
3. Gonchar, K. A., et al. Materials Research Express, 2020, 7(3), 035002.
4. O. Žukovskaja, et al. Talanta, 2019, 202, 171—177.
5. Y. He, et al. Nano Today, 2011, 6 (2), 122—130.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА Ni-PANI@GO ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

**О. В. Недоедкова¹, Т. Н. Мясоедова², Р. Калусулингам²,
Г. Э. Яловега¹**

¹Физический факультет, Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону, Россия

²Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения,
Южный федеральный университет, Таганрог, Россия
E-mail: nedoedkova@sfnedu.ru

Композитные системы на основе полианилина (PANI) [1] и оксида графена (GO) являются одними из перспективных и активно синтезируемых в последнее время материалов для суперконденсаторов [2], так как обладают высокой электронной проводимостью. В данной работе были исследованы морфология, молекулярная и электронная структура композитов на основе оксида графен и полианилина с добавлением Ni в порошковой форме, а также в форме тонкой пленки, осажденной на подложку из никелевой пены. Анализ УФ-видимых спектров PANI и PANI@GO показал, что они имеют две полосы поглощения на 330 nm и 620 nm, характерные для $\pi \rightarrow \pi^*$ (пик A, A*) перехода, и предплечье B, характерное для $n \rightarrow \pi^*$ перехода (рисунок 1a). Ширина оптической запрещенной зоны (E_g) исследуемых образцов была определена по методу Тауца [3]. Расчетные значения E_g для GO, PANI, PANI@GO и Ni-PANI@GO составили 2.7 eV, 3.8 eV, 3.5 eV и 3.9 eV соответственно (рисунок 1b, 1c, 1d, 1e). Видно, что добавление GO в полимер обеспечивает уменьшение величины запрещенной зоны PANI@GO по сравнению с чистым PANI. Уменьшение запрещенной зоны связано с появлением новых уровней энергии возбуждения ниже обычной запрещенной зоны PANI в результате переноса заряда от GO к PANI. Добавление никеля

увеличивает запрещенную зону (Ni-PANI@GO). Это можно объяснить уменьшением концентрации носителей заряда и разрыва, разделяющего валентную зону и зону проводимости [4]. Добавление никеля может привести к упорядочению структуры, что приводит к уменьшению локализованных состояний внутри запрещенной зоны, способствующим увеличению ее ширины.

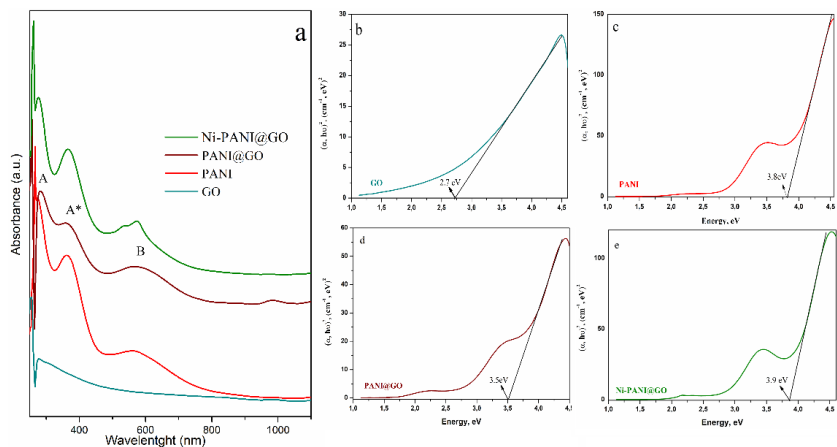


Рис. 1. (a) УФ-видимые спектры GO, PANI, PANI@GO и Ni-PANI@GO; (b), (c), (d), (e) графики Тауца для образцов GO, PANI, PANI@GO и Ni-PANI@GO соответственно

Электродный материал Ni-PANI@GO был изготовлен с использованием простого и недорогого метода электрохимического осаждения. Добавление никеля к PANI@GO приводит к усилению взаимодействия графена с PANI и увеличению степени легирования полианилина через иминные группы. По данным XPS-анализа электродов установлено, что в Ni-PANI@GO происходит усиление взаимодействия графена и PANI, изменяется механизм допирования PANI (через аминные группы в PANI@GO, иминные группы в Ni-PANI@GO) и степень легирования полианилина увеличивается. Все это, вероятно, приводит к синергическому эффекту и улучшению электрохимических свойств композитов.

Электрохимические исследования показали, что композитный электрод Ni-PANI@GO имеет высокую емкость 4480 F/g при плотности тока 40 A/g, что превосходит ранее известные электроды без связующих

веществ на основе пеноникеля. Реакция выделения кислорода и реакция выделения водорода производят значительное количество пузырьков газа при относительно небольших перенапряжениях 279 mV и 244 mV соответственно, что позволяет достичь плотности тока $20 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ (рисунок 2).

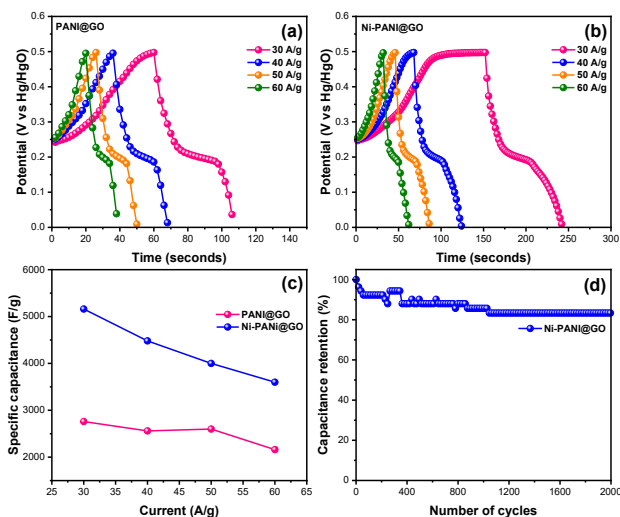


Рис. 2. Зарядно-разрядные кривые композитов (a) PANI@GO и (b) Ni-PANI@GO; (c) зависимость удельной емкости от плотности тока; (d) стабильность электрода Ni-PANI@GO

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00459.

Литература

1. Beygisangchin M, Abdul Rashid S, Shafie S, Sadrolhosseini AR, Lim HN. Thin Films-A Review. Polymers (Basel). 2021 Jun 18;13(12):2003.
2. M. Muschi, and C. Serre, Coordin. Chem. Rev. 387, 262—272 (2019)
3. Tauc J., Materials Research Bulletin, 1968. 3(1): p. 37—46
4. A. S. Hassanien, A. A. Akl, , Superlattice. and Microst. 89 (2016) 153—169.

РАДИАЦИОННОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ И БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**С. В. Некипелов^{1,2}, О. В. Петрова¹, Д. В. Сивков¹,
К. А. Бакина¹, Р. Н. Скандаков¹, В. Н. Сивков¹**

¹*«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», г. Сыктывкар, Россия*

²*Сыктывкарский государственный университет*

им. Питирима Сорокина

e-mail: NekipelovSV@mail.ru, тел.: 8 (8212) 391451

Рентгеновская абсорбционная (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure, NEXAFS) и фотоэлектронная (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) спектроскопия обеспечивают прямой доступ к занятым и незанятым электронным состояниям, то есть к электронной структуре сложных систем, в том числе композитам на основе биомолекулярных структур. Чтобы подробно и с высоким энергетическим разрешением исследовать их электронную структуру с помощью данных спектроскопических методов объекты необходимо облучить потоком рентгеновских фотонов от источников синхротронного излучения (СИ), которые могут вызвать радиационное повреждение образцов при воздействии на них относительно высоких плотностей потока фотонов. При этом может происходить как изменение электронной структуры объектов исследования, связанное с частичным изменением характера межатомных взаимодействий внутри образцов, так и их частичное или полное разложение. И то, и другое отражается на рентгеновских NEXAFS и XPS спектрах, в частности в виде появления или исчезновения деталей спектров (пигов, полос), так и перераспределении спектральных интенсивностей. Следовательно, радиационное повреждение может быть ограничивающим фактором для исследования первичных (неискаженных) спектральных характеристик объектов, особенно для исследований с высоким энергетическим разрешением с использованием СИ.

Влияние радиационного разложения на NEXAFS спектры рассмотрены на примере неорганического поликристаллического NaNO_3 и протеиновой структуры S-layer. Эксперимент показал, что под действием высокоинтенсивного СИ происходит разложение исследуемых образцов, что проявляется в искажении тонкой структуры спектров поглощения. Для оценки зависимости искажения спектров от дозы и энергии облучения необходимо было количественно оценить поглощенную дозу и возмож-

ность ее контроля в процессе измерений NEXAFS спектров. Для этого, в частности, потребовалось провести измерения абсолютных сечения поглощения, которые были выполнены по специальной методике методом полного электронного выхода (Total electron yield, TEY) с использованием титанового фильтра для подавления немонахроматического излучения [1].

В результате было показано, что под действием СИ происходит разложение NaNO_3 до NaNO_2 ;
разрушение пептидной связи в протеиновых структурах;
атомы азота и кислорода частично покидают поверхность S layer;
характерная поглощенная доза, приводящая к разрушению пептидной связи, порядка нескольких МГр.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части исследований NEXAFS-спектроскопии.

Литература

1. Danil Sivkov, Olga Petrova, Alena Mingaleva, Anatoly Ob'edkov, Boris Kaverin, Sergey Gusev, Ilya Vilkov, Sergey Isaenko, Dmitriy Bogachuk, Roman Skandakov, Viktor Sivkov, Sergey Nekipelov. Nanomaterials. 2020, 10, 374

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК Ag-Si С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

**Д. Н. Нестеров¹, К. А. Барков¹, В. А. Терехов¹, С. А. Ивков¹,
Е. С. Керсновский¹, И. В. Польшин¹, И. Е. Занин¹,
М. В. Гречкина¹, А. В. Ситников²**

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия

e-mail: nesterov@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Композитные плёнки, содержащие наночастицы серебра, могут найти применение в фотонике и оптоэлектронике благодаря высокой фоточув-

ствительности и усилению фототока, а также в качестве SERS-подложек для наблюдения эффекта поверхностно усиленного комбинационного рассеяния [1]. Данные нанокompозитные плёнки могут быть получены методами магнетронного напыления, ионно-лучевого распыления, лазерной абляции и т. д. Сложные межфазные взаимодействия в плёнках, полученных перечисленными методами, могут приводить к образованию новых метастабильных фаз [2], обладающих отличными от стабильных фаз свойствами. В данном случае возникает необходимость детального изучения фазового состава плёнок Ag-Si, полученных в неравновесных условиях.

Исследуемые образцы представляют собой нанокompозитные плёнки Ag-Si толщиной 1 мкм с различным содержанием кремния (от 21 % до 47 %), полученные методом ионно-лучевого распыления на подложках Si (100) в вакууме при давлении $1 \cdot 10^{-5}$ торр. Для рентгенофазового анализа применялся дифрактометр PANalytical Empyrean, анализ элементного состава проводился с помощью РЭМ JEOL JSM-6380LV с приставкой для микроанализа INCA 250, методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии была получена информация об электронном строении валентной зоны нанокompозитных плёнок Ag-Si. Спектры были получены на рентгеновском спектрометре-монохроматоре PCM-500 при энергии первичных электронов 1 кВ (глубина анализа ~ 10 нм) [3].

Отсутствие на дифрактограммах нанокompозитных пленок Ag-Si переменного состава рефлексов, принадлежащих кремнию Si, говорит о том, что он находится в аморфной фазе. Уширение дифракционной линии Ag (111) говорит об образовании кристаллитов серебра, средние размеры которых в образцах уменьшаются от 15 нм (содержание Si ~ 21 %) до 10 нм в пленках с содержанием Si ~ 47 %. В образце с содержанием Si ~ 47 % наблюдается значительная асимметрия рефлекса Ag(111), что может быть связано с формированием твердого раствора на основе серебра, как было ранее обнаружено в пленках Al-Si [2].

Анализ фазового состава нанокompозитных пленок Ag-Si по рентгеновским эмиссионным $SiL_{2,3}$ — спектрам показывает, что кремний в исследуемых образцах в основном находится в аморфном состоянии (a -Si ~ 60 %) и субоксида кремния (SiO_x ~ 40 % со степенью окисления «х» ~ 1.9). На $SiL_{2,3}$ — спектре нанокompозитной пленки Ag-Si с содержанием кремния Si ~ 47 % наблюдается резкий спад интенсивности в области энергии 98 эВ, характерный для силицидов.

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2).

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части получения данных рентгеновской спектроскопии.

Литература

1. Шлюкер С. Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS) (Издательство Техносфера) 332 с. (2017).
2. Terekhov V. A. et. al. Phys. Solid State 60 1021-1028 (2018)
3. Зимкина Т. М., Фомичев В. А. Ультратонкая рентгеновская спектроскопия (Изд-во Ленинградского университета) 132 с. (1971)

ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ Cd₃As₂ МЕТОДОМ ВЕРТИКАЛЬНОГО ХИМИЧЕСКОГО ГАЗОВОГО ТРАНСПОРТА

Ю. Б. Нечушкин¹, А. И. Риль², С. Ф. Маренкин^{1,2}

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

²*Институт общей и неорганической химии
им. Н. С. Курнакова РАН,
Москва, Россия*

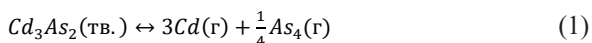
e-mail: u.nechushkin@mail.ru, тел.: +7 (989) 507-75-73

Cd₃As₂ привлекает внимание учёных благодаря аномально высокой подвижности электронов. Валентная зона и зона проводимости Cd₃As₂ имеют линейный закон дисперсности. Они соприкасаются в зоне Бриллюэна, образуя дираковские узлы и формируя вейлевский полуметалл, воздействие внешнего магнитного поля приводит к появлению ОМС и сверхпроводящих свойств [1].

Для получения монокристаллов был выбран метод химических транспортных реакций, который проводится при температурах ниже температуры фазового превращения фазы с тетрагональной сингонией в кубическую. При этом происходит существенное изменение объема фаз, что исключает использование методов направленной кристал-

лизации. Метод газового транспорта позволяет синтезировать структурно совершенные монокристаллы арсенида кадмия, обладающие высокой подвижностью носителей заряда [2] и значительным магнитосопротивлением [3].

Для оптимизации условий выращивания монокристаллов, проведено изучение массопереноса Cd_3As_2 . Согласно данным масс-спектральных и тензометрических исследований [4] при нагревании происходят диссоциации Cd_3As_2 согласно реакциям (1) и (2):



На основании данных по давлению пара, согласно этих реакций, был произведен расчет массопереноса как для молекулярно-кинетического, так и диффузионных режимов. Для получения монокристаллов была использована навеска 25 г, для которой расчётное время синтеза составило 8 суток при скорости испарения $3.62 \cdot 10^{-5}$ г/с в выбранном температурном градиенте (680 и 470 С горячей и холодной зон соответственно).

Преимуществом вертикального варианта химического транспорта является большая однородность потока пара, что приводит к повышению стационарности процесса переноса. Процесс проводился в вертикальной двузонной печи (рис. 1а) из предварительно синтезированного поликристаллического арсенида кадмия.

Синтез проводили сплавлением высокочистых элементов Cd и As взятых в стехиометрических соотношениях при температуре 740 С. Дополнительная очистка синтезированного Cd_3As_2 проводилась пересублимацией в вакууме. Выращивание кристаллов осуществляли в кварцевых ампулах с конусовидным концом в течение 9 суток при температурах горячей (T_1) и холодной (T_2) зон 680 и 470 С, соответственно. Выбор конусовидной ампулы обоснован тем, что конусовидная форма ампулы позволяет снизить количество зародышей при выращивании кристалла.

Идентификацию образца (рис. 1б) осуществляли с помощью РФА и микроструктурного анализа. Выращенный кристалл Cd_3As_2 , согласно дифрактограмме (рис. 1с), относился к тетрагональной сингонии, пространственная группа $I4_1cd$, параметры ячейки $a = 1.27$ нм, $c = 2.54$ нм и был ориентирован по направлению (100).

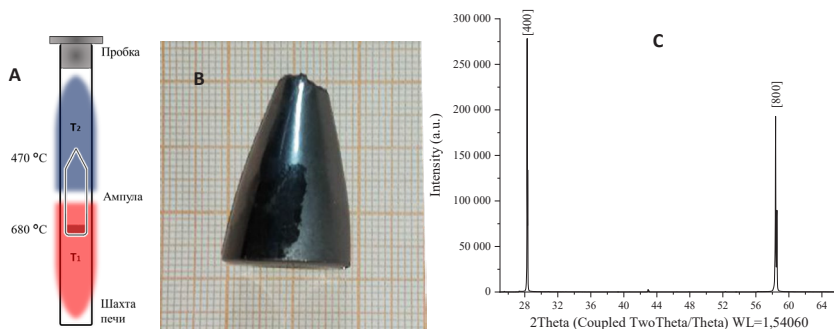


Рис. 1. а) Схема вертикального массопереноса;
 б) фотография полученного монокристалла;
 в) дифракционная картина полученного кристалла Cd_3As_2

Работа была выполнена благодаря финансовой поддержке РНФ № 21-73-20220.

Литература

1. Ril A. I., & Marenkin S. F. (2021). Cadmium arsenides: structure, synthesis of bulk and film crystals, magnetic and electrical properties (Review). Russian Journal of Inorganic Chemistry, 66(14), 2005–2016. <https://doi.org/10.1134/s0036023621140059>
2. Rosenberg A. J., & Harman T. C. (1959). Cd_3As_2 —A Noncubic Semiconductor with Unusually High Electron Mobility. Journal of Applied Physics, 30(10), 1621–1622. <https://doi.org/10.1063/1.1735019>
3. Liang T., Gibson Q., Ali M. N., Liu M., Cava R. J., & Ong N. P. (2014). Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd_3As_2 . Nature Materials, 14(3), 280–284. <https://doi.org/10.1038/nmat4143>
4. Маренкин С. Ф. Фосфиды, арсениды цинка и кадмия / С. Ф. Маренкин, В. М. Трухан. — Минск : Вараскин А. Н., 2010. — 224 с.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР СОВРЕМЕННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ

Д. Е. Николичев, Р. Н. Крюков, С. Ю. Зубков
*Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
e-mail: nikolitchev@phys.unn.ru, тел.: 8 (905) 6690628*

Приводятся основные методы и подходы, применяемые при использовании метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) для анализа материалов и систем современной электронной компонентной базы [1]. Помимо классического применения РФЭС с регистрацией химических сдвигов, рассматривается анализ валентной зоны фотоэлектронных (ФЭ) спектров, а также диагностика химического состава с использованием возникающих тонких эффектов таких, например, как потери энергий электронов на возбуждение плазменных колебаний в исследуемом материале. Рассматривается возможность определения кристаллического совершенства слоев, формируемых различными методами, с использованием метода рентгеновской фотоэлектронной дифракции. Приводятся методы математической обработки ФЭ-спектров, позволяющие как улучшить спектральное разрешение метода, так и определить критерии правильности химического анализа изучаемых материалов. Все эти аналитические подходы с успехом можно применить при диагностике современных материалов и структур, применяемых для развития электронной компонентной базы.

Для спинтроники необходимо создание материалов, проявляющих и ферромагнитные, и полупроводниковые свойства. Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) создаются на базе систем A^3B^5 (GaAs, InAs, InSb) с легированием слоев атомами переходных металлов (Mn, Fe), что позволяет добиться ферромагнитных свойств [2, 3]. В ННГУ удалось создать РМП с температурой фазового перехода ферромагнетик-парамагнетик близкой к комнатной [4]. Достигнуты успехи в формировании многослойных систем для создания спиновых клапанов и диодные структур [5, 6]. Ведутся работы по оптимизации характеристик полупроводниковых матриц [7], что уменьшит неопределенность химического состава в создаваемых на их базе РМП.

Исследование термоэлектрических слоев на основе полупроводниковой матрицы A^4 , легированной атомами переходных металлов, позволило увеличить эффективность преобразования тепловой энергии в электрическую. При этом параллельно изучаются слои, создаваемые методом импульсного лазерного нанесения [8, 9] и путем легирования кремневых подложек ионами переходных металлов [10].

В ННГУ создаются и исследуются структуры, предполагающие широкое применение в оптических сетях и при проектировании датчиков. Удалось создать датчик ультрафиолетового излучения с минимальными паразитными токами [11]. Ведутся работы по повышению эффективности формирования включений Ga_2O_3 в диэлектрическую матрицу SiO_2 , Al_2O_3 при проведении ионного легирования диэлектрических слоев [12].

Методом РФЭС проводилось исследование различных систем на основе диэлектриков. В тонких нанометровых слоях ZrO_2/SiO_x ($x < 2$), полученных методом электронного осаждения, после отжига было обнаружено формирование нанокластеров Si. Являясь ограничивающими, слои диоксида циркония задают размер формируемых нанокластеров кремния. Таким образом становится возможным управлять длиной волны люминесценции кластеров Si.

Еще одним типом систем являются структуры, формируемые для создания устройств резистивной памяти — мемристоров. Основой таких систем является стабилизированный диоксид циркония — $ZrO_2(Y_2O_3)$. Например, в системе $ZrO_2/Ta_2O_5/TiN/Ti/SiO_2$, сформированной методом магнетронного напыления, было выявлено сильное обеднение пленки Ta_2O_5 по кислороду и выделение элементного тантала, что можно объяснить химическим взаимодействием титана и кислорода на границе с TiN. Предположение о нанокристалличности элементного тантала подтверждается методом ПЭМ. На гетерогранице Ta_2O_5/TiN формируется интерфейсный поликристаллический слой TiO_2 , а также определяется соединение $TiNO_x$. Обнаруженные интерфейсные слои и нанокристаллы могут оказать положительное влияние на параметры и воспроизводимость резистивного переключения.

Улучшение свойств Ga_2O_3 для применения его в электронной технике является одним из приоритетных направлений материаловедения. Промышленные подложки Ga_2O_3 крайне дороги, поэтому проводились попытки создания слоев оксида галлия методом магнетронного напыления на кремниевую подложку. Для определения качества получаемых систем применялся метод РФЭС. На первых этапах при под-

боре параметров нанесения в линии Ga 3d, помимо степени окисления Ga³⁺, обнаруживались и Ga¹⁺, и даже элементный галлий Ga⁰. При дальнейшей отработке методики магнетронного нанесения удалось полностью избавиться от металлического галлия и сократить компоненту Ga¹⁺, отвечающую соединению Ga₂O до 5 %. При исследовании образцов, полученных путем имплантации бора или кремния в промышленные подложки Ga₂O₃ проблемой стало то, что степень ионного легирования не позволяла детектировать сигнал от бора и кремния. Тем не менее, различие в электронных свойствах удалось выявить, регистрируя валентную зону ФЭ-спектров. Кроме того, существует возможность определения ширины запрещенной зоны по пику плазмонных потерь вблизи линии O 1s.

Регистрация нарушения структуры твердых тел при различных воздействиях представляется важной задачей материаловедения. Оценка разупорядоченности может быть проведена несколькими способами. Первый — самый простой — это измерение ширины ФЭ-линии. Например, при имплантации кремния в кремниевую подложку было определено увеличение полной ширины линии на полувысоте на 0,2 эВ в приповерхностных слоях и на 0,02 в области максимума содержания имплантированного кремния. Другим интересным способом является применение метода рентгеновской фотоэлектронной дифракции. При вращении образца по азимуту, пики, возникающие при дифракции фотоэлектронов на разных углах поворота, размываются, если поверхностный слой сильно аморфизован.

Приведенные примеры — это лишь малая часть того, что исследовано методом РФЭС в ННГУ. Дополнительно можно добавить и тонкие металлические слои CoPt, PdCo, проявляющие эффект магнитной анизотропии, и МАХ-фазы, и слои приборных структур, и неорганические соединения, и многие другие объекты. Кроме того, в рамках сотрудничества ННГУ с НИЦ «Курчатовский институт», где проходили измерения с использованием синхротронного излучения, исследование новых материалов в ННГУ вышли на новый высокий уровень. Таким образом, можно заключить, что в совокупности с ионным профилированием метод РФЭС является уникальным инструментом, позволяющим проводить и комплексный химический анализ, и получать дополнительную информацию при изучении сложных систем.

Литература

1. Boryakov A. V. et al, J. of Electron Spectroscopy and Related Phen., 2018, 229, 132—140.

2. Kuznetsov Yu. et al, Journal of Physics Conference Series, 2022, 2227(1), 012003.
3. Nikolichev D. E. et al, Semiconductors, 2014, 48(6), 815—820.
4. Kudrin A. V. et al, Journal of Applied Physics, 2017, 22, 183901
5. Kudrin A. V. et al, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2019, 485, p. 165321.
6. Лесников В. П. и др., ФТТ, 2021, 63(7), 866—873.
7. Крюков Р. Н. и др., ПЖТФ, 2023, 65(3), 509—512.
8. Nikolichev D. E. et al, Condensed Matter and Interphases, 25(3), 383—391.
9. Kuznetsov Yu. M. et al, Coatings 2023, 13.
10. Николитчев Д. Е. и др., ФТТ, 65(3), 509—512.
11. Rajamani S. et al, Nanotechnology, 2018, 29(30), 305603.
12. Korolev D. S. et al, Nanomaterials, 13, 1658.

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ БИОАПАТИТА

О. В. Петрова, С. В. Некипелов, К. А. Бакина, Д. В. Сивков,
Р. Н. Скандаков, В. Н. Сивков
ФИЦКоми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: teiou@mail.ru, тел.: 8 (909) 1225201

Исследования химического состава и нанокристаллической структуры композиционных биологических материалов, включающих органические и неорганические элементы, представляют большой интерес с прикладной и эволюционной точек зрения, а также позволяют более детально понимать процессы их формирования. В качестве таких материалов могут быть рассмотрены кости и другие минерализованные образования.

Костная ткань представляет собой минерально-органический композиционный биоматериал, состоящий из минеральной (фосфат кальция в форме биогенного апатита — биоapatита) и органической (коллаген) фаз, а также воды и клеточных элементов. Биопатит, входящий в состав костной ткани млекопитающих и преобладающего числа видов рыб, представлен в виде гидроксипатита (ГАП) $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$, и его замещенных форм. Биоapatит костной ткани имеет сложное иерархиче-

ское строение и может быть представлен в виде трехмерной сверхрешетки, отдельные конгломераты которой формируются вокруг коллагеновых волокон и включают систему нанокристаллитов карбонат замещенного ГАП, разделенных гидратированными слоями [1]. При переходе от монокристаллического ГАП к нанокристаллическому биоапатиту происходит сдвиг плотности свободных 3d-состояний атомов кальция в сторону меньших энергий (красный сдвиг) вследствие уменьшения размеров нанокристаллитов и наличия между ними гидратированных слоев. Такой сдвиг может наблюдаться в спектрах NEXAFS в области Ca2p-края поглощения образцов костной ткани. Согласно теоретическим расчетам [1] и экспериментальным данным [1—3] величина наблюдаемого в NEXAFS Ca2p спектрах поглощения красного сдвига δE_{3d} пропорциональна отношению толщины гидратированных слоев d к среднему размеру нанокристаллитов L и определяется формулой: $\delta E_{3d} = E_{3d} \cdot d/L$, где $E_{3d} \approx 2 \text{ эВ}$ — энергия свободного 3d-состояния, отсчитываемая от дна зоны проводимости.

Для экспериментального наблюдения красного сдвига в NEXAFS Ca2p спектрах, полученных с использованием синхротронного излучения, необходимо провести их высокоточную калибровку по шкале энергий для учета случайных смещений энергии падающего излучения связанных с механическими люфтами монохроматора, изменением тепловой нагрузки на оптические элементы канала и другими эффектами, возникающими при последовательной записи спектров.

В данной работе путем анализа NEXAFS Ca2p спектров проводится оценка величины красного сдвига при переходе от твердотельного ГАП к биоапатиту кости млекопитающих (кит и белая мышь) и рыб (ледяная рыба).

Работа выполнена при поддержке «Министерства науки и высшего образования России» в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Pavlychev A. A. et al. // Nanotechnology. 2016. V. 27(50). P. 504002.
2. Sakhonenkov S. et al. // Nano Express. 2021. T. 2(2). P. 020009.
3. Petrova O. V. et al. // J. Phys. Conf. Ser. 2017. V. 917(4). P. 042001.

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТРАВЛЕНИЯ НА МОРФОЛОГИЮ И СОСТАВ ПОВЕРХНОСТИ МНОГОСЛОЙНОГО ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

**Я. А. Пешков¹, А. С. Леньшин^{1,2}, О. В. Черноусова²,
С. В. Канькин¹, Д. А. Минаков¹**

¹ВГУ, Воронеж, Россия

²ВГУИТ, Воронеж, Россия

e-mail: tangar77@mail.ru, тел.: 8 (960) 1028631

В последнее время особое внимание привлекло использование пористого кремния PSi в качестве буферного слоя для роста тонких пленок различных материалов, от металлов до полупроводников A^{III}B^V. Тонкая настройка пористости, шероховатости, размера пор и т. д. позволяет использовать PSi в качестве подложки, уменьшающей механические напряжения и улучшающей адгезию. Более того, буферный слой из PSi позволяет выращивать на кремнии эпитаксиальные тонкие пленки материалов с высоким несоответствием постоянных решетки. Одним из видов дизайна регулируемой пористой подложки является многослойная наноструктура, имеющая несколько чередующихся пористых слоев с различной пористостью в каждом слое. В данной работе представлено влияние технологических режимов на морфологию поверхности и люминесценцию многослойного PSi. Образцы PSi были получены электрохимическим травлением (ЭХТ) пластин монокристаллического кремния. Многослойный PSi с разными значениями пористости получался изменением плотности тока электрохимического анодирования. Время травления для всех образцов было одинаково. Режим травления подбирался таким образом, чтобы средняя плотность тока ЭХТ была равна 35 mA/cm². Для оценки пористости была использована рентгеновская рефлектометрия (XRR). Спектры фотолюминесценции регистрировались при комнатной температуре с помощью волоконно-оптического спектрометра Ocean Optics USB4000-VIS-NIR; использовался лазерный диод с длиной волны излучения 405 nm.

Анализ XRR-профилей PSi показал, что пористость однослойного образца оказалась около 25 %. Замена режима травления на двухстадийный с ростом плотности тока от 20 до 50 mA/cm² привела к образованию дополнительного приповерхностного пористого слоя с пористостью около 65 %. В то же время пористость глубинного слоя близка к пористости однослойного образца и равна 23 %. Дальнейшее увеличение количества стадий травления до четырех с плавным увеличением плотности тока также приве-

ло к образованию двухслойной структуры. Приповерхностный слой имеет пористость 55 %, что значительно меньше, чем у двухстадийного образца, а пористость глубинного слоя оказалась около 27 % и почти не отличается от пористости глубинных слоёв предыдущих образцов. Спектры фотолюминесценции демонстрируют красное смещение по мере увеличения пористости верхнего пористого слоя, что соответствует увеличению среднего размера кристаллических частиц Si в образце. Спектр однослойного образца с наименьшей пористостью около 25 % демонстрирует несколько особенностей. В области от 450 до 550 nm появляется пик низкой интенсивности, соответствующий свечению дефектов в оксиде SiO_x. Кроме того, более интенсивный пик появляется в диапазоне от 550 до 800 nm. Этот эффект хорошо согласуется с нашим предыдущим исследованием, в котором было показано, что в интервале пористости от 14 до 32 % происходит переход к квантово-размерному механизму появления фотолюминесценции. Многостадийные образцы с высокопористыми верхними слоями демонстрируют значительно более интенсивную фотолюминесценцию в диапазоне от 600 до 800 nm. Положение пика с центром на 700 nm обычно ассоциируется с люминесценцией нанокристаллов в столбцах PSi. При этом, чем выше пористость поверхностного слоя PSi, тем интенсивней пик фотолюминесценции.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ (Проект № 19-72-10007).

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В СИНТЕТИЧЕСКИХ ЖЕЛЕЗО-ЗАМЕЩЕННЫХ КОЛЮЗИТАХ С ТАНТАЛОМ

**А. О. Полевик¹, А. С. Ефимова¹, И. А. Пресняков^{1,2},
А. В. Соболев^{1,2}, Я. С. Соболева^{1,2}, Ю. А. Тетерин³,
В. Ю. Верченко¹, К. А. Лысенко¹, А. В. Шевельков¹**

¹*Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия,*

²*Университет МГУ-ППИ, Шеньчжень, Китай*

³*НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия*

e-mail: a.o.polevik@mail.ru, тел.: 8 (905) 5406057

Актуальной задачей является поиск высокоэффективных термоэлектрических соединений, состоящих из дешевых и нетоксичных элементов [1]. В качестве примера таких соединений могут выступать синтетические

аналоги минерала колюзита $\text{Cu}_{26}\text{A}_2\text{Sn}_6\text{S}_{32}$ ($\text{A} = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}$). Распределение катионов по структуре может оказывать значительное влияние на транспортные и, как следствие, термоэлектрические свойства благодаря влиянию на «Cu-S»-проводящий каркас [2—3].

В данной работе впервые получены образцы железосодержащих колюзитов $\text{Cu}_{26-x}\text{Fe}_x\text{Ta}_2\text{Sn}_6\text{S}_{32}$ ($0 \leq x \leq 3.5$), индивидуальность которых подтверждена методами рентгенофазового и локального рентгеноспектрального анализа. Для образцов составов $\text{Cu}_{26-x}\text{Fe}_x\text{Ta}_2\text{Sn}_6\text{S}_{32}$ ($x = 1; 2; 3; 4$) получены рентгенограммы высокого разрешения с использованием синхротронного излучения на линии ID22 центра ESRF (Гренобль). Методом химического транспорта (транспортный агент — I_2) выращены монокристаллы из образцов $\text{Cu}_{26-x}\text{Fe}_x\text{Ta}_2\text{Sn}_6\text{S}_{32}$ ($x = 0; 2; 3; 4$).

Результаты уточнения кристаллической структуры колюзитов по данным монокристалльных экспериментов согласуются с уточнением структуры порошковых образцов методом Ритвельда: во всех образцах в позиции 2a наблюдается дефицит тантала, а в железосодержащих образцах железо замещает медь только в позиции 6d.

Локальная структура соединений составов $\text{Cu}_{26-x}\text{Fe}_x\text{Ta}_2\text{Sn}_6\text{S}_{32}$ ($x = 1.0; 1.5; 2.0; 2.5; 3.0; 3.5$) была определена методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe и ^{119}Sn и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС).

По данным РФЭС во всех образцах атомы железа и меди сосуществуют в двух зарядовых состояниях (Fe^{2+} и Fe^{3+} , Cu^+ и Cu^{2+}), тогда как атомы тантала, олова и серы — только в одном (Ta^{5+} , Sn^{4+} , S^{2-}).

По данным ^{57}Fe мёссбауэровской спектроскопии при $T = 16 \text{ K}$ в образцах с низким содержанием железа ($x < 2$) всё железо находится в степени окисления +3, тогда как при увеличении содержания железа ($x \geq 2$) в спектрах наблюдаются две компоненты, отвечающие атомам Fe^{3+} и Fe^{2+} , причём содержание Fe^{2+} увеличивается с ростом содержания железа в образце. Расхождение с данными РФЭС связано с тем, что мёссбауэровская спектроскопия является «объёмным» методом, тогда как РФЭС является методом анализа поверхности. По данным ^{119}Sn мёссбауэровской спектроскопии во всех образцах существует только Sn^{4+} находится в тетраэдрическом окружении атомов серы.

При увеличении температуры эксперимента в ^{57}Fe мёссбауэровских спектрах возникает компонента, отвечающая промежуточному состоянию железа. Поскольку по данным рентгеноструктурного анализа атомы железа разделены в пространстве, эта компонента не может отвечать переносу заряда по цепи Fe-S-Fe, поэтому предполагается, что в переносе заряда

железо обменивается электронами с медью: $\text{Cu}^+ + \text{Fe}^{3+} \leftrightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{Fe}^{2+}$, взаимодействуя через орбитали атомов серы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования № 075-15-2021-1353.

Литература

1. *Pei Y. et al.* Nature, 2011, 473, 66—69.
2. *Guélou G. et al.* ACS Appl. Energy Mater., 2020, 3, 4180—4185.
3. *Raveau B. J.* Supercond. Nov. Magn., 2020, 33, 259—263.

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ МЕДИ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ИОННО-ЛУЧЕВЫХ ПЛЕНОК Cu-Si ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

**И. В. Польшин^{1*}, К. А. Барков¹, Е. С. Керсновский¹,
В. А. Терехов¹, Д. Н. Нестеров¹, С. А. Ивков¹, А. В. Ситников²**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный технический университет,*

Воронеж, Россия

**vanya.polshin@bk.ru*

Система Cu-Si важна для очень широкого спектра технологических применений, в частности в микроэлектронике [1], а в последнее время представляет интерес и в производстве нового типа литий-ионных аккумуляторов [2, 3]. Однако, при получении тонких пленок на основе Cu-Si такими методами, как магнетронное, электронно- и ионно-лучевое распыление, которые характеризуются достаточно высокой энергией частиц, падающих на подложку, не исключена вероятность образования метастабильных фаз и других составов при охлаждении частиц на подложке. Поэтому исследования структуры, фазового состава, электронного строения и электрических свойств пленок Cu-Si, полученных ионно-лучевым распылением очень важны.

Пленки Cu-Si толщиной ~300 нм были получены на кремниевых подложках Si(100) КДБ-12 методом ионно-лучевого распыления составной мишени. Осаждение пленок осуществлялось в вакуумной камере (10^{-6} Torr), заполненной Ag (чистота 99,992 %) до общего давления газа $8 \cdot 10^{-4}$ Torr.

Анализ формирования кристаллических фаз в пленках Cu-Si проводился методом рентгеновской дифракции с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН 4—07 с медным источником излучения (λ Cu $K\alpha_{1,2}=1,5406\text{\AA}$).

Для анализа формирования кристаллических фаз в пленках Cu-Si были получены рентгеновские дифрактограммы (Рис.1). На рентгеновских дифрактограммах всех плёнок присутствует интенсивный рефлекс при $2\theta=28,58^\circ$, связанный с монокристаллической подложкой Si (111). Ввиду высокой интенсивности дифракционных линий подложки дифрактограммы представлены в логарифмическом масштабе. В случае пленки Cu-Si с содержанием Cu~15 вес. % наблюдаются только низкоинтенсивные дифракционные рефлексы при $2\theta=77,95^\circ$ и $2\theta=95,73^\circ$, которые соответствуют отражениям от плоскостей (510) и (442) фазы γ -Cu₃Si. Кроме того, формирования кристаллических фаз кремния в данной пленке по данным рентгеновской дифракции не обнаружено. Т. е. кремний в пленке Cu-Si с содержанием Cu~15 % является рентгеноаморфным.

Увеличение содержания меди в пленке до ~36 вес. % приводит к появлению на дифрактограмме двойного рефлекса в области углов $2\theta\sim 44\div 45^\circ$. Одна из компонент данного рефлекса при $2\theta=44,53^\circ$ по значению межплоскостного расстояния $d=2,033\text{\AA}$ соответствует отражению от кристаллографической плоскости (110) η -Cu₃Si, вторая компонента при $2\theta=45,08^\circ$ с межплоскостным расстоянием $d=2,033\text{\AA}$ может быть отнесена к высокотемпературной фазе η'' -Cu₃Si.

Дальнейшее увеличение содержания меди до ~68 вес. % приводит к росту интенсивности дифракционного рефлекса при $2\theta=44,53^\circ$ (η -Cu₃Si (110)), а также появлению слабоинтенсивных рефлексов при $2\theta=65,48^\circ$ ($d = 1,424\text{\AA}$) и $2\theta=82,55^\circ$ ($d=1,168\text{\AA}$), соответствующих отражениям от кристаллографических плоскостей (203) и (213) той же высокотемпературной фазы η -Cu₃Si [4]. Кроме того, при высоком содержании меди в составе пленки медь начинает частично окисляться, что хорошо видно по возникновению дифракционного рефлекса при $2\theta=42,50^\circ$ ($d=2,213\text{\AA}$), связанного с фазой Cu₂O (200) [5].

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2).

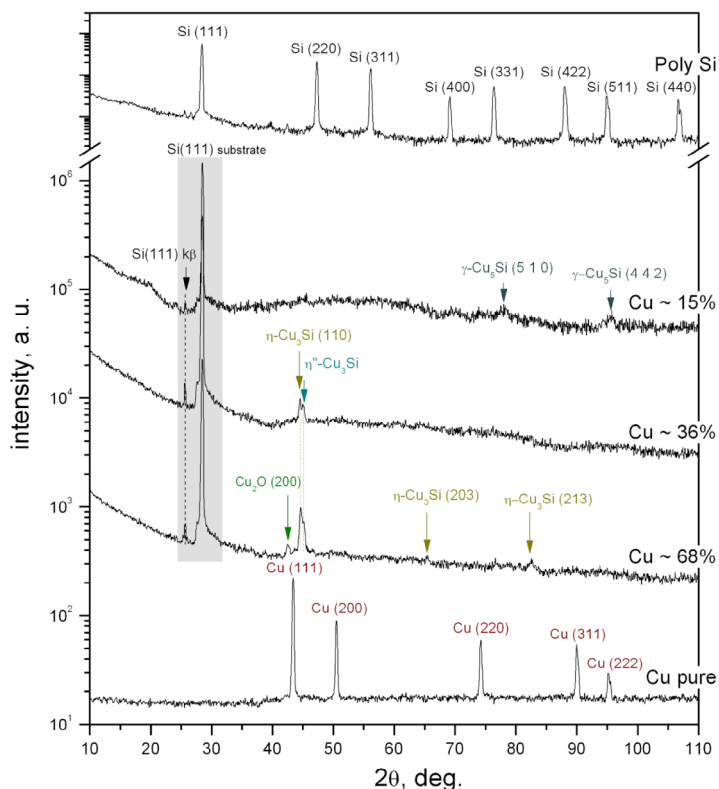


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы пленок Cu-Si с относительным содержанием Cu ~15, 36 и 68 вес. %, а также эталонов поликристаллического кремния и меди

Литература

1. Liu Y. *et al.* Diffusion barrier performance of reactively sputtered Ta-W-N between Cu and Si // *Microelectronic engineering*. — 2004. — V. 75. № 3. — P. 309—315.
2. Ahn H. J. *et al.* Formation and characterization of Cu-Si nanocomposite electrodes for rechargeable Li batteries // *Journal of power sources*. — 2006. — V. 163. № 1. — P. 211—214.
3. Li H. *et al.* The crystal structural evolution of nano-Si anode caused by lithium insertion and extraction at room temperature // *Solid State Ionics*. — 2000. — V. 135. № 1—4. — P. 181—191.

4. Solberg J. K. The crystal structure of η -Cu₃Si precipitates in silicon // Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography. — 1978. — V. 34. № 5. — P. 684—698.

5. JCPDS-International Centre for Diffraction Data, card No. 01-071-3645

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ГЦК-КОБАЛЬТА

Г. П. Потуданский, С. И. Курганский

Воронежский государственный университет,

г. Воронеж, Россия

e-mail: potudanskiy@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 2208363

Кобальт существует в нескольких кристаллических модификациях. Низкотемпературная ферромагнитная гексагональная плотноупакованная (ГПУ) структура кобальта переходит в гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру при температуре около 673 К, которая также является ферромагнитной. Значение магнитного момента для ГЦК-фазы составляет $1.751 \mu_B$ на атом [1].

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования электронной структуры ГЦК-кобальта — зонная структура (Band Structure) и плотности электронных состояний (DOS). Расчеты проводились в рамках спин-поляризованной теории функционала плотности (DFT) в программном пакете WIEN2k, реализующем полнопотенциальный метод линеаризованных присоединённых плоских волн (FP-LAPW) при использовании обменно-корреляционного функционала в приближении обобщенной градиентной аппроксимации (GGA-PBE).

Кристаллический ГЦК-кобальт (a-Co) принадлежит к кубической сингонии и имеет пространственную группу симметрии $225_{-}Fm-3m$, элементарная ячейка с параметром $a = b = c = 3.5444 \text{ \AA}$ содержит 4 формульных единицы [2].

На рисунке 1 приведена кристаллическая структура ГЦК-кобальта и её первая зона Бриллюэна. Зонная структура для основного состояния ГЦК-кобальта приведена на рисунке 2. Полученное значение магнитного момента составило $1.67 \mu_B$. Ширина валентной зоны составляет $\sim 9.02 \text{ эВ}$, а её минимум находится в точке Γ первой зоны Бриллюэна.

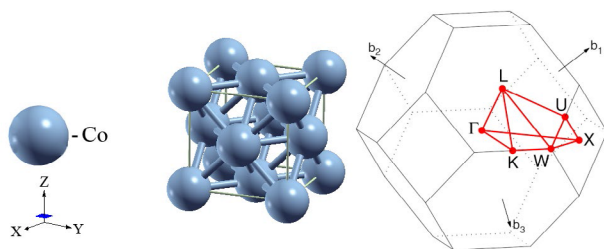


Рис. 1. Элементарная примитивная ячейка решетки Браве и первая зона Бриллюэна ГЦК-кобальта. Красной линией обозначен путь обхода неприводимой части зоны Бриллюэна при расчете зонной структуры

На рисунке 3 приведены спектры полной и парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС), полученные на основе зонного расчета для основного состояния ГЦК-кобальта. Анализ парциальных ПЭС показывает, что основной вклад в формирование валентной зоны дают d -состояния кобальта, локализованные в интервале от -5.2 эВ до -0.6 эВ для спина вверх и от -4.5 эВ до 1.3 эВ для спина вниз относительно уровня Ферми.

Материалы, полученные в данной работе, могут быть использованы для анализа электронного строения структур на основе кобальта и кремния [3].

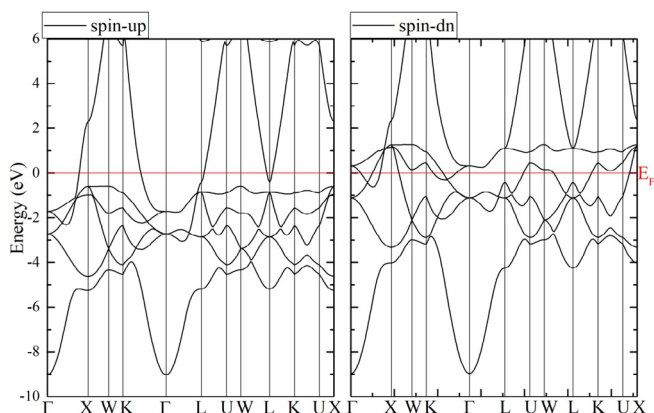


Рис. 2. Зонная структура ГЦК-кобальта для спина вверх (слева) и для спина вниз (справа). Уровень Ферми принят за начало отсчета энергии

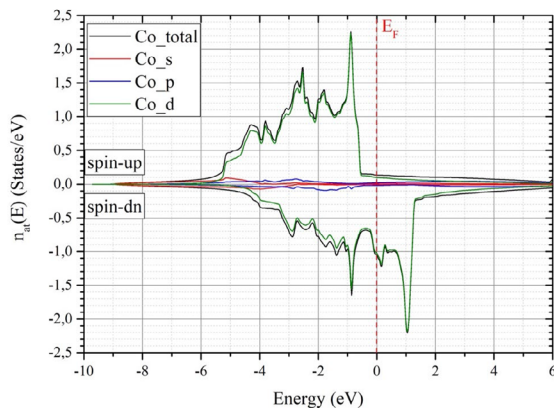


Рис. 3. Полная и парциальные ПЭС ГЦК-кобальта для спина вверх (сверху) и для спина вниз (снизу). Уровень Ферми принят за начало отсчета энергии

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. T. Kanenko, T. Kanomata, Y. Kawazoe, Y. Uwatoko, Alloys and Compounds Under Pressure, 2014, 22, 16—17.
2. α -Co (Co ht) Crystal Structure. — Текст: электронный // SpringerMaterials: сайт. — URL: https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_1020391 (дата обращения: 22.08.2023)
3. G. P. Potudanskii, S. I. Kurganskii, E. P. Domashevskaya, Materials Research Express, 2019, 6, 1150g9.

МОДЕЛИРОВАНИЕ L_3 -КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕДИ

В. Р. Ради́на, С. И. Курганский

ФГБОУ ВО «ВГУ», г.Воронеж, Россия

e-mail: viminova@inbox.ru, тел.: 8 (900) 9441347

В последние годы практическое применение меди увеличилось во многих областях, таких как производство химических сенсоров и электронных устройств, катализ, биологическая визуализация. В данной рабо-

те представлены результаты теоретического исследования XANES (X-ray absorption near edge structure) L_3 -спектров меди в сравнении с экспериментальными данными [1].

Расчет электронной структуры исследуемого материала проводился в рамках теории функционала плотности полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [2] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии и приближения остовой дырки [3] при вычислении спектров XANES. В данной работе XANES спектры металлической меди были рассчитаны тремя способами:

- 1) Элементарная ячейка, атом в основном состоянии;
- 2) Элементарная ячейка, атом содержит половину остовой дырки
- 3) Элементарная ячейка, атом содержит остовную дырку

Как правило, теоретические XANES-спектры дают наилучшие согласие с экспериментальными данными, если моделирование проводить путем создания суперъячейки, в которой содержится атом с остовой дыркой. Однако в случае меди такой подход является не вполне корректным.

Сравнивая полученные результаты, можно заметить, что в данном случае теоретический расчет наиболее точно согласуется с экспериментом [1], если вычисление спектра производится с 0.5 дырки на остоном $2p$ -уровне. Во многом это связано с тем, что остовная дырка в меди только частично экранирована валентными электронами, поскольку d -электроны в Cu локализованы и вносят меньший вклад в экранирование. Наши расчеты показывают, что для меди создание половины остовой дырки в самой элементарной ячейке приводит к наиболее точному согласию с экспериментом. Это состояние также известно как переходное состояние Слэтера. Такой же вывод был сделан авторами работы [4] при сравнении результатов расчета меди с остовой дыркой и без нее для элементарной ячейки меди и суперъячейки размером $2 \times 2 \times 1$ (с 16 атомами).

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Grioni M., Acker J. F., Czyzyk M. T., and Fuggle J. C., Phys. Rev. B., 1992, 45, 3312.
2. Schwarz K., Blaha P., Madsen G. K.H., Comput. Phys. Commun., 2002, 147, 71.

3. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., Chuvenkova O. A., Domashevskaya E. P., Ryabtsev S. V., Ovsyannikov R., Parinova E. V., Sivakov V., Turishchev S. Yu., *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2019, 99, 28.

4. Luitz J., Maier M., Hebert C., Schattschneider P., Blaha P., Schwarz K., Jouffrey B., *Eur. Phys. J.*, 2001, 21, 263.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АПТАМЕРОВ И БИОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЯ БИОСЕНСОРИКИ: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

**А. В. Рогова¹, И. А. Щугорева¹, Ф. Н. Томилин^{1,2},
А. С. Кичкайло¹**

¹*Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный
центр СО РАН», Красноярск, Россия*

²*Институт физики им. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН,
Красноярск, Россия*

e-mail: arogoval927@gmail.com, тел.: 8 (903) 9498004

Аптамеры — синтетические олигонуклеотиды на основе ДНК или РНК, способные к специфическому связыванию с другими молекулами-мишенями. Аптамеры к белкам часто связываются в функционально важных участках молекулы и являются ингибиторами активности белков-мишеней. По большинству своих характеристик (меньший размер, стабильность, возможность химической модификации и т.д.) аптамеры не уступают моноклональным антителам. Благодаря этим характеристикам, они могут использоваться вместо антител во многих исследованиях. Перспективным направлением использования аптамеров является направленный транспорт лекарств [1]. Химическая модификация аптамеров позволяет присоединять флуоресцентные молекулы, что в дальнейшем используется для анализа связывания с белком-мишенью. Таким образом, аптамеры стали полезными инструментами для диагностики и терапии различных заболеваний [2]. Особый интерес вызывают и Ca^{2+} -регулируемые фотопротеины (обелин, акворин, боровин и др.) или целентеразин-связывающие люциферазы, которые являются отличными инструментами в аналитических системах для научных исследований, биотехнологии и биомедицины. Перспективной темой является создание биолюминесцентного биосенсора, в котором используют аптамеры в качестве узнающих элементов и светящийся белок (обелин, целенте-

разин-связывающие белки) в качестве сигнальной молекулы. Биосенсоры, основанные на комбинации аптамеров и светящихся белков, предлагают такие преимущества, как высокая чувствительность, специфичность и возможность визуализации и отслеживания молекулярных взаимодействий в реальном времени [3]. Это может быть полезно в различных областях, таких как медицина, биотехнология, где точные измерения и наблюдения молекулярных процессов критически важны в клинических применениях.

Для определения третичной структуры белков применяется метод рентгеновской дифракции, для применения которого выращивается кристалл, чтобы создать периодическую структуру. Однако аптамеры, как самостоятельны, так и в комплексе с целевыми белками, обычно сложно кристаллизовать. Для решения данной проблемы использован метод, основанный на использовании синхротронного излучения — малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР). Интеграция молекулярного моделирования и синхротронного спектрального метода позволяют получить недоступную для экспериментов информацию о пространственной структуре аптамеров и комплексов (белок и ДНК). С помощью методов молекулярной динамики (МД) и квантовохимических расчетов можно получить недоступную для экспериментов информацию о структуре белка, конформационном изменении белка при связывании с аптамером. Соответствующие пространственные модели были смоделированы и рассчитаны методом МД в программном пакете GROMACS с последующим кластерным анализом траекторий. Сравнение конформаций аптамера (12Д), полученных экспериментально при помощи метода малоуглового рентгеновского рассеяния, с шариковой моделью, позволило идентифицировать модель, которая точно отражает геометрию аптамера и комплекса в растворе.

Для изучения оптических свойств биолуминесцентного целентеразин-связывающего белка (СВР) с помощью метода квантовохимических фрагментов (FMO) оптимизирована система апо-целентеразин-связывающий белок (apoСВР) с новым субстратом фуримазином (FMZ). Далее для субстрата проведён расчёт спектров поглощения в белке с помощью процедуры FMO1/TD-B3LYP/6-31G(d)/PCM. Проведён анализ межфрагментных взаимодействий между лигандом и аминокислотами с использованием теории возмущений Мёллера-Плессета второго порядка (RI-MP2/6-31G(d)) в рамках подсистемного подхода (FMO/SA). Этот анализ был проведен для комплекса FMZ-apoСВР, с целью оценки энергии связывания субстрата с белком. Все расчёты выполнены в программе GAMESS.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (21-73-20240).

Литература

1. Shah A., Aftab S., Nisar J., Ashiq M. N., Iftikhar F. J., 2021, Journal of Drug Delivery Science and Technology, 62, 102426.
2. Lee K. A., Ahn J. Y., Lee S. H., Singh Sekhon S., Kim D. G., Min J., Kim Y. H., 2015, Scientific reports, 5(1), 10897.
3. Davydova A., Krasitskaya V., Vorobjev P., Timoshenko V., Tupikin A., Kabilov M., Vorobyeva M., 2020, RSC advances, 10(54), 32393—32399.

УСИЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ В ОКРЕСТНОСТЯХ НАНОЧАСТИЦ И ИХ АГЛОМЕРАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ AG, AU, RB В СТЕКЛАХ

**Д. С. Рубаник¹, В. В. Срабионян¹, М. В. Ветчинников²,
В. А. Дурыманов¹, И. А. Викленко¹, Л. А. Авакян¹,
Г. Ю. Шахгильдян², В. Н. Сигаев², Ю. Ю. Дмитриев¹,
Л. А. Бугаев¹**

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

²Российский химико-технологический университет

имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия

e-mail: rubanik@sfnedu.ru, тел.: 8 (928) 1372542

Модификации стекол с различными видами металлических наночастиц (НЧ) широко изучаются с целью получения улучшенных оптических характеристик. Наночастицы серебра и золота представляют особый интерес благодаря сильно выраженному явлению локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР) [1] в видимой области спектров оптической экстинкции, и позволяют локализовать и удерживать энергию падающего света в нанометровом и в фемтосекундном масштабах. Одним из наиболее значимых и быстро развивающихся направлений в этой области является применение ЛППР в частицах Ag и Au для создания лазерных сред с улучшенными характеристиками люминесценции и, в частности, их использование в качестве эффективных сенсбилизаторов для усиления лазерных переходов в ионах редкоземельных элементов (РЭ), находящихся в составе стекла [2]. Различные исследования механизмов влияния наночастиц благородных металлов на характеристики люминесценции ионов РЭ выявили преобладающий эффект усиления локального электрического поля, вызванный их ЛППР в случае, если ионы РЭ расположены вблизи наночастиц [3].

Для вычисления среднего усиления поля на один редкоземельный ион были изучены распределения по пространству локального электрического поля в окружении НЧ разных размеров, с составами Ag, Au, Rb, AgAu, AgRb, AuRb, и степенью их агломерации на основе ТЕМ изображений. Были представлены расчеты локального электрического поля в местах возможного расположения редкоземельных ионов для агрегатов взаимодействующих частиц разного размера, с различными межчастичными расстояниями и внутренним строением биметаллических НЧ. Предложена методика анализа рассчитанных пространственных распределений локального электрического поля, позволяющая получать одномерные зависимости среднего усиления локального электрического поля от расстояния между РЕ ионами и поверхностью ближайшей частицы и позволяющая количественно охарактеризовать его для каждой из возможных структурных конфигураций локальной системы «Плазмонные НЧ - редкоземельные ионы» с использованием усиления локального электрического поля, усредненного по редкоземельным ионам, расположенным в непосредственной близости от агрегата НЧ. Было проведено сравнение эффективности использования плазмонных однокомпонентных Ag, Au, Rb и биметаллических AgAu, AuRb, AgRb (оболочка-ядро, твердый раствор) НЧ.

Установлено, что НЧ, содержащие рубидий, продемонстрировали наличие достаточно сильных улучшений плазмонного поверхностного резонанса и локального усиления поля, но эти характеристики слабее по интенсивности, чем у наночастиц серебра. Более того, биметаллические наночастицы AgRb и AuRb со структурой ядро-оболочка продемонстрировали возможность к настройке длины волны локализованного поверхностного плазмонного резонанса, на которой выявлен максимум локального электрического поля в окрестности агрегатов таких НЧ, в широком диапазоне от 400 до 900 нм. Полученная информация используется для рекомендаций по экспериментальному созданию наиболее эффективных лазерных сред, включая рекомендации о том, какой тип наночастиц предпочтительнее: их оптимальный средний размер и расстояния между частицами, степень агломерации и распределение компонентного состава для биметаллических частиц. Обсуждаются преимущества и ограничения различных экспериментальных подходов для практической реализации этих предписаний.

Работа выполнена при поддержке российского научного фонда (проект 23-12-00102).

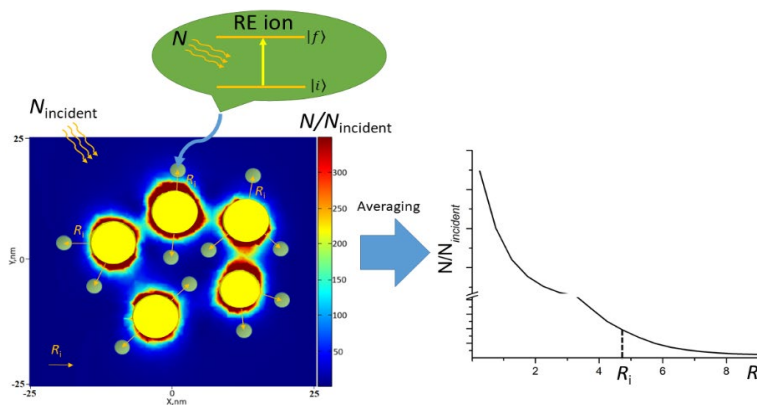


Рис. 1. Графическое представление распределения локального электрического поля

Литература

1. V. V. Srabionyan, L. A. Avakyan, V. A. Durymanov, D. S. Rubanik, I. A. Viklenko, A. V. Skunova, L. A. Bugaev, J.Ph.&Chem.Sol.,2023, 179, 111412
2. D. M. Wu, A. García-Etxarri, A. Salleo, J. A. Dionne, Plasmon-Enhanced Upconversion, J. Phys. Chem. Lett., 2014, 5, 4020–4031
3. W. Zhang, J. Lin, M. Cheng, S. Zhang, Y. Jia, J. Zhao J Quant Spectrosc Radiat Transf, 2015, 159, 39–52

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПИРОХЛОРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3D-МЕТАЛЛОВ

С. В. Некипелов^{1,2}, Н. А. Жук², О. В. Петрова¹, Д. В. Сивков¹,

К. А. Бакина¹, Р. Н. Скандаков¹, В. О. Рутковский^{1,2},

А. М. Лебедев³, Р. Г. Чумаков³, В. Н. Сивков¹

¹«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», г. Сыктывкар, Россия

²«Сыктывкарский государственный университет
им. Питирима Сорокина», г. Сыктывкар, Россия

³НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

e-mail: valeriy.rutkovskiy@mail.ru, тел.: 8 (8212) 391451

Сложные висмутсодержащие пирохлоры перспективны благодаря своим отличным диэлектрическим свойствам — высоким значени-

ям диэлектрической проницаемости, малым значениям диэлектрических потерь в мегагерцовом диапазоне частот и регулируемому температурному коэффициенту емкости. В связи с этим материалы на основе таких пироксенов могут быть использованы при изготовлении многослойных керамических конденсаторов, диэлектрических резонаторов, термисторов, толстопленочных резисторов и коммуникационных элементов, генераторов или фильтров СВЧ.

Полезным обстоятельством является тот факт, что висмутсодержащим пироксенам отвечают широкие области гомогенности благодаря структурной гибкости кристаллической решетки пироксена. Находясь в пределах одного структурного типа и меняя качественный и количественный составы, в том числе допирая структуру малыми содержаниями атомов 3d-металлов, можно существенно варьировать свойства пироксена, что позволяет изучать влияние химического состава на его физико-химические характеристики.

В представленной работе показаны результаты исследования методами NEXAFS- и XPS-спектроскопии электронного состояния и характера межатомных взаимодействий атомов 3d-металлов в ниобатах, танталатах и антимонатах висмута со структурой пироксена. Твердые растворы были синтезированы твердофазным методом при температурах до 1100°C [1]. Все образцы были исследованы методами рентгеноабсорбционной (NEXAFS) спектроскопии с использованием синхротронного излучения на станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий [2] и рентгеноэлектронной фотоэлектронной (XPS) спектроскопии с использованием рентгеновского спектрометра Thermo Scientific ESCALAB 250Xi в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка Санкт-Петербургского университета.

На основании спектральных исследований было показано, что атомы кобальта, никеля, меди и цинка в данных твердых растворах висмутсодержащих пироксенов присутствует в основном в степени окисления +2, железа — +3, хрома — +3/+6, а марганца — +2/+3.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Lebedev A. M., Menshikov K. A., Nazin V. G., Stankevich V. G., Tsetlin M. B., Chumakov R. G. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2021, 15, 1039.

2. Zhuk N. A., Sekushin N. A., Semenov V. G., Fedorova A. V., Selyutin A. A., Krzhizhanovskaya M. G., Lutoev V. P., Makeev B. A., Kharton V. V., Sivkov D. N., Shpynova A. D. J. Alloys Comps., 2022, 903, 163928.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА И ПРОТЯЖЕННОСТИ ПЕРЕХОДНЫХ ОБЛАСТЕЙ В КОРОТКОПЕРИОДНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛАХ

**С. С. Сахоненков¹, Р. М. Смертин², Р. С. Плешков²,
В. Н. Полковников², Е. О. Филатова¹**

¹*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия*

²*Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород,
Россия*

e-mail: s.sakhonenkov@spbu.ru

Многослойные рентгеновские зеркала являются гибким инструментом для работы с рентгеновским излучением в широком диапазоне энергий: от экстремального ультрафиолета до жесткого рентгена. Данная гибкость обеспечивается за счет подбора оптимальной пары материалов слоев и их толщины для того или иного диапазона. Короткопериодные многослойные зеркала (с величиной периода менее 2—3 нм) используются для обеспечения работы рентгеновских микроскопов в диапазоне «окна прозрачности воды», каналов вывода синхротронного излучения и нейтроноводов, при проведении исследований высокотемпературной плазмы. Ключевым параметром многослойного зеркала, который определяет работу всей системы, является коэффициент отражения. На его величину влияет множество факторов, однако одним из основных является формирование переходных областей между слоями, которые приводят к уменьшению оптического контраста [1]. Стоит отметить, что в случае короткопериодных зеркал протяженность переходного слоя может быть сопоставима с номинальной толщиной исходных слоев, что может привести к уменьшению коэффициента отражения в разы. Переходные слои включают в себя межслоевую шероховатость, перемешивание слоев и образование химических соединений между ними. Их формирование происходит за счет перемешивания энергетичных налетающих атомов с атомами слоя-подложки при синтезе методом магнетронного

распыления и при взаимодиффузии слоев. Протяженность переходных слоев также может увеличиваться при нагреве зеркала по причине воздействия излучения большой мощности. Отсюда следует необходимость проведения детального исследования состава и протяженности переходных слоев в различных многослойных структурах для дальнейшего определения оптимального метода борьбы с формированием переходных слоев. Среди стандартных методов выделяют, как правило, использование ультратонких барьерных слоев [2], нитридизацию [3] и ионное ассистирование [4].

В данной работе рассматривается подход к исследованию состава и протяженности переходных областей в короткопериодных многослойных зеркалах с использованием методик рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии. Помимо этого, изучается влияние нагрева и введения тонких барьерных слоев на параметры переходных слоев, и как следствие, на отражательные характеристики зеркал.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20125-П). Исследования методом РФЭС проводились на оборудовании ресурсного центра «Физические методы исследования поверхности» научного парка СПбГУ и станции НаноФЭС НИЦ «Курчатовский институт». Данные РД и ПЭМ были получены на оборудовании ресурсных центров «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Нанотехнологии» научного парка СПбГУ.

Литература

1. Stearns D. G. The scattering of x rays from nonideal multilayer structures // J Appl Phys. — 1989. — Vol. 65, № 2. — P. 491—506.
2. Nicolet M.-A. Diffusion barriers in thin films // Thin Solid Films. — 1978. — Vol. 52, № 3. — P. 415—443.
3. Huang Q., Liu Y., Yang Y., Qi R., Feng Y., Kozhevnikov I. V., Li W., Zhang Z., et al. Nitridated Ru/B 4 C multilayer mirrors with improved interface structure, zero stress, and enhanced hard X-ray reflectance // Opt Express. — 2018. 3 Vol. 26, № 17. — P. 21803.
4. Spiga D., Pareschi G., Citterio O., Banham R., Basso S., Cassanelli M., Cotroneo V., Negri B., et al. Development of multilayer coatings (Ni/C-Pt/C) for hard x-ray telescopes by e-beam evaporation with ion assistance // Proceedings of SPIE / ed. Hasinger G., Turner M. J.L. — SPIE, 2004. — Vol. 5488. — P. 813.

СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАТРИЯ С АЗОТСОДЕРЖАЩИМ ФТОРИРОВАННЫМ ГРАФИТОМ

Г. И. Семушкина¹, Ю. В. Федосеева¹, В. И. Сысоев¹, А. А. Макарова²

¹*ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия*

²*ICB, FUB, Берлин, Германия*

e-mail: semushkina.g@niic.nsc.ru

Разработка новых эффективных систем хранения и аккумуляции электроэнергии имеет решающее значение для перехода к возобновляемым источникам энергии и сокращения выбросов углекислого газа. К ним относятся батарейки, конденсаторы и другие устройства, которые обеспечивают эффективное и надежное хранение энергии. Для повышения эффективности устройств и снижения затрат ведутся активные поиски новых электродных материалов. Графит продемонстрировал многообещающие энергетические и емкостные свойства как в литий-ионных, так и в натрий-ионных батарейках благодаря своей слоистой структуре. Дополнительная модификация графита позволяет увеличивать энергоемкость в 2—3 раза за счет создания дополнительных адсорбционных центров. В частности, углеродные наноматериалы, легированные азотом, обладают большей емкостью и лучшей циклической стабильностью для литий-ионных аккумуляторов по сравнению с нелегированными углеродными материалами. Функционализация графита атомами фтора (ФГ) увеличивает площадь поверхности, что способствует увеличению стабильности и пористости структуры анода на его основе. Увеличенная площадь поверхности позволяет ФГ накапливать больше ионов щелочных металлов, что приводит к повышению производительности и емкости аккумулятора. Переход от литий-ионных к натрий-ионным аккумуляторам с усовершенствованным анодом потенциально позволяет снизить затраты без ущерба для эффективности.

С целью исследования взаимодействия натрия с функционализированным ФГ-анодом в натрий-ионных аккумуляторах мы провели сравнительный анализ структурной и химической эволюции пленок ФГ и модифицированных азотсодержащих пленок ФГ до и после взаимодействия с натрием. Натрий осаждался на поверхность образцов в условиях высокого вакуума в препаративной камере измерительной станции. Эксперимент по осаждению натрия и регистрация спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и околопороговой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (NEXAFS) проводили на станции Россий-

ско-Германского канала синхротронного центра BESSY II (Берлин, Германия). Для определения химического состояния включенного азота и ФГ слоя после взаимодействия с натрием была применена NEXAFS и XPS в режиме *in situ* в сочетании с квантово-химическим моделированием.

После отжига пленки ФГ в атмосфере аммиака и диметилформамида обнаружено внедрение атомов азота в различных конфигурациях и образование азотсодержащих функциональных групп в ФГ в зависимости от типа реагента. Установлено значительное дефторирование пленок ФГ. Последующее осаждение натрия на исходной пленке ФГ и функционализированной азотом показало различную эффективность накопления ионов натрия в зависимости от механизма взаимодействия с изучаемыми системами. Моделирование и интерпретация спектров проведена на основе расчетов методом функционала плотности для исходных фрагментов графита и фторированного графита, содержащих различные виды азота в сопоставлении с данными системами, взаимодействующими с натрием.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 19-73-10068). Автор выражает благодарность Сибирскому суперкомпьютерному центру Сибирского отделения Российской академии наук за предоставленные вычислительные ресурсы для проведения численных экспериментов. (<http://www.sccc.icmmg.nsc.ru>).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ГИБРИДНОГО ИНТЕРФЕЙСА НА ОСНОВЕ ПОЛИДОФАМИНА МЕЖДУ ТКАНЬЮ ЗУБА И ДЕНТАЛЬНЫМ КОМПОЗИТОМ МЕТОДАМИ ИК И РАМАНОВСКОЙ МИКРОСПЕКТРОСКОПИИ НА СУБМИКРОННОМ УРОВНЕ

**П. В. Середин¹, Д. Л. Голощапов¹, Н. С. Буйлов¹, В. М. Кашкаров¹,
Х. С. Шихалиев¹, А. Ю. Потапов¹, Ю. А. Ипполитов², R. Freitas³**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный медицинский университет
им. Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия*

³*Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Campinas, Brazil
e-mail: paul@paul.phys.ru, тел.: 8 (473) 2208363*

Совокупностью методов микроскопического и спектрального анализа, с применением многомерных методов обработки гиперспектрального мас-

сива данных в данной работе показано, что может быть сформирован PDA гибридный интерфейс между природной твердой зубной тканью и стоматологическим композитом. Обнаружено, что традиционные способы подготовки зубной ткани создают микрометрический рельеф поверхности интерфейса эмаль/стоматологический композит в пределах которого ($\sim 4\mu$) обнаруживается пространственное распределение плёнки полидофаминна, выступающей в роли природоподобного адгезива, и обеспечивающего сцепление материалов. При этом, несмотря на тот факт, что природная эмаль имеет пространственные вариации химического и фазового состава, а выполненная ее предобработка на этапе стоматологических реставраций снижает не только степень кристалличности, но и меняет морфологию приграничного слоя и фазовый состав в микронной области, выполненная процедура защелачивания и последующего осаждения биоинспирированного адгезива позволяет сформировать гибридный интерфейс. Необходимо отметить, что Рамановская и FTIR - микроспектроскопии выявляют одни и те же особенности формирования PDA гибридного слоя между природной эмалью и стоматологическим композитом. Однако расхождение в полученных результатах (ширина сформированного слоя, фазовый состав и т. д.) связаны с тем, что синхротронная FTIR микроспектроскопия, в виду большей глубины анализа, дает усредненные характеристики для всей структуры. При этом Рамановская спектроскопия, не смотря на тот факт, что спектры являются усредненными из аналогичных областей от серии аналогичных образцов, все же является локальным методом анализа и выявляет тонкие особенности. При этом оба метода фиксируют изменения в молекулярном составе, происходящие на границе интерфейса при формировании PDA гибридного слоя. Резюмируя полученные в нашей работе результаты нужно отметить, что создание бионанокompозитов на основе PDA в виде буферных (гибридных) слоев, обеспечивающих улучшенную адгезию к двум разнородным материалам, является перспективным направлением в области стоматологического материаловедения. Однако внедрение разрабатываемых технологий в клиническую практику для процедур малоинвазивной реставрации зубной ткани, требует более детального изучения и апробации технологии ускоренного осаждения PDA гибридных слоев, создания самособирающихся биомиметических нанокompозитов с антибактериальными свойствами, а также изучения процессов старения, в т. ч. в условиях близких к реальным.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-15-00026).

ПЕРСПЕКТИВЫ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ И БИОМАТЕРИАЛОВ НА СТАНЦИИ НАНОФЭС КИСИ

**В. Н. Сивков¹, К. А. Бакина¹, С. В. Некипелов¹,
О. В. Петрова¹, Д. В. Сивков¹, Р. Н. Скандаков¹**

¹Федеральный исследовательский центр Коми НЦ УрО РАН,

г. Сыктывкар

e-mail: sivkovvn@mail.ru, тел.: 8 (8212)391451

В настоящее время единственным каналом доступным российским пользователям для проведения NEXAFS исследований в ультрамягком рентгеновском (УМР) диапазоне 40—1200 эВ является канал выхода и монохроматизации УМР излучения НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ) [1]. Нами были проведены исследования на Канале НаноФЭС с целью изучения возможности реализации методик измерения сечений поглощения методом полного электронного выхода (Total electron yield, TEY) с учетом аппаратных искажений и немонохроматического фона в области NEXAFS (Near edge X-ray absorption fine structure) C1s, N1s, Ca2p и Sc 2p- краев поглощения с применением абсорбционных титановых фильтров для подавления длинноволнового немонохроматического фона и излучения кратных порядков в интервале энергий квантов 450—900 эВ. Абсорбционный фильтр в виде свободной титановой пленки толщиной ~ 250 нм, закрепленный на металлической сетке был установлен в камере монитора на общем держателе рядом с золотой сеткой-монитором. Исследования показали, что развитая методика может применяться не только в области 1s края поглощения атома азота и 2p краев поглощения атомов калия, кальция и скандия, но и в области 1s порога ионизации углерода не смотря на наличие значительной структуры в падающем пучке СИ.

В докладе обсуждаются, как полученные результаты, так и перспективы проведения измерений сечения поглощения в более мягкой области УМР спектра 90—200 эВ, где располагаются 2p края поглощения атомов кремния, фосфора и серы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Lebedev A. M., Menshikov K. A., Nazin V. G., Stankevich V. G., Tsetlin M. B., Chumakov R. G., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2021, 15, 1039—1044.

NEXAFS И XPS ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Р. Н. Скандаков, С. В. Некипелов, О. В. Петрова,
В. Н. Сивков, К. А. Бакина**

Физико-математический институт, ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,

Сыктывкар, Россия

e-mail: scanick@yandex.ru, тел.: 8 (908) 3296082

Получение информации об атомной и электронной структуре наноструктурированных систем является важнейшей задачей современного материаловедения. Сложность атомного строения наряду с наноразмерной структурой этих материалов требует применения комбинированного набора комплементарных методов исследования. Эти методы должны быть высокоинформативными для объектов наноразмерного масштаба, неразрушающими и обладать высокой чувствительностью к атомному строению образца и его изменениям при физико-химических воздействиях. Традиционными, позволяющими непосредственно получать детальную информацию о веществе на наноуровне, являются методы рентгеновской абсорбционной спектроскопии (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, NEXAFS) [1] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) [2], которые в сочетании с такими известными методами, как электронная микроскопия, рамановская спектроскопия и рентгеновская дифрактометрия, обеспечивают получение новых достоверных знаний об атомной и электронной структуре материалов.

В работе проведены NEXAFS исследования нанокомпозитов металлов Cr/MWCNT, Fe/MWCNT, Cu/MWCNT, WC/MWCNT, приготовленных путем декорирования внешней поверхности многостенных углеродных нанотрубок (Multi Walled Carbon Nanotube, MWCNT) наночастицами меди методом пиролиза формиата меди. Показано, что в инертной атмосфере аргона наночастицы меди осаждаются на поверхности MWCNT в виде частиц разного размера, состоящих из ядра металлической меди и оболочки из закиси меди. Однако, после выноса на атмосферу, на поверх-

ности наночастиц частиц меди наблюдается образование оксида меди CuO. Определено, что хорошая адгезия наночастиц меди на поверхности MWCNT обеспечивается образованием химической связи между атомами углерода внешнего графенового слоя нанотрубки и атомами кислорода оксида меди (Cu_2O) покрывающей ядро наночастицы.

Также получены данные по процессу модификации фуллерита C_{60} при HIP обработке в атмосфере аргона, в диапазоне температур 900—1200 К и давлении 1000 атм. Показано, что в результате HIP обработки происходит слияние молекул фуллерена и образование замкнутых наноразмерных структур, состоящих в основном из гексагонов. Впервые получены результаты исследования нанопористого кремния, приготовленного травлением в стандартном растворе без и с добавлением 5 % йода. Определены основные структурные параметры слоев (толщина, деформация и пористость), а так же показано, что поверхность кремниевого скелетона покрывается слоем оксида кремния толщиной 1.5—2.4 нм, при этом йод, присутствующий в электролите, не внедряется в структуру кремния, обеспечивая тем самым увеличение его пористости. Показано, что NEXAFS Si2p-спектры кремниевого скелетона совпадают со структурой спектра кристаллического кремния, а NEXAFS 2p-спектр поверхностного слоя кремния соответствует NEXAFS 2p-спектру хорошо координированного SiO_2 . Обнаружено, что интерфейс между кремниевым скелетоном и покрывающим слоем оксида кремния состоит из слоев кремния $\text{Si}^+(0,1 \text{ нм})$, $\text{Si}^{+2}(0,05 \text{ нм})$, $\text{Si}^{+3}(0,25 \text{ нм})$.

Литература

1. *Stöhr J. NEXAFS Spectroscopy* / J. Stöhr. — Berlin : Springer, 1992. — 403 p.
2. Электронная спектроскопия / К. Зигбан и др. — М. : Мир, 1971.

ОЦЕНКА СПОСОБНОСТИ БАКТЕРИАЛЬНОГО БЕЛКА DPS К АЛЬТЕРНАТИВНОМУ НАСЫЩЕНИЮ ИОНАМИ МЕТАЛЛОВ IN VITRO

**М. С. Скоробогатов, М. А. Терехова, И. Л. Черниговский,
С. С. Антипов**

ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1

e-mail: skorobogatov.matvei@mail.ru тел: +7 (930) 416-10-46

Одной из актуальных современных фундаментальных задач является обоснование принципов молекулярного конструирования на основе орга-

нических веществ способных к самосборке. Главным вопросом оставалось одно — какие биомакромолекулы использовать для этого. Белок Dps является бактериоферритином, способным аккумулировать в своей полости ионы Fe^{2+} и Fe^{3+} [1] при определенных условиях, что делает данный белок природной наночастицей. С использованием соли Мора, возможна модификация структуры ферритового ядра, с последующим изменением размера и других, возможных, характеристик получаемых наночастиц [2].

Целью работы являлось проведение исследования в прямом и модельном экспериментах влияния соединений Co и Ni на олигомерную форму белка Dps и оценка возможную локализацию их оксидов в додекамере.

Объектом исследования являлся рекомбинантный белок Dps, биосинтез которого осуществляли в клетках *E.coli* BL21*(DE3), трансформированных вектором pGEM-dps. В ходе работы решались задачи получения рекомбинантного белка Dps *E.coli*, его выделения и очистки, а также экспериментальной оценки изменения олигомера Dps в присутствии ионов металлов с переходной валентностью. Помимо этого, проведено сопоставление полученных данных с результатами, зарегистрированными в присутствии ионов Fe_{2+} и выявления областей локализации оксидов металлов в додекамере Dps методом последовательного молекулярного докинга.

Интересным является предположение, что Dps способен накапливать ионы других металлов с переменной валентностью, таких как Co и Ni. Данная гипотеза имеет место быть, после ее проверки методом последовательного молекулярного докинга, в результате которого были получены данные о локализации ионов металлов в полости Dps и модификации олигомерной структуры белка. В качестве мишени была использована модель додекамера белка Dps взятая из международной базы данных, содержащую информацию о структурах белка Protein Data Bank. Модели FeO , Fe_2O_3 , NiO , Ni_2O_3 , CoO , и Co_2O_3 были получены с использованием программного обеспечения HyperChem Professional, там же была оптимизирована их геометрия. Расположение оксидов на поверхностях Dps оценивалось с использованием программного пакета Autodock Tools.

Было установлено, что присутствие в растворе белка Dps ионов никеля и кобальта стимулирует его олигомеризацию, однако эффективность стабилизации крупных олигомеров Dps в присутствии ионов железа выше, чем в присутствии ионов кобальта или никеля. Помимо этого, в присутствии ионов никеля выявлено формирование дополнительной олигомерной формы Dps, которая не была зарегистрирована в присутствии других металлов. Модельные эксперименты выявили наличие общих сайтов локализации в трехмерной структуре белка Dps для молекул FeO , Fe_2O_3 ,

NiO, Ni₂O₃ и Co₂O₃, а распределение молекул CoO носит стохастический характер. Установлено, что эффективность образования высокомолекулярных олигомеров белка Dps выше в случае смеси эквимольных концентраций ионов металлов, при этом для достижения наиболее выраженного эффекта необходимо присутствие ионов железа.

Литература

1. Antipov S., Turishchev S., Purtov Yu. et. al., *Molecules*, 2017, 22, 1904
2. Паринова Е. В., Антипов С. С., Беликов Е. А. и др., *Конденсированные среды и межфазные границы*, 2022, 24(2), 265—272

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНОГО СКУТТЕРУДИТА CoSb₃

**В. А. Смирнов¹, Н. А. Борщ², М. Д. Манякин¹,
С. И. Курганский¹**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный технический университет,
Воронеж, Россия*

e-mail: smirnov@office365.vsu.ru, тел: 8 (903) 8604184

В связи с ограниченностью углеводородного сырья, которое используется для получения электрической энергии, все большее развитие получают альтернативные источники энергии. Одним из перспективнейших направлений альтернативной энергетики является прямое преобразование тепловой энергии в электрическую, которое отличается рядом преимуществ по сравнению со стандартными методами генерации электрической энергии: простотой конструкции энергоустановок, использующих этот метод преобразования, отсутствием движущихся частей, что обеспечивает высокие надежность и продолжительность эксплуатации. Устройства и материалы, преобразующие тепловую энергию в электрическую и наоборот посредством эффекта Зеебека называют термоэлектрическими.

Эффективность термоэлектрического преобразователя тем больше, чем больше, чем больше термоэлектрическая добротность материала Z [1]:

$$Z = \sigma S^2 / \kappa,$$

где κ — теплопроводность, σ — электропроводность, S — коэффициент Зеебека.

Перспективными считают термоэлектрики с наибольшей термоэлектрической добротностью. К таковым относятся клатратные кристаллы [2] и скуттерудиты.

Скуттерудиты — группа перспективных термоэлектриков со структурой типа CoAs_3 . Среди скуттерудитов выделяется подгруппа материалов, основанных на CoSb_3 — группа, включающая сам CoSb_3 и материалы с общей формулой A_xCoSb_3 , где А — это щелочной, щелочноземельный или редкоземельный металл, а x — число, принадлежащее отрезку от 0 до 0.25. Дополнительные атомы металлов сорта А заполняют икосаэдрические пустоты, существующие в кристаллической решетке CoSb_3 . Эти атомы поглощают энергию тепловых колебаний кристаллической решетки, уменьшая тем самым теплопроводность материала κ . При этом электроны проводимости этих дополнительных атомов металла участвуют в электропроводности, увеличивая электрическую проводимость σ без уменьшения коэффициента Зеебека. В итоге заполнение икосаэдрических пустот решетки увеличивает термоэлектрическую добротность Z за счёт сразу двух механизмов.

Для скуттерудитов важную роль в повышении теплопроводности σ играет явление эффективной конвергенции зон [3]. Эффективная конвергенция зон [3] — явление, при котором нижняя по энергии зона проводимости имеет несколько минимумов помимо собственно дна зоны проводимости. Соответственно, чем ниже по энергии дополнительные минимумы и чем их больше, тем выше электропроводность материала.

В данном исследовании выполнены расчеты незаполненного скуттерудита CoSb_3 . По построенной зонной структуре определено количество минимумов нижней энергетической зоны проводимости в пределах первой зоны Бриллюэна и энергетическое расстояние между этими минимумами и дном зоны проводимости. Вычисления проведены на основе теории функционала плотности DFT с помощью программного пакета WIEN2k с использованием обменно-корреляционных потенциалов в обобщенном градиентном приближении и так называемом приближении mBJ.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Ioffe A. F. Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling. London: Infosearch limited, 1957, 184 p.

2. Бориц Н. А., Курганский С. И., Переславцева Н. С. Физика и техника полупроводников, 2010, Т. 44, № 8, 1021—1026.
3. Hanus R., Chemistry of materials, 2017, 29, 1156—1164.

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНАЯ ДИАГНОСТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МЕДНЫХ ЦЕНТРОВ ЦЕОЛИТОВ

**Г. Б. Сухарина¹, А. М. Ермакова¹,
Я. Н. Гладченко-Джевелекис¹, К. Д. Кулаев¹, Е. Е. Поносова¹,
Л. А. Авакян¹, В. В. Прядченко¹, Л. А. Бугаев¹**
*¹Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: gbsukharina@sfsu.ru*

Цеолиты — микропористые алюмосиликатные соединения, которые представляют интерес как перспективные материалы с точки зрения создания эффективных катализаторов для процессов превращения метана в метанол. В настоящее время одна из наиболее значимых научных задач в этой области посвящена изучению взаимосвязи каталитических свойств и структурных особенностей ближнего окружения металлических центров.

В данной работе представлено исследование структуры активных центров цеолитов типа морденит на разных этапах каталитического цикла. Рассмотрены два вида синтеза Cu-MOR: жидкофазный (Cu-MOR_{жф}), представляющий собой водный ионный обмен с использованием ацетата меди (II), и твердофазный (Cu-MOR_{тф}), представляющий собой ионный обмен с использованием хлорида меди (II). Выполнено моделирование вероятного атомного окружения меди в каркасе цеолита, а также расчет и анализ Cu K-XANES, для рассматриваемых структур. Компьютерное моделирование структур и спектров было выполнено с использованием двух программных комплексов Quantum Espresso [1] и FDMNES [2], соответственно.

С использованием полученной структурной информации и на основе литературных данных [3] установлена взаимосвязь структурных особенностей сформированных медных центров Cu-MOR и выхода метанола на первом каталитическом цикле при рассмотрении твердофазного синтеза.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 23-22-00438)

Литература

1. *Giannozzi P. et al*, J. Phys. Condens Matter., 2009, 21, 395502.
2. *Joly Y.*, Physical Review B., 2001, 63, 125120.
3. *Bozbag S. E. et al*. Catal. Sci. Technol, 2016, 6, 5011—5022.

СПЕКТРОМИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФЕРРИМАГНИТНОГО ГРАФЕНА НА ПОДЛОЖКЕ Au/Co(0001)

А. В. Тарасов^{1,2}, А. В. Ерыженков¹, А. Г. Рыбкин¹

¹*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия*

²*Московский физико-технический институт,
Долгопрудный, Россия*

e-mail: artem.tarasov@spbu.ru, тел.: 8 (960) 2789996

На сегодняшний день графен остается одним из наиболее интенсивно исследуемых материалов благодаря высокому потенциалу его применения в двумерной электронике и спинтронике. Несмотря на то, что в квазисвободном состоянии графен является немагнитным материалом со слабым спин-орбитальным взаимодействием (СОВ), его электронные свойства могут существенно изменяться при контакте с атомами подложки. Например, взаимодействие графена с тяжелыми атомами может привести к увеличению СОВ в графене, что, в свою очередь, позволяет эффективно генерировать спиновые токи на основе спинового эффекта Холла и его квантовой версии [1]. С другой стороны, сочетание сильного спин-орбитального взаимодействия и магнетизма является необходимым условием для наблюдения квантового аномального эффекта Холла [2]. Такое сочетание может быть реализовано в магнито-спин-орбитальном (МСО) графене в интерфейсе с Au/Co(0001), что не только обеспечивает условия для реализации магнитного эффекта близости и гигантского эффекта Рашбы [3], но и позволяет сохранять линейный характер дисперсии электронных полос вблизи уровня Ферми и сверхвысокую подвижность носителей заряда.

В данной работе расчеты в рамках теории функционала плотности (ТФП) было показано наличие ферримагнитного порядка в А- и В-подрешетках графена, индуцированного дислокационными петлями

в интерфейсе Au/Co [4]. Такое магнитное упорядочение системы наряду со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, индуцированным Au, как оказалось, приводит к появлению запрещенной зоны в К-точке первой зоны Бриллюэна графена и асимметрии его спиновой текстуры. В то же время проведенные нами расчеты в рамках модели сильной связи показывают, что графен в такой системе может проявлять нетривиальные топологические свойства, которые могут быть использованы для реализации эффекта Холла кругового дихроизма и создания инфракрасного детектора циркулярно поляризованного излучения на основе графена [4, 5].

Однако следует отметить, что исследования МСО графена выявляют одну важную проблему экспериментального изучения подобных систем. Из-за очень малых магнитных моментов атомов углерода (наличие которых, однако, существенно влияет на электронную и спиновую структуры МСО графена) исследование магнитного порядка графена стандартными методами представляет собой неразрешимую задачу. В данной работе путем моделирования пространственного и энергетического распределения электронной плотности было показано, что магнетизм атомов углерода проявляется в данных сканирующей туннельной спектроскопии (СТС). Моделирование данных СТС и их сравнение с экспериментальными результатами дает твердую уверенность в наведении ферромагнитного состояния в графене на подложке Au/Co(0001) и позволяет оценить величину энергетической щели в его зонной структуре.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 94031444).

Литература

1. C. L. Kane, E. Mele, J. Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005)
2. V. T. Phong, N. R. Walet and F. Guinea, 2D Mater. 5, 014004 (2017)
3. D. Marchenko et al., Nat. Commun. 3, 1232 (2012)
4. A. G. Rybkin et al., Phys. Rev. Lett. 129, 226401 (2022)
5. A. V. Eryzhenkov et al., Symmetry 15, 516 (2023)

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ОКСИХЛОРИДОВ ТАНТАЛА И НИЗШИХ ОКСИДОВ МОЛИБДЕНА

Е. А. Тепляков¹, В. Г. Яржемский¹, Е. Г. Ильин²

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³ИОНХ РАН имени Н. С. Курнакова, Москва, Россия

e-mail: egery23@gmail.com, тел.: 8 (926) 1181853

В данной работы проводится теоретический анализ электронного строения и химических связей в кластерах оксихлоридов тантала и низших оксидов молибдена, для составов, соответствующих полученным методами MALDI-TOF, а также поиск наиболее выгодных по энергии геометрических конфигураций методами квантовой химии [1], [2].

В соединениях низших оксидов молибдена обнаружена сильная металл-металл связь по сравнению с кластерами оксихлоридов тантала. Почти во всех соединениях низших оксидов молибдена наблюдается длина химической связи Мо-Мо порядка 2.7 Å.

Литература

1. Ilin E. G., Parshakov A. S., Yarzhemsky V. G., Teplyakov E. A., Buryak A. K., MALDI-TOF and Quantum Chemical Study of Non-stoichiometric Tantalum Oxychloride Clusters, arxiv

2. Il'in E. G., Parshakov A. S., Yarzhemsky V. G., Teplyakov E. A., Buryak A. K., International Journal of Mass Spectrometry, 2023, 492, 117100

МОРФОЛОГИЯ, ХИМИЧЕСКИЙ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЦИНК-НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ: РОЛЬ ДОБАВКИ ГЛИЦИНА

А. Е. Тинаева, О. А. Козадеров

ВГУ, Воронеж, Россия

e-mail: tinaeva.98@mail.ru, тел.: 8 (903) 8527150

Гальванопокрытия на основе сплава бинарной системы Zn–Ni обладают повышенной коррозионной стойкостью в агрессивных средах, термостойкостью и широко используются во многих отраслях промышлен-

ности [1], а также являются перспективным материалом для получения электрокатализаторов на основе нанопористого никеля путем селективного растворения цинка. Знание морфологии, химического и фазового состава покрытий, а также кинетики осаждения металлов позволит оптимизировать условия синтеза цинк-никелевых покрытий с заданным составом и свойствами.

Задачи работы: 1) установить роль добавки глицина в раствор электролита в кинетике процесса электроосаждения сплава ZnNi; 2) выявить влияние глицина на морфологию, химический и фазовый состав цинк-никелевых покрытий; 3) найти парциальные скорости осаждения Zn и Ni из аммиачно-хлоридного электролита осаждения цинк-никелевых сплавов.

Циклические вольтамперограммы регистрировали на Au-электроде в потенциодинамическом режиме со скоростью сканирования потенциала $V = 10$ мВ/с от бестокового значения в катодную область до $E_k = -1200$ мВ, затем в анодную до $E_a = 600$ мВ. Потенциостатическое осаждение сплавов ZnNi проводили из низкоконцентрированных аммиачно-хлоридных электролитов, содержащих добавку глицина в концентрациях 0,08 М, 0,30 М и без его добавления. Морфологию, химический и фазовый состав синтезируемых цинк-никелевых покрытий определяли методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеноспектрального микроанализа и рентгеновской дифракции соответственно. Зависимость состава цинк-никелевых покрытий от времени осаждения в начальный период процесса устанавливали методом рентгеноспектрального микроанализа после потенциостатического осаждения на медные пластины ($S_{\text{geom}} = 1$ см²) при потенциале осаждения $E_{\text{ос}} = -860, -880, -900, -1000$ мВ. Потенциалы E в работе приведены по шкале стандартного водородного электрода (ст. в. э.), плотность тока i рассчитана на единицу геометрической площади электрода.

Установлено, что кинетика процесса электроосаждения цинк-никелевых сплавов для растворов без глицина и с добавлением глицина одинакова: лимитирующей стадией является диффузионный массоперенос, а стадия переноса заряда протекает необратимо.

Добавление аминокислоты в концентрации 0,08 М способствовало получению более мелкозернистых покрытий с развитой неоднородной поверхностью и повышенным содержанием атомной доли никеля, при этом фазовый состав покрытий практически не изменился: цинк-никелевые сплавы являются гетерогенными, включают Zn и интерметаллическую γ -фазу $\text{Ni}_2\text{Zn}_{11}$. Введение в электролит глицина в относи-

тельно высокой концентрации (0,30 М) привело к существенному замедлению процесса электроосаждения цинк-никелевого сплава, увеличению содержания никеля в покрытиях в среднем на 9,7 ат. % и улучшению его декоративных характеристик.

С применением метода рентгеноспектрального микроанализа найдена зависимость состава осаждаемого покрытия Zn-Ni от времени и рассчитаны парциальные кривые осаждения никеля и цинка.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023—2025 годы, проект № FZGU-2023-0006.

Литература

1. Chat-Wilk K., Rudnik E., Wloch G. [et al.] Journal of Solid State Electrochemistry, 2022, 26, 1715—1731.

ОСОБЕННОСТИ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ SnO₂

К. А. Фатеев, О. А. Чувенкова, С. В. Рябцев, С. Ю. Турищев

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: fateev@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208281

Популярным газочувствительным материалом является тонкопленочные структуры на основе оксида олова SnO₂. При переходе к наноматериалам могут быть достигнуты преимущества в таких показателях, как низкая стоимость, высокая чувствительность, малое энергопотребление, способность к интеграции с другими устройствами и способность к миниатюризации. Примером могут быть нитевидные кристаллические структуры на основе оксида олова с высоким соотношением поверхности к объему. Свойства таких объектов находятся в прямой зависимости от атомного и электронного строения развитой поверхности. Знания о специфике локального атомного окружения поверхности нитевидных нанокристаллов, ее физико-химическом состоянии должно позволить управлять формировать такие объекты с заданными свойствами.

В работе исследованы нитевидные кристаллы оксида олова, полученные методом газотранспортного синтеза. Использовалась высокотемпературная печь, оборудованная системой подачи газа. В качестве катализа-

тора использовалось металлическое — олово, чистотой 99,99 %. Синтез происходил при атмосферном давлении, при нагреве до 1100°C и 1200°C. В качестве газа — носителя были использованы аргон или азот насыщенные парами воды. Кроме того, были исследованы 30 нм тонкие пленки оксида олова, полученные методом магнетронного распыления и отожженные на воздухе при 750 С и пленки, полученные методом химического осаждения из газовой фазы. В качестве прекурсора использовался терт-бутоксид олова (IV) $\text{Sn}(\text{OtBu})_4$, при температуре до 30—35°C. Все пленки осаждались на подложки кремния.

Исследования локальной плотности свободных электронных состояний методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES) и исследования зарядовых состояний атомов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) проводились на Российско-Германском канале RGBL синхротрона BESSYII (Берлин). Ток в кольце составлял ~ 150—300 мА, интенсивности излучения 10^{12} фот./сек. Глубины анализа составляли ~10 нм и ~ 1—2 нм, соответственно для методов XANES и XPS.

Проведенные высокоточные исследования атомного и электронного строения, физико-химического состояния нитевидных кристаллов оксида олова синхротронными методами XANES и XPS показали, что существенный количественный вклад поверхности по сравнению с объемом нитевидных кристаллов оксида олова сечением до 20 нм, при протяженности до нескольких микрометров, приводит к влиянию несовершенства поверхности на электронно-энергетический спектр, состав, физико-химическое состояние этой поверхности. Недостаток атомов кислорода в слоях развитой поверхности нитевидных кристаллов приводит к образованию препика в синхротронных спектрах XANES, соответствующего состояниям в запрещенной зоне диоксида олова. В случае существования условий, обеспечивающих формирование упорядоченной (кристаллической) структуры диоксида олова, специфика морфологии не оказывает значительно влияния на распределение основных особенностей электронного спектра, в том числе для нитевидных кристаллов. Доокисление пленок металлического олова до SnO_2 приводит к формированию двухфазной системы, состоящей из орторомбического и тетрагонального диоксида олова. Вариации условий формирования нитевидных кристаллов оксида олова могут позволить управлять их атомным и электронным строением, физико-химическим состоянием для современных электронных устройств.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 21-53-12042 ННИО_а.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ MoS_2 МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**А. Д. Федоренко¹, А. А. Коцун¹, Г. И. Семушкина¹,
А. Д. Николенко², А. В. Окотруб¹, Л. Г. Булушева¹**

¹*ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия*

²*ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: fedorenko@niic.nsc.ru, тел.: 8 (383) 330-53-52

Двумерные наноматериалы на основе дисульфида молибдена обладают уникальными физическими и химическими свойствами, что открывает широкие перспективы их применения в полупроводниковой электронике и в системах накопления энергии. В настоящее время остро стоит проблема создания накопителей энергии, обладающих высокой емкостью, мощностью и стабильностью, при этом все больше внимания привлекает использование натрия из-за его низкой стоимости. Однако улучшение характеристик натрий-ионных аккумуляторов требует синтез новых электродных материалов. Физические и химические свойства дихалькогенидов переходных металлов можно модулировать с помощью изменения количества слоев, замещения атомов металла или халькогена или модификацией поверхности, а также посредством комбинации малослойных дихалькогенидов переходных металлов с другими двумерными материалами с образованием гибридных структур. Создание вакансий или внедрение в решетку гетероатомов изменяет электропроводность и приводит к возникновению дополнительных активных сайтов для адсорбции атомов натрия. Для увеличения стабильности работы и электрической связанности при протекании электрохимических процессов активно используется графен для создания гибридных материалов.

Одними из наиболее высокоэффективных инструментов изучения электронного и пространственного строения различных веществ и материалов являются методы рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской спектроскопии поглощения. Рентгеновские спектры эмиссии и поглощения активно используются для определения частичного состава валентной зоны и зоны проводимости.

Для исследования взаимодействия материалов на основе дисульфида молибдена MoS_2 и гибридных MoS_2 /графен с гетероатомами N, Ni, Co с натрием при разрядке и зарядке батарейки была разработана ячей-

ка для измерений рентгеновских спектров поглощения (XANES) и рентгеновской эмиссионной спектров (РЭС). Которая затем была апробирована на станции «Космос» на синхротронном источнике ВЭПП-4 (ИЯФ СО РАН, Новосибирск) и лабораторном спектрометре «Стеарат» (ИНХ СО РАН). Одновременно с разрядом ячейки были получены XANES спектры краев серы и молибдена. Методы рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии позволяют получить полную информацию об особенностях электронной структуры, таких как парциальные плотности состояний зоны проводимости и валентной зоны, ширина запрещенной зоны, распределение электронной и спиновой плотности на атомах, входящих в состав соединения.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант 23-73-00048.

СУБМИКРОННЫЕ ТУННЕЛЬНЫЕ МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ КОНТАКТЫ НА ОСНОВЕ СЛОЕВ CoFeB/MgO/CoFeB

**И. А. Федотов^{1,2}, Е. В. Скороходов², И. Ю. Пашенькин²,
Н. С. Гусев²**

¹ННГУ им. Н. И. Лобачевского,

603950, г. Нижний Новгород, Россия

²Институт физики микроструктур РАН,

603950, г. Нижний Новгород, Россия

e-mail: fedotov@ipmras.ru, тел.: 8 (930) 713 44 16

Наноструктуры, в которых наблюдается эффект туннельного магнетосопротивления, востребованы в ряде приложений. В частности, туннельные магниторезистивные контакты (ТМК) являются базовым элементом как в коммерческих продуктах, так и в разрабатываемых новых поколениях систем магниторезистивной памяти с произвольным доступом (MRAM). Одним из направлений развития таких систем является поиск более энергоэффективных методов переключения логического (магнитного, резистивного) состояния ячеек для записи данных, поскольку в настоящее время процесс записи обеспечивается за счет пропускания спин-поляризованного тока гигантской плотности $\sim 10^6$ А/см².

Управление магнитным состоянием ТМК возможно за счет сдвига кривой намагничивания свободного ферромагнитного слоя при приложении напряжения, соответствующего электрическому полю $\approx 10^9$ В/м [1]. Переключение между состояниями возможно только в тех системах, где ширина фронта перемагничивания свободного ферромагнитного слоя меньше величины самого полевого сдвига. Однако ввиду малости данного эффекта — до 10 Э, данное требование невозможно выполнить в ТМК с латеральными размерами порядка микрометров, в которых процесс перемагничивания свободного слоя происходит через ряд неоднородных метастабильных состояний. По этой причине уже на стадии проведения исследований таких систем необходимо использовать методы нанолитографии [2].

Для изготовления ТМК субмикронного латерального размера на подложке Si/SiO₂/Si₃N₄ методом высоковакуумного магнетронного распыления при комнатной температуре была изготовлена многослойная наноструктура, которая являлась основой для туннельных магниторезистивных (ТМР) элементов Ta(20 нм)/Pt(10 нм)/Ta(20 нм)/IrMn(10 нм)/CoFeB(4 нм)/MgO(1.5 нм)/CoFeB(2.5 нм)/ Ta(3 нм)/Pt(10 нм). Затем на поверхность структуры были нанесены два электронных резиста PMMA и HSQ толщиной 200 нм и 100 нм соответственно. Экспонирование резиста HSQ производилось при помощи сканирующего электронного микроскопа Carl Zeiss SUPRA 50 VP с приставкой для электронно-лучевой литографии Raith ELPHY PLUS. В результате проявления на поверхности структуры была сформирована резистивная маска, представляющая собой массив частиц в форме эллипсов с размерами 200×400 нм. После производилось ионное травление структуры вплоть до нижнего контакта, а затем при помощи магнетронного распыления на образец наносился слой диэлектрика Ta₂O₅, чтобы сформировать электрическую изоляцию между верхним и нижним контактами.

Именно такая технология, включающая в себя использование двухслойной резистивной маски, позволяет решить две главные задачи при изготовлении субмикронных ТМК: латеральное ограничение и формирование диэлектрической изоляции между верхним и нижним контактами.

Высокая разрешающая способность резиста серии HSQ позволяет создавать резистивные маски сложной формы с малыми латеральными размерами, а его устойчивость к ионному травлению позволяет защитить слой резиста PMMA, играющего ключевую роль в последующем процессе взрывной литографии диэлектрического изолирующего слоя.

Заключительным этапом стало проведение измерения кривой магнетосопротивления изготовленных ТМК. Показано, что в контактах эллиптической формы с размерами большой и малой осей 200 и 400 нм, соответственно, фронт перемagnичивания свободного слоя составляет от 2 до 10 Э.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 21-12-00271).

Литература

1. Пашенькин И. Ю., Сапожников М. В., Гусев Н. С., Rogov В. В., Татарский Д. А., Фраерман А. А., Волочаев М. Н., Письма в ЖЭТФ 111, 815 (2020)
2. Брюэр Дж. Р., Гринич Д. С., Херриот Д. Р. и др. Электронно-лучевая технология в изготовлении микроэлектронных приборов. — М. : Радио и связь, 1984. — 336 с.

«УМНЫЙ НАНОСКАЛЬПЕЛЬ» ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ГЛИАЛЬНЫХ ОПУХОЛЕЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА

**В. Д. Федотовская^{1,2}, Т. Н. Замай^{1,2}, Н. А. Лузан¹,
А. А. Кошманова¹, А. С. Кичкайло^{1,2}**

¹*Красноярский государственный медицинский университет
им. проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого, г. Красноярск, Россия*

²*Красноярский научный центр СО РАН, г. Красноярск, Россия
e-mail: viktorii.fedotovskaia@gmail.com, тел.: 8 (996) 4277494*

Злокачественные новообразования являются одной из самых распространенных причин смертности населения [1]. На данный момент главными методами удаления опухолей являются их хирургическое удаление, лучевая терапия. Опасность их использования заключается в том, что при лечении повреждаются не только опухоль, но и окружающие ее здоровые ткани. Даже низкие дозы ионизирующего излучения могут вызывать различные побочные эффекты [2]. Эта опасность особенно возрастает при лечении опухолей головного мозга. Радикальная резекция опухолей невозможна, так как единичные опухолевые клетки невидимы. В среднем во время операции удаляется максимум 92 % опухоли. Оставшиеся клетки могут стать очагами роста опухоли и причиной рецидива заболевания,

тем более они легко трансформируются под действием низкой дозы ионизирующего излучения на периферии. Поэтому возникает необходимость в разработке инструментов, удаляющих отдельные клетки и их небольшие скопления. В данной работе это было достигнуто с помощью «умного наноскальпеля» — магнитных нанодисков, которые в переменном магнитном поле способны механически повреждать отдельные клетки опухоли и приводить к их гибели. Ранее было показано, что магнитные нанодиски в переменном магнитном поле способны повреждать клетки жидкой опухоли (асцитной карциномы Эрлиха) у мышей [3].

Селективность разрушения клеток глиобластомы была показана на первичных культурах в экспериментах *in vitro*. В качестве *in vivo* модели глиобластомы были использованы аутбредные ICR мыши с лекарственной иммуносупрессией, которым перевивали первичную культуру клеток глиобластомы. Мониторинг роста опухоли проводили с использованием МРТ. В качестве магнитных нанодисков были использованы золото-никелевые нанодиски, имеющие структуру Au/Ni/Au. На рисунке 1 показано изображение дисков, полученное на сканирующем электронном микроскопе Hitachi SU3500. Нанодиски были получены методом обратной фотолитографии в цехе нанoeлектроники АО «НПП «Радиосвязь». Для достижения специфичности действия нанодиски были модифицированы аптамером, специфичным к глиобластоме. Для этого тиолированный аптамер Gli-233 инкубировали с дисками в течении суток при температуре 4°C в 500 нМ растворе аптамеров.

Хирургическую операцию и терапию нанодисками проводили на 23 день после трансплантации опухоли. Для этого на открытую опухоль наносили 20 мкл фосфатного буфера, содержащего 100 млн нанодисков, функционализированных аптамерами. Через 10 минут мышь помещали в электромагнитную катушку с переменным магнитным полем на 10 минут со следующими параметрами поля: форма сигнала — синус, частота магнитного поля 20 Гц, напряженность магнитного поля 200 Э. Для проверки эффективности конъюгата нанодисков с аптамером исследовали 3 группы мышей:

1. Мыши, подвергавшиеся магнитомеханической терапии нанодисками, модифицированными тиоловым аптамером Gli-233;
2. Мыши, подвергавшиеся магнитомеханической терапии нанодисками, модифицированными неспецифическим праймером;
3. Мыши без лечения.

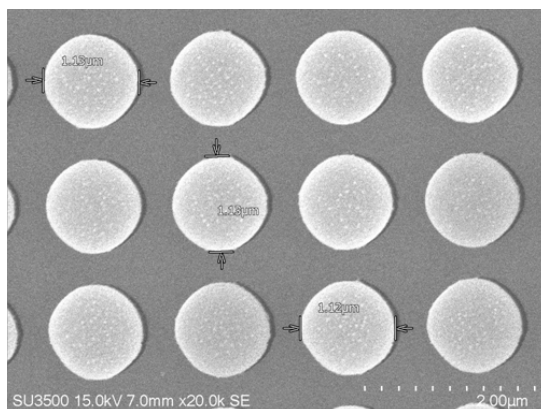


Рис. 1. Изображение магнитных нанодисков, полученных на сканирующем электронном микроскопе Hitachi SU3500

Для проверки эффективности препарата через несколько дней после терапии мышам проводили МРТ головного мозга. Никелевые магнитные нанодиски, модифицированные тиоловым аптамером Gli-233, в условиях воздействия переменного магнитного поля вызывали повреждение клеток глиобластомы у мышей. Количество клеток в опухоли, в которую были введены модифицированные магнитные нанодиски значительно снижалось. Деструкция клеток в опухоли происходила путем некроза.

Таким образом, показано, что магнитные нанодиски могут быть использованы для терапии опухоли и являются перспективным методом лечения глиобластом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Краевого государственного автономного учреждения «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности», Конкурс научно-технических и инновационных проектов в интересах первого климатического научно-образовательного центра мирового уровня «Енисейская Сибирь». Грант «Разработка на базе ОА «НПП «Радиосвязь» технологий производства и контроля качества магнитных нанодисков, препаратов и аппаратно-программных средств магнитомеханической микрохирургии глиальных опухолей головного мозга» №: 2023091509841 и при поддержке компании-партнера АО «НПП «Радиосвязь».

Литература

1. *Ferlay J. et al.* Cancer incidence and mortality patterns in Europe: Estimates for 40 countries and 25 major cancers in 2018 // *European journal of cancer*. — 2018. — Т. 103. — С. 356—387.
2. *Barnett G. C. et al.* Normal tissue reactions to radiotherapy: towards tailoring treatment dose by genotype // *Nature Reviews Cancer*. — 2009. — Т. 9. № 2. — С. 134—142.
3. *Zamay T. et al.* Magnetic Nanoscalpel for the Effective Treatment of Ascites Tumors // *Journal of Functional Biomaterials*. — 2023. — Т. 14. № 4. — С. 179.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ НА ОСНОВЕ MnBi_2Te_4 : ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА

А. С. Фролов¹

¹*Центр перспективных методов мезофизики и нанотехнологий,
Московский физико-технический институт,
Долгопрудный, Россия
e-mail: alexander_s_frolov@mail.ru, тел.: 8 (996) 9613491*

Открытие топологических фазовых переходов положило начало одному из наиболее плодотворно развивающихся направлений современной физики твердого тела. Одним из наиболее изученных классов материалов с нетривиальной топологией электронных состояний являются топологические изоляторы (ТИ), которые в объеме представляют собой узкозонный полупроводник с $E_g \sim 0,05\text{—}0,4$ эВ, а на гетерогранице с тривиальным диэлектриком имеют бесщелевые электронные состояния. В последнее время магнитные топологические изоляторы (МТИ) стали объектом значительного научного интереса. Наиболее интенсивно изученными МТИ являются MnBi_2Te_4 [1] (так называемая 124-фаза) — слоистое соединение, состоящее из семислойных пакетов (СЛ) с идеализированной последовательностью слоев $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, а также его соединения — гомологи MnBi_4Te_7 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ и т. д.

Потенциальное практическое применение MnBi_2Te_4 ограничено наличием только небольших кристаллов из-за препаративных проблем, связанных с их ограниченной термодинамической стабильностью [2]. Решётку MnBi_2Te_4 можно стабилизировать путём замещения атомов марганца на атомы 14 группы (Ge, Sn, Pb), что в предельном случае замещения при-

водит к стабильным изоструктурным соединениям, таким как GeBi_2Te_4 , SnBi_2Te_4 , PbBi_2Te_4 , которые, в свою очередь, также представляют собой ТИ [3—5].

В докладе представлены результаты изучения электронной и атомной структуры топологических изоляторов на основе MnBi_2Te_4 с применением комплекса экспериментальных и теоретических методов, таких как фотоэлектронная спектроскопия, сканирующая туннельная микроскопия, теория функционала электронной плотности и др.

Работа выполнена при поддержке РНФ 22-72-10074.

Литература

1. *Otrokov M. M. et al. Nature. 2019. 576, 416—422.*
2. *Zeugner A. et al. Chem Mater. 2019. 31, 2795—2806.*
3. *Okamoto K. et al. Phys Rev B. 2012. 86, 195304.*
4. *Fragkos S. et al. Phys Rev Mater. 2021. 5, 014203.*
5. *Kuroda K. et al. Phys Rev Lett. 2011. 108, 206803.*

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ И ГИДРОФИЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ ПОЛИМЕРА ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТ-ГЛИКОЛЯ С РАЗЛИЧНЫМИ РИСУНКАМИ 3D-ПЕЧАТИ

**А. С. Леньшин¹, В. Е. Фролова¹, С. А. Ивков¹,
Э. П. Домашевская¹**

*¹Воронежский Государственный Университет,
Университетская пл., 1, Воронеж, Россия
e-mail: ternovaya@phys.vsu.ru, тел.: 8 (951) 8715347*

Результаты исследования влияния процесса 3D-печати путем последовательного наложения слоев полимера способом FDM (Fused Deposition Modeling) на 3D-принтере Hercules Original при температуре экструдера 260°C и мощности 500 Вт на микроструктурные свойства и смачивание поверхности образцов полиэтилентерефталат-гликоля (PETG) с различными модельными рисунками (1_Hilbert, 2_Concentric, 3_Archimedian, 4_Rectilinear, 5_Octogram) методами РФА, ИК-спектроскопии и измерения краевого угла смачивания, показали, что отличия дифрактограмм (Рис. 1) напечатанных образцов от дифрактограммы исходной нити PETG

обусловлены большей упорядоченностью полимерных цепей аморфного PETG в напечатанных образцах, которая происходит при тепловом и механическом воздействиях на исходный нитевидный образец в процессе 3D-печати и проявляется в увеличении на порядок относительной интенсивности главного дифракционного максимума аморфного полимера PETG в напечатанных образцах.

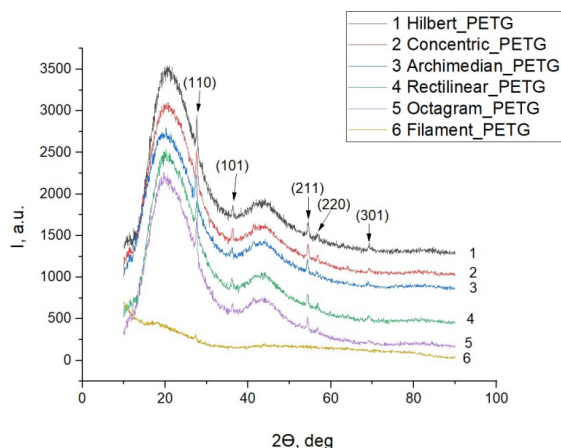


Рис. 1. Дифрактограммы образцов с модельными рисунками
1_Hilbert, 2_Concentric, 3_Archimedian, 4_Rectilinear, 5_Octogram и исходной
нити для 3D-печати (Filament)

При этом, внутримолекулярные химические связи полимера PETG не подвержены этим воздействиям в процессе 3D-печати, и поэтому волновые числа и относительные интенсивности мод колебаний ИК-спектров всех пяти напечатанных образцов с различными рисунками имеют практически одинаковые значения и совпадают в пределах точности измерения с соответствующими значениями основных мод исходной нити PETG (Рис. 2).

Ближние значения краевых углов смачивания у всех напечатанных образцов к величине $\theta \approx 50^\circ$ (Рис.3), значительно меньшей прямого угла $\theta = 90^\circ$, показывают, что поверхности всех напечатанных образцов PETG с различными рисунками являются гидрофильными.

Таким образом, по результатам нашего исследования PETG зарекомендовал себя как материал, подходящий для 3D- печати с помощью пространственной модели принтера.

При этом, 3D-печать вызывает статистически значимую ориентацию полимерных цепей в аморфном материале PETG, одинаковую для всех пяти рисунков в результате молекулярного выравнивания, вызванного экструзией, без разрушения внутримолекулярных химических связей полимера.

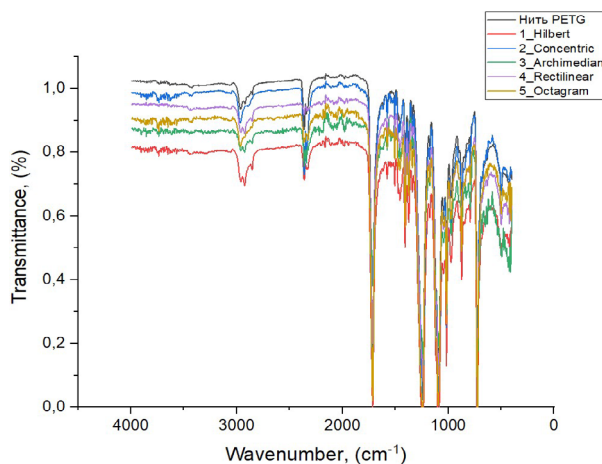


Рис. 2. ИК-спектры пропускания для исходного образца нити PETG и пяти образцов с различными модельными рисунками 3D-печати из полимера PETG



Рис. 3. Изображение капли в процессе определения краевого угла смачивания поверхности напечатанного образца с модельным рисунком 5_Octogram из полимера PETG

Работа поддержана Минобрнауки РФ частично в рамках госзадания для университетов в области научной деятельности, проект № ФЗГУ-2023-006, и Соглашения № 075-15-2021-1351 в части РФА исследований.

МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ EXAFS-СПЕКТРА BaTiO_3 , СОДЕРЖАЩЕГО ПЕРЕКРЫТИЕ СИГНАЛОВ Ti K

Э. Ф. Хаметова¹, О. Р. Бакиева¹

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,

Ижевск, Россия

e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com, тел.: 8 (965) 5852592

С развитием новых направлений, например, таких как мемристивные технологии, существует необходимость в создании и исследовании новых материалов с заданными свойствами. Мемристор — это микроэлектронный компонент, способный изменять своё сопротивление в зависимости от протекавшего через него заряда. Главной особенностью, которая отличает мемристор от других элементов электрической цепи, является сохранение своих свойств в виде заряда. Для получения высоких функциональных свойств (резистивное переключение, высокая стабильность, износостойкость, длительное время выдержки, хорошее соотношение тока включения/выключения) требуется детальное знание о локальной координации атомов. Классическим методом определения параметров локальной атомной структуры является EXAFS спектроскопия. Данный метод основан на анализе протяженной тонкой структуры, наблюдаемой в рентгеновских спектрах поглощения. Регистрируется сигнал поглощения внутренних уровней возбуждаемого атома и тонкая осциллирующая структура обусловленная рассеянием фотоэлектрона на ближайшем окружении. Анализ экспериментального сигнала позволяет определять длины химической связи, координационные числа и параметры тепловой дисперсии атомов. Данным методом можно исследовать материалы в энергетическом диапазоне 5—30 кэВ (станция EXAFS на синхротроне «КИСИ-Курчатов»), от 4 (начиная с Ti) до 32 кэВ (станция EXAFS спектроскопии «Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового Излучения»). Проблема при анализе таких спектров может возникнуть, если в одном энергетическом диапазоне регистрируются сигналы поглощения нескольких атомов разной химической сортности. Примером может служить титанат бария (BaTiO_3), сегнетоэлектрический эффект которого используют для создания мемристивной структуры [1]. Доменные конфигурации демонстрируют в сегнетоэлектрических туннельных барьерах мемристивные свойства. На спектре титаната бария наблюдается перекрытие Ti K (4965 эВ), Ba L3 (5247 эВ) и Ba L2 (5624 эВ).

В настоящей работе рассматривается возможность анализа EXAFS спектра являющегося суперпозицией двух разных волновых чисел. Проведены модельные расчеты спектра BaTiO_3 в диапазоне энергий 4961—7150 эВ, содержащих сигнал поглощения Ti K, Ba L_3 и Ba L_2 .

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части развития лабораторных и синхротронных методик получения данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и их обработки.

Литература

1. Chanthbouala A et al. Solid-state memories using ferroelectric tunnel junctions // Nature Nanotech. 2012. N. 7. pp. 101—104.

РАСЧЕТНЫЕ И ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ ГИБРИДНЫХ ФЕРМЕНТНЫХ ПРЕПАРАТОВ

М. Г. Холявка, В. Г. Артюхов

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: holyavka@rambler.ru, тел.: 8 (473) 2208586*

По причине высокой востребованности ферментных препаратов в различных отраслях необходимо совершенствовать методы регуляции их активности и разрабатывать новые, в том числе гибридные, биокатализаторы [1]. По сравнению с их растворимыми формами иммобилизованные препараты имеют более высокую стабильность, предоставляют возможность удаления биокатализатора из реакционной среды для его повторного использования и/или остановки реакции в любой момент времени [2, 3]. Подробное изучение пространственной структуры белковых молекул в условиях различного микроокружения является ключом к пониманию особенностей их функционирования [4] и проектирования новых препаратов для промышленности [5].

Целью нашей работы является изучение структурно-функциональных, физико-химических и кинетических свойств гомогенных и гетерогенных (гибридных или композитных) биокатализаторов на основе гидролитических ферментов, закономерностей формирования ферментом надмолекулярных комплексов в условиях различного микроокружения,

определение типов взаимодействий между белковой глобулой и матрицами ряда синтетических и природных полимеров.

Для изучения надмолекулярной организации ферментов в условиях различного микроокружения нами был предложен и широко апробирован комплексный подход, заключающийся в сочетании атомно-силовой микроскопии и динамического светорассеяния с методами инфракрасной спектроскопии, гель-хроматографии и электрофореза [6]. Разработан алгоритм для составления быстрых прогнозов относительно пределов колебаний физико-химических и кинетических характеристик молекул ферментов и экспресс-оценки их динамического состояния. Выявлены структурно-функциональные особенности инулиназы, фицина, папаина, бромелина, трипсина и коллагеназы в условиях различного микроокружения (иммобилизация на полимерных носителях, действие УФ-облучения, варьирование величин pH, температуры, концентрации субстрата). Выполнен виртуальный скрининг лигандов для иммобилизации названных выше ферментов. Определены вероятные сайты связывания полимерных матриц с молекулой белка [7]. Разработан алгоритм для выявления молекулярного механизма образования комплексов гидролитических ферментов с полимерными матрицами с использованием методов последовательного (каскадного) докинга и ИК-спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект 21-74-20053).

Литература

1. Kholiyavka M. G., Kayumov A. R., Baydamshina D. R., Koroleva V. A., Trizna E. Yu., Trushin M. V., International Journal of Biological Macromolecules, 2018, V. 115, pp. 829—834.
2. Ковалева Т. А., Холявка М. Г., Таха А. С., Сорбционные и хроматографические процессы, 2007, V. 7, No 5, pp. 804—810.
3. Холявка М. Г., Наквасина М. А., Артюхов В. Г. Практикум по биотехнологии: иммобилизованные биологические объекты в системе лабораторных работ: учебное пособие, Воронеж, 2017.
4. Kholiyavka M. G., Artyukhov V. G., Kovaleva T. A., Biocatalysis and Biotransformation, 2016, V. 34, No 1, pp. 1—17.
5. Ковалева Т. А., Холявка М. Г., Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии, 2011, № 1, С. 3—7.
6. Артюхов В. Г., Ковалева Т. А., Холявка М. Г., Битюцкая Л. А., Гречкина М. В., Образцова Т. Б., Биофизика, 2009, Т. 54, № 6, С. 1005—1011.

7. Holyavka M. G., Artyukhov V. G., Kondratyev M. S., Samchenko A. A., Kabanov A. V., Komarov V. M., Computers in Biology and Medicine, 2016, V. 71, pp. 198—204.

**НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
АССОЦИАТОВ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК
PbS/TGA И НАНОСТЕРЖНЕЙ ЗОЛОТА Au NRs**

**Т. А. Чевычелова, А. И. Звягин, М. С. Смирнов,
О. В. Овчинников**

Воронежский государственный университет,

Российская Федерация, Воронеж

**E-mail: t.chevychelova@rambler.ru*

В последнее время наблюдается высокий интерес к исследованиям нелинейно-оптических свойств и размерного эффекта для полупроводниковых квантовых точек (КТ). Имеющиеся в настоящее время закономерности не составляют полной картины фотофизических процессов конкретных образцов КТ. Тем более, не определены механизмы возникновения нелинейностей в ассоциатах КТ с наночастицами металлов.

В данной работе рассмотрен нелинейно-оптический отклик гидрофильных коллоидных квантовых точек PbS/TGA средним размером 3.5 нм в ассоциации с наностержнями золота Au NRs на длине волны 532 нм с длительностью лазерных импульсов 10 нс с помощью методики Z-сканирования [1]. Исследования также проводили абсорбционными и люминесцентными методами.

Настройка резонансов в поглощении КТ и экстинкции НЧ достигалась в гибридной наноструктуре на основе КТ PbS и золотых наностержней. Использовались золотые наностержней средним размером 4x25 нм с пиком продольного резонанса на длине волны 915 нм (рис. 1а). Спектры оптического поглощения исследуемых КТ PbS/ TGA представляли собой широкие полосы с характерной особенностью в поглощении (экситонный пик) на длине волны 913 нм (рис. 1а). Спектр люминесценции КТ PbS/TGA имел пик в районе 1100 нм и полуширину порядка 200 нм. Точная настройка резонансов в поглощении КТ PbS/TGA и экстинкции наностержней золота с пиком продольного резонанса, позволила наблюдать тушение люминесценции КТ в 3 раза и ускорение времени жизни люминесценции в 2.5 раза.

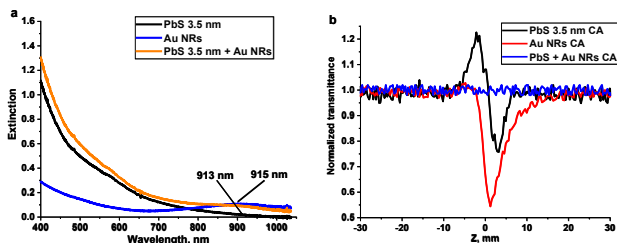


Рис. 1. Спектры поглощения (а) и Z-сканы исследуемых образцов (b)

Энергия зондирующих импульсов в данном эксперименте составляла 0.16 мДж (рис. 1b). КТ PbS/TGA и Au NRs демонстрируют рефракцию отрицательного знака в то время, как их коллоидный ассоциат данную рефракцию утрачивает и демонстрирует отсутствие нелинейно-оптического отклика. Данный результат подтверждает возможность настройки нелинейно-оптических свойств гибридной наносистемы за счет управления переносом заряда, что подтверждается тушением люминесценции КТ и ускорением кинетики люминесценции.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-22-00842, <https://rscf.ru/project/22-22-00842/>.

Литература

1. M. Sheik-Bahae, A. A. Said, T. H. Wei, D. J. Hagan, E. W. Van Stryland, IEEE J. Quantum Electron., 1990, 26(4), 760—769.

ОЦЕНКА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ БЕЛКА DPS МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО СВЕТОРАССЕИВАНИЯ

И. Л. Черниговский, М. С. Скоробогатов, С. С. Антипов

ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1

e-mail: igorcher56@gmail.com, тел.: 8 (960) 117-63-54

Белок Dps не только играет главную роль в поддержании конформации ДНК на стационарной фазе роста, но и выполняет еще несколько важных функций. Одной из них является способность окислять токсич-

ные для клетки ионы двухвалентного железа с использованием пероксида водорода. Как правило, эту функцию у высших организмов выполняют специальные белки — ферритины: FtnA, Bfr и Dps. Белки FtnA и Bfr структурно гомологичны ферритинам высших организмов, в то время как Dps имеет ряд значимых отличий. Он состоит из 12 идентичных субъединиц с молекулярной массой 18,712 кДа формирующих полость внутри белковой глобулы. В этой полости происходит накопление ионов железа как в виде двух-, так и в виде трехвалентных соединений железа [1,2], формирующих неорганическое ядро [3]. Белок Dps является природной наночастицей, способной накапливать ионы двухвалентного и трехвалентного железа. Dps способен прикрепляться к ДНК используя гибкие неструктурированные N-концевые участки, содержащие 3 аминокислотных остатка положительно заряженного лизина. Таким образом формируются нуклеопротеидные комплексы. При исследовании локализации белка Dps были получены данные о его возможной мембранной локализации. Так как основной его функцией является образование комплекса с ДНК в бактериальной клетке, значение его мембранной локализации пока не установлено. Для дальнейшего изучения этого вопроса, с перспективой открытия новых функций Dps был получен рекомбинантный образец белка, который затем был исследован на возможность образования комплексов с липидными структурами. Оценку связывания проводили при помощи метода динамического рассеивания света и электрофоретического фракционирования.

Сохранение функциональной активности белка определяли, оценивая его способность формировать комплексы с липосомами. Для оценки методом динамического рассеивания света белок смешивали с липосомами в соотношении 1:2 в кювете с натрий-фосфатным буфером, и проводили ряд измерений с интервалом в 1 минуту, общей длительностью в 60 минут, в период инкубации при 25°C. Полученный максимум соответствует диаметру комплекса размером в 206 нм и предполагает новый тип функциональной активности, связанной с мембранной локализацией белка Dps. В качестве контроля использовали раствор бычьего сывороточного альбумина с аналогичной концентрацией. Было зарегистрировано несколько максимумов, что свидетельствует об образовании переходных форм белок-липидных комплексов в процессе инкубации. Это позволяет сделать вывод о более низком сродстве Dps к липосомам, по сравнению с таковым у БСА.

Способность полученного рекомбинантного белка была оценена методом электрофоретического фракционирования в 10 % полиакриламидном

геле. Полученные результаты свидетельствуют в пользу предположения о более низком сродстве Dps к липосомам, что согласуется с результатами, полученными методом динамического светорассеивания, но предполагают возможность его мембранной локализации.

Литература

1. Турищев С. Ю., Антипов С. С., Новолокина Н. В. и др., Биофизика, 2016, 61(5), 837—843
2. Antipov Sergey, Turishchev Sergey, Purtov Yuriy et al., Molecules 2017, 22, 1904
3. Паринаева Е. В., Антипов С. С., Беликов Е. А. и др., Конденсированные среды и межфазные границы, 2022. 24(2), 265—272.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЗОЛОТРИАЗИНОВ

Ю. А. Черных, Д. Ю. Вандышев, С. С. Антипов,
М. А. Наквасина, М. Ю. Крысин

ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1

e-mail: postofficeulia1520@gmail.com, тел.: 8 (900) 944-03-74

Флуоресцентные зонды (ФЗ) являют собой обширный класс органических соединений, широко применяемых в различных научных изысканиях. Они позволяют получать информацию о строении определенных клеток или молекул, их физико-химическом состоянии в норме и при действии различных агентов или патологиях [1]. Флуоресцентные красители используют также в тех случаях, когда существует необходимость в исследовании нефлуоресцирующих или слабо флуоресцирующих веществ.

Многие флуорофоры способны изменять свои флуоресцентные параметры при взаимодействии с биосубстратами. Метод флуоресцентной микроскопии или спектроскопии с применением искусственных красителей позволяет оценивать конформационное состояние белков, физическое состояние мембранных липидов, процессы передачи энергии между молекулами, исследовать молекулярные механизмы возникновения и развития патологических процессов, действие на организм биологически активных веществ и лекарственных препаратов. Однако такие вопросы как специфичность, селективность и, что немало важно, токсичность в отношении к биосистемам при использовании флуоресцентных зон-

дов остаются открытыми. Данные задачи могут быть реализованы в процессе синтеза новых флуоресцентных красителей и изучения их физико-химических свойств. Одними из перспективных являются красители на основе азолотриазинов [2]. Целью данного исследования являлось синтез и исследование физико-химических свойств красителей, представляющие собой линейно связанные и конденсированные производные азолотриазинов, обеспечивающих визуализацию в режиме реального времени и количественный анализ бактерий *in vitro* и/или *in vivo* [9—11]. В связи с этим, нами был синтезирован ряд функционализированных производных имидазо[1,2-*b*][1,2,4]триазинов 1 и пиразоло[5,1-*c*][1,2,4]иазинов 2.

Для использования флуорофоров в биоиспытаниях целесообразно приготовление их водных растворов. Однако, учитывая ограниченную растворимость синтезированных красителей в воде, в начале исследования мы проанализировали возможность использования буферных систем в качестве исходного растворителя. Было установлено, что наиболее оптимальным сольвентом для дальнейших испытаний является 1М раствор Tris-HCl (pH 8.0). При этом, независимо от срока хранения, агрегаты или осадки флуорофоров не образуются.

На следующем этапе исследования физико-химических свойств полученных растворов красителей, нами была проведена регистрация их спектров поглощения в диапазоне длин волн от 190 до 900 нм. Максимумы для флуоресцентного зонда ФЗ-1 локализованы в области 508 нм и 213 нм, максимумы для ФЗ-2 в области 875 нм и 402 нм, ФЗ-3 имеет максимум в области 416 нм, максимумы для ФЗ-4 локализованы в области 896, 818, 632 и 419 нм. ФЗ-5 имеет следующие максимумы: 888, 412 и 221 нм; ФЗ-6 — максимумы 402 нм и 254 нм. Соответственно, зонд ФЗ-7 имеет максимумы в области 864 нм и 400 нм, ФЗ-8 в области 513 и 318 нм, а зонд ФЗ-9 в области 479, 361, и 247 нм.

Полученные данные предполагают различную эффективность при взаимодействии флуорофоров, как с отдельными молекулами белка, так и с бактериальными клетками и, скорее всего, будут обладать различной величиной Стоксова сдвига. Поэтому существует необходимость в продолжении данных исследований с применением высокоточного оборудования и технологического обеспечения.

Литература

1. Trukhan I. S., Tomilin D. N., Dremina N. N. et al., *Molecules*, 2022, 27, 5018
2. Вандышев Д. Ю., Антипов С. С., Крутских А. С. и др., ПИРХТ-2022, 2022, 13—15

3. Huang Y. *et al.*, Chem. Soc. Rev, 2021, 50, 7725—7744
4. Zhou W. *et. al.*, Journal of the Iranian Chemical Society, 2018, 15, 2559—2566

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ CORE-SHELL СИСТЕМ КТ PBS/PBSE

**К. С. Чирков, М. С. Смирнов, О. В. Овчинников,
С. В. Асланов, А. И. Звягин, Т. С. Кондратенко, В. Ю. Хохлов**
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: kirill200598@mail.ru, тел.: +7 (473) 220-87-80

Возможность тонкой настройки ширины запрещённой зоны квантовых точек (КТ) позволяет применять их для создания различных оптоэлектронных устройств фотовольтаики, фотодетекторов, люминесцентных маркеров [1, 2]. Однако на пути их успешного применения в фотоприёмных устройствах имеется несколько принципиальных проблем — одна из которых низкая подвижность носителей заряда. Уменьшение толщины светочувствительного слоя в фотоприёмниках на основе плёнок коллоидных КТ позволяет частично решить проблему эффективного разделения носителей заряда, однако при этом уменьшается эффективность поглощения света. Другим методом решения данной проблемы является формирование гетеросистем, позволяющих производить разделение носителей заряда. С одной стороны, эффективное разделение носителей заряда увеличивает фотоотклик, с другой — блокирует рекомбинацию и, соответственно, сопровождается сильным тушением люминесценции. Последнее время уделяется повышенное внимание к фотодетекторам ближней ИК области спектра на основе КТ, поскольку существующие на сегодняшний день промышленные образцы дороги. Многообещающим материалом для ИК приложений является сульфид свинца (0.41 эВ [3]).

В работе представлены результаты исследования спектрально-люминесцентных свойств коллоидных КТ PbS, пассивированных тиогликолевой кислотой. Образцы синтезированы в рамках методов коллоидной химии. Как ожидалось, КТ PbS покрытые слоем PbSe образуют core-shell систему второго типа. Нарастивание оболочки PbSe сопровождалось ростом оптической плотности по всему спектру поглощения от 400 до 1000 нм. При этом интенсивность люминесценции в области 1100—1200 нм испытывала сильное тушение, достигающее более 2 порядков. Анализ спек-

тров возбуждения, стокового сдвига и кинетики затухания люминесценции позволил заключить, что обнаруженная ИК люминесценция определяется излучательной аннигиляцией экситона и рекомбинацией на структурных дефектах. Сильное тушение позволяет предположить, что нами действительно сформированы core-shell гетеросистемы второго типа с эффективным разделением носителей заряда.

Работа поддержана грантом РФФИ № 22-12-00232.

Литература

1. Ganguly A., Nath S. S. and Choudhury M. IEEE J. Photovolt. 2018, 8(6):1656—1661.
2. Tang J. A. & Sargent E. H. Adv. Mater. 2011, 23:12—29.
3. Scanlon W. W. J. Physics and Chemistry of Solids, 1959, 8:423.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР СУЛЬФИДА ЦИНКА, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПРОЗРАЧНЫХ ПОДЛОЖКАХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ

А. И. Чукавин, Р. Г. Валеев, А. Н. Бельтюков, И. А. Кузьмина

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: chukavni@udman.ru, тел.: 8 (3412) 43-18-94

Полупроводниковые наноструктуры, сформированные на прозрачной в видимой области спектра подложке представляют в настоящее время большой интерес благодаря разнообразию возможностей их применения в оптоэлектронике [1], сенсорики [2], солнечных батареях и др. Среди различных методов получения таких наноструктур необходимо выделить электрохимическое осаждение как относительно простой и вместе с тем универсальный метод получения различных материалов. Однако, в случае осаждения бинарных и более сложных по составу соединений, например, сульфида цинка, возникают принципиальные трудности, связанные со значениями электроотрицательности аниона и катиона, что приводит к различным потенциалам разложения этих элементов при электролизе. Ещё одной из проблем является выбор подложки для осаждения, поскольку подложка должна удовлетворять ряду условий: необходимо, чтобы подложка была инертна к электролиту, также она должна иметь как можно более низкое электрическое сопротивление. Поэтому разработка электро-

химических приёмов синтеза и изучение механизмов осаждения наноструктур ZnS и ZnO представляет как прикладной, так и научный интерес.

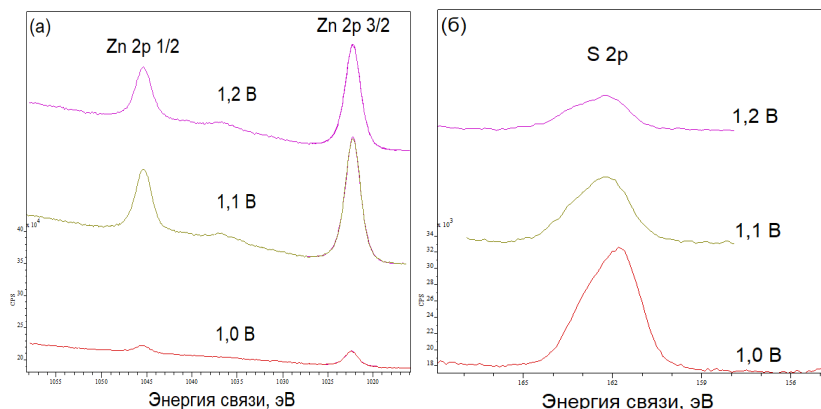


Рис. 1. РФЭС спектры Zn 2p (a) и S 2p (б) для образцов, полученных при различных потенциалах электрохимического осаждения.

В настоящей работе указанные выше наноструктуры были получены методом электрохимического осаждения в трехэлектродной ячейке с хлорсеребряным электродом в качестве электрода сравнения и возможностью нагрева и перемешивания электролита. В качестве подложек (рабочего электрода) использовали стеклянные пластинки с прозрачно-проводящим покрытием из оксида индия, легированного оловом. Для выбора потенциала осаждения электрохимическое поведение ионов цинка и серы, в водных растворах было исследовано с помощью циклической вольтамперометрии, путём осаждения и растворения материала на подложку при комнатной температуре. Исследования методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показали, что наилучшими параметрами осаждения для выращивания тонких пленок ZnS в используемых условиях с точки зрения стехиометрии является осаждение при потенциале $-1,1$ В. На рис. 1 можно видеть, как при более высоких потенциалах образцы становятся обогащены цинком, в то время как понижение потенциала приводит к избытку серы. При помощи атомно-силовой микроскопии показано, что для образцов, полученных при указанном катодном потенциале, наблюдается более однородный размер частиц-зерен, при этом они упакованы более плотно, чем при более высоких или низких потенциалах. Средний размер зерен составляет порядка 10 нм.

Также было выявлено, что большое значение имеет и последующая обработка полученных образцов. Так, рентгеноструктурный анализ показал, что отжиг образцов ZnS в токе Ar позволяет достигнуть лучшей кристалличности. На дифрактограммах появляется рефлекс, соответствующий кубической фазе сульфида цинка типа сфалерит. Кроме того, повышается коэффициент пропускания структур, что, вероятно связано с завершением реакции оставшихся несвязанными при электроосаждении цинка и серы. Полученные структуры на основе сульфида цинка могут быть использованы при разработке оптоэлектронных устройств ультрафиолетового и видимого диапазона.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части развития лабораторных и синхротронных методик получения данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и их обработки.

Литература

1. Bao, R., Wang, C., Peng, Z., Ma, C., Dong, L., & Pan, C. Light-emission enhancement in a flexible and size-controllable ZnO nanowire/organic light-emitting diode array by the piezotronic effect. *Acs Photonics*, 2017, 4(6), 1344—1349.
2. Xiong, Y., Fang, M., Zhang, Q., Liu, W., Liu, X., Ma, L., & Xu, X. Reproducible and arbitrary patterning of transparent ZnO nanorod arrays for optic and biomedical device integration. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 898, 163003.

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДОВ IN-SITU И OPERANDO ИССЛЕДОВАНИЙ НА СТАНЦИИ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ «НАНОФЭС»

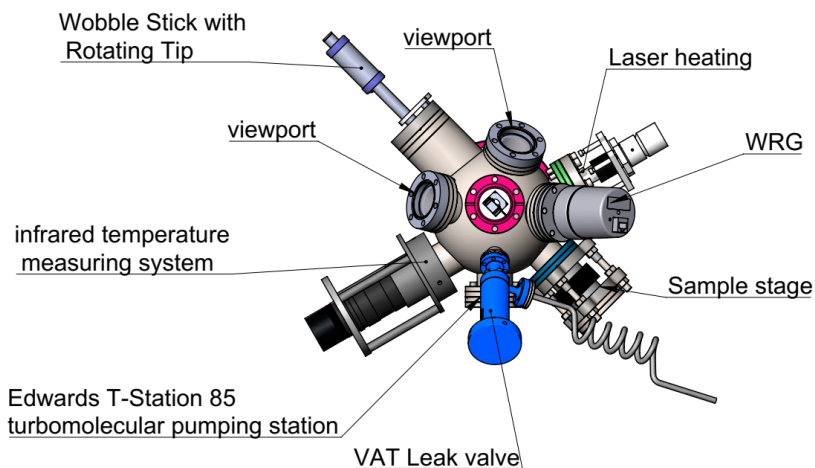
Р. Г. Чумаков¹, А. М. Лебедев¹, В. Г. Назин¹, В. Г. Станкевич¹

¹НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва, Россия
e-mail: ratibor.chumakov@gmail.com, тел.: 8 (985) 9143642

Фотоэлектронная и мягкая рентгеновская спектроскопия зарекомендовали себя, как простой и надежный способ изучения физико-химических свойств поверхностей для решения задач материаловедения, физики твердого тела, физики поверхности, спинтроники, наносистем, органиче-

ской, неорганической, каталитической химии, и многих других. В Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований реализована экспериментальная синхротронная станция «НаноФЭС» [1] [2], специализирующаяся на спектроскопических исследованиях образцов. Станция работает в диапазоне энергий фотонов от 25 до 1500 эВ и предназначена для решения широкого круга задач спектроскопическими и зондовыми методами.

С целью развития экспериментальных возможностей станции «НаноФЭС» были спроектированы сверхвысоковакуумные модули и устройства позволяющие проводить *in-situ* и *operando* исследования. Для реализации *in-situ* исследований в вакуумный объем станции был имплементирован узел для бесконтактного лазерного нагрева образцов с пирометрическим контролем температуры. Данный модуль позволяет проводить нагрев образцов по программируемому циклу при одновременном напуске реакционных газов (вплоть до атмосферных давлений). Система для проведения *operando* исследования позволяет подавать на образец до 4 независимых электрических сигналов непосредственно в момент проведения измерений. Кроме того, для увеличения информативности спектров поглощения от углубленных слоев в исследуемом образце система детектирования станции расширена рентгеноэмиссионным детектором.



Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

Литература

1. Chumakov R., Menshikov K., Lebedev A., et al., Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv., 2017, 73, 567.
2. Лебедев А. М., Меньшиков К. А., Назин В. Г., Станкевич В. Г., Цетлин М. Б., Чумаков Р. Г., Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования, 2021, 10, 44.

ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОЛИДОФАМИН/НАНО ГИДРОКСИАПАТИТ

Д. Л. Голощапов, К. В. Шапиро, Д. Н. Нестеров,
В. М. Кашкаров, Х. С. Шихалиев, А. Ю. Потапов,
П. В. Середин

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
kirill.shapiro@mail.ru

Исследования последних лет показали важность условий формирования новых минерализованных слоев в присутствии органической матрицы на поверхности эмали и дентина зубов человека для получения защитных покрытий, совпадающих по физико-химическим характеристикам с биологическими твердыми тканями человека.

В нашей работе ускоренное осаждение плёнок полидофамина с последующими процедурами минерализации покрытий с использованием нестехиометрического нано-кГАП проводили в несколько этапов с при различном времени осаждении и толщине покрытия. Для контроля технологии в качестве подложек использовались как срезы боковой поверхности эмали зубов, так и полированные пластины монокристаллического кремния КЭФ (111).

Для проведения полимеризации полидофамина использовалась методика, позволяющая получать как тонкие так и толстые слои за короткий промежуток времени [1]. К достоинству методики следует отнести равномерность и однородность осаждаемых покрытий и высокую скорость осаджений ~ 43 нм/ч [1]. Для получения плёнки полидофамина использовали растворы ТРИС (рН = 8,7.) с концентрацией гидрохлорида дофамина 2 мг/мл. Для ускоренной полимеризации при формировании каждой плёнки полидофамина в растворе при постоянной скорости перемешивания 200 об/мин добавляли 5 mM раствора $\text{CuSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и одновременно 20 mM H_2O_2 .

Для получения нанокристаллического карбонат-замещенного гидроксипатита с формой кристаллов схожей с нанокристаллами апатита эмали в работе использовалась методика жидкофазного осаждения из раствора [2].

Полученный нанокристаллический гидроксипатит добавляли в ТРИС ($\text{pH} = 8,7$) для получения взвеси с концентрацией 0,25 мг/мл непосредственно перед проведением процедуры минерализации подложки. Выбранная концентрация подбиралась для предотвращения ускоренно агломерации нано-кГАП в растворе. Полученная взвесь подвергалась пятикратной обработке в ультразвуке (Qsonica ultrasonic homogenizer (LLC, CT, USA), 55W) в течение 1 минуты с паузами по 5 минут, чтобы не допускать перегрева раствора.

Исследования были проведены с использованием Рамановской микроспектроскопии. Спектры были получены с использованием конфокального рамановского микроскопа РамМикс 532 (EnSpectr, Москва, Россия) с длиной волны возбуждающего излучения 532 нм. Сканирование осуществлялось с использованием 60х объектива. Мощность в фокусном пятне 30 мВт. Спектры детектировались в диапазоне $100\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ и спектральным разрешением 1 см^{-1} . Исследования морфологии полученных плёнок проводили на атомносиловом микроскопе Femtoscan-001 NT MDT.

С использованием Рамановской микроспектроскопии мы однозначно подтвердили образование плёнок полидофамина по ускоренной технологии. В области от 1200 см^{-1} до 1700 см^{-1} зарегистрированы широкие характерные полосы, которые обычно присутствуют в пленках на основе полидофамина. Так перекрывающиеся максимумы около $1336\text{--}1382\text{ см}^{-1}$ ассоциированы со колебаниями индолового комплекса и C-N связей, а мода около 1582 см^{-1} - C = C и деформационными колебаниями катехоловых групп [3]. Следует отметить, что послойное осаждение PDA приводит к увеличению интенсивности мод, ассоциированных с молекулярными группами полидофамина.

на АСМ изображениях под крупными агломератами/частицами хорошо различимо формирование характерной для слоя PDA слоистой структуры [4, 5]. Сформированные на основе PDA покрытия всегда содержат внизу слоистую структуру (Рисунок 1, слева), образованную квазиплоскими кластерами, а также крупные агрегаты PDA на поверхности, что находится в согласии с ранее опубликованными данными ().

В случае минерализации PDA пленки с использованием папо-сНар (Рисунок 1, справа) нижний подслой образован неомогенным распределением крупных квазиплоских агломератов, а в верхнем подслое наблюдается формирование неоднородностей до полумикронного размера.

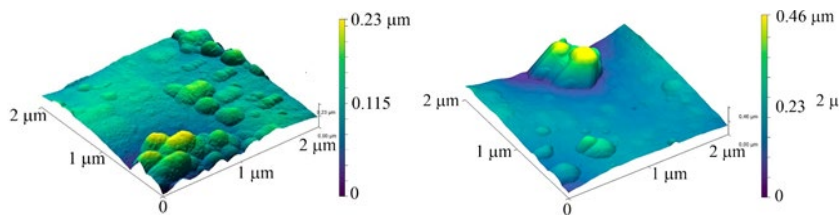


Рис. 1. *АСМ изображения участков поверхности $2 \times 2 \mu^2$ образцов — слева после нанесения на пластину кристаллического кремния одного трёх слоёв полидофамина, справа слой на основе PDA, минерализованный с использованием папо-сНАр*

Сравнительный анализ данных показывает, что осаждение плёнок в присутствии нанокристаллического гидроксиапатита приводит к образованию органоминеральных слоёв субмикронной толщины, что позволяет использовать данные композиционные плёнки для получения биомиметических композитов для восстановления эмали/дентина зубов человека.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-75-10005).

Литература

1. Zhang C. et al. CuSO₄/H₂O₂-Induced Rapid Deposition of Polydopamine Coatings with High Uniformity and Enhanced Stability // Angew. Chem. Int. Ed. 2016. Vol. 55, № 9. P. 3054—3057.
2. Goloshchapov D. L. et al. Importance of defect nanocrystalline calcium hydroxyapatite characteristics for developing the dental biomimetic composites // Results Phys. 2019. Vol. 13. P. 102158.
3. Felfel R. M. et al. Water resistant fibre/matrix interface in a degradable composite: Synergistic effects of heat treatment and polydopamine coating // Compos. Part Appl. Sci. Manuf. 2021. Vol. 146. P. 106415.
4. Coy E. et al. Polydopamine Films with 2D-like Layered Structure and High Mechanical Resilience // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2021. Vol. 13, № 19. P. 23113—23120.
5. Zhou P. et al. Rapidly-Deposited Polydopamine Coating via High Temperature and Vigorous Stirring: Formation, Characterization and Biofunctional Evaluation // PLOS ONE. Public Library of Science, 2014. Vol. 9, № 11. P. e113087.

ИЗМЕНЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА СИСТЕМ Si:Co ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ОТЖИГЕ

**Н. С. Широких¹, Д. Е. Николичев¹, Р. Н. Крюков¹,
М. В. Дорохин²**

¹ННГУ им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²НИФТИ ННГУ им. Н. И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

e-mail: shirokikhnikita1@yandex.ru, тел.: 8 (912) 3341746

Силицид кобальта применяется в микроэлектронике для создания контактных слоев, металлизации стока/истока транзисторов, а также, используется в производстве термоэлектрических устройств. Термоэлектрические преобразователи считаются перспективным альтернативным источником энергии. Основной задачей технологии создания полупроводниковых термоэлектриков является разработка материалов, для которых КПД преобразования достаточно высок для конкуренции с другими источниками энергии [1].

В работе проведено исследование элементного и химического состава образца Si:Co до и после быстрого термического отжига (БТО) в атмосфере аргона. Исследуемый образец представлял собой пластину кремния (100) марки КЭФ-3000, которая была подвергнута имплантации ионов кобальта с различными дозами, а затем — термическому отжигу при температуре 1000 °С и длительности 15, 60 и 300 сек. Исследование проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии совместно с профилированием ионами аргона в системе Omicron Multiprobe RM, способной обеспечивать вакуум до 10^{-10} Торр в процессе записи спектра. Энергия ионов Ar^+ , используемая для послойного анализа, составляла 1 кэВ при угле относительно плоскости образца 45°. Определение положения и идентификация спектральных линий производилась с помощью атласов и литературных данных для выбранных фотоэлектронных-линий [2]. Анализировались фотоэлектронные линии Si 2s, Co 2p^{3/2}, O 1s и C 1s.

Профиль распределения концентрации элементов и концентрации химических состояний показывает, что в результате ионной имплантации кобальт внедряется в кремний на глубину около 100—150 нм в максимуме распределения. Его максимальная концентрация составила около 30 ат. %. В результате отжига профиль имплантированного кобальта размывается, за счет термостимулированной диффузии. Глубина

залегания кобальта в образце, не прошедшего отжиг, в 2 раза меньше, чем у образца, прошедшего БТО длительностью 60 секунд. В результате отжига длительностью 300 секунд кобальт проникает до глубины 750 нм. При этом концентрация кобальта в максимуме распределения уменьшается более чем в 3 раза, относительно неотожжённого образца. БТО уменьшает концентрацию химической связи Co-Si относительно концентрации связи Co-Co. Термический отжиг приводит к уменьшению количества структурных дефектов и сокращению количества эффективно встроившихся атомов Co. Общая концентрация кобальта остается постоянной без и при отжиге, что говорит только о перераспределении примеси в имплантированном слое. Расчёт профилей распределения ионов кобальта в кремнии методом Монте-Карло, показал совпадение формы расчетного и экспериментального профилей. Несовпадение заключается лишь в глубине залегания и ширине профиля. В процессе отжига на поверхности структуры образуется слой оксида кремния. Толщина оксидной плёнки линейно зависит от времени отжига. Кроме того, наблюдается зависимость толщины пленки от дозы имплантируемого кобальта.

Литература

1. Recent advances in thermoelectric materials / C. Gayner, K. K. Kar // Prog. Mat. Science. — 2016. — V. 83. — P. 330—382.
2. Boryakov A. V. et al., J. of electron spectroscopy and related phenomena, 229, (2018), 132—140.

СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В OPERANDO/IN SITU РЕЖИМЕ

Л. В. Яшина¹

¹Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: yashina@inorg.chem.msu.ru, тел: 89163808641

Исследование границ раздела является наиболее трудоемкой задачей, поскольку эти области часто труднодоступны для обычных методов анализа как поверхностей, так и объема материала. Вместе с тем это очень важная задача, так как многие ключевые процессы и химические превращения происходят именно на границах раздела. Так как состоя-

ние исследуемой системы невозможно «заморозить», актуально получать информацию о состоянии границы раздела *in situ* или в *operando* условиях, если речь идет о функционировании устройств, таких как, например, аккумуляторы.

В докладе обсуждаются имеющиеся в настоящий момент подходы, основанные на использовании чисто интерфейсно-чувствительных методов, таких как нейтронная рефлектометрия, методов анализа объема и поверхности, их достижения и перспективы. Представлены результаты, полученные при участии автора с использованием различных подходов по исследованию химических и электрохимических процессов на границах твердое-газ, твердое-раствор и других более сложных систем. Особое внимание уделено созданию и использованию модельных систем и электрохимических ячеек, включающих графен.

Работа выполнена при поддержке РНФ (22-13-00427).

ВРЕМЯ-РАЗРЕШЁННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

**М. С. Смирнов¹, Т. С. Кондратенко¹, О. В. Овчинников¹,
И. Г. Гревцева¹, Т. А. Чевычелова¹, Н. В. Королев¹,
А. Н. Понявина², С. А. Тихомиров², Hong Minh Pham³,
Thanh Binh Nguyen³**

¹ФГБОУ ВО «ВГУ»,

Воронеж, Россия

²Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси,

Минск, Беларусь

³Институт физики, ВАНТ, Ханой, Вьетнам

e-mail: Smirnov_M_S@mail.ru, тел.: +7 (473)220-87-80

Исследования разнообразных гибридных наноструктур на основе коллоидных квантовых точек (КТ), молекул красителей или их самоорганизующихся агрегатов, а также плазмонных наночастиц актуальны благодаря их уникальным оптическим свойствам, не характерным компонентам по отдельности. Новые оптические свойства таких структур обусловлены процессами взаимодействия — квантовая интерференция, безызлучательный перенос энергии электрон-

ного возбуждения, фотоиндуцированный перенос носителей заряда. Зачастую исследования механизмов фотопроцессов, определяющих новые гибридные свойства наноструктур, ограничиваются только лишь спектральными исследованиями поглощения и люминесценции. Исследование кинетических особенностей фотопроцессов возможно с применением разнообразных время-разрешённых методик. В данной работе представлены результаты исследований фотопроцессов в гибридных ассоциатах коллоидных КТ или плазмонных наночастиц с молекулами красителей и компонент по отдельности, методами время-разрешённой люминесценции с субнаносекундным разрешением и спектроскопии наведённого поглощения с фемтосекундным разрешением.

Для гибридных ассоциатов КТ CdS и молекул метиленового голубого (МВ) обнаружен фёрстеровский безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения, сопровождающийся тушением рекомбинационной люминесценции и ускорением кинетики затухания люминесценции. Константа безызлучательного переноса энергии оказалась в пределах 10^7 — 10^8 с⁻¹. Для гибридных ассоциатов КТ Ag₂S и молекул МВ, обнаружен фотоперенос носителей заряда, сопровождающийся сильным тушением люминесценции обоих компонентов и формированием в спектрах наведённого поглощения новых полос. Для гибридных ассоциатов молекул МВ и плазмонных Au/SiO₂ наночастиц установлено увеличение эффективного сечения триплет-триплетного поглощения в органической компоненте, что сопровождается эффективностью обратного насыщающегося поглощения. Показано, что динамика наведённого поглощения в плазмонных наночастицах Au определяется температурной динамикой охлаждения электронной и решёточной подсистем. Обнаружено, что диэлектрическая оболочка SiO₂ блокирует лазерную дефрагментацию НЧ Au при достижении температуры плавления.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-52-81005 ЕАПИ_m.

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОДЛОЖЕК РАЗЛИЧНЫХ
МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ СТРУКТУР
«КЛЕТКИ МЛЕКОПИТАЮЩИХ — НАНОЧАСТИЦЫ
КРЕМНИЯ» МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ
ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.**

**С. С. Титова¹, Л. А. Осминкина², Ю. С. Какулия¹,
Р. Г. Чумаков³, А. М. Лебедев³, А. А. Кудрявцев⁴,
Е. В. Паринова¹, О. А. Чувенкова¹, С. Ю. Турищев¹**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Московский государственный университет*

им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³*Национальный исследовательский центр*

«Курчатовский Институт», Москва, Россия

⁴*Институт теоретической и экспериментальной биофизики*

РАН, Пущино, Россия

e-mail: titova@phys.vsu.ru, тел.: 8 (908) 1453773

Среди многообразия способов исследования материалов и структур уникальным является метод фотоэлектронной спектроскопии. Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS, X-ray photoelectron spectroscopy) позволяет получать информацию о физико-химическом состоянии, составе, структуре, атомном и электронном строении, в том числе наноструктурированных, материалов. Глубина зондирования метода порядка нескольких нанометров. В сочетании с ионным травлением, возможности исследований методом XPS расширяются, благодаря чему реализуется послойное изучение материала.

Отдельный интерес представляют исследования гибридных структур (сочетающих органический или природные и неорганический материал) методами чувствительными к изменениям развитой поверхности внедряемых наноразмерных объектов. Интерес к высокоточным исследованиям гибридных систем с наноразмерными объектами, в частности, совмещение наночастиц кремния с клеточными культурами продиктован в первую очередь их применением. Однако, клеточные материалы при нормальных условиях являются жидкофазными, что делает практически невыполнимыми сверхвысоковакуумные исследования, к которым относится XPS. По этой причине биогибридные объекты нуждаются в специальной пробоподготовке при проведении высокоточных исследований с использованием сверхвысоковакуумных установок. Одним из возможных способов

является фиксация гибридного материала на подложке с последующим высушиванием (вакуумированием).

Немаловажную роль в технологиях и исследованиях, связанных с гибридными объектами, играет выбор материала подложки, который должен быть инертен по отношению к биологическим процессам происходящим в биогридном материале. Кроме того, материал подложки должен быть пригоден для набора специфических требований высокоточных методов, в том числе метода XPS. Таким образом, выбор материала подложки для сверхвысоковакуумных исследований является актуальной и важной задачей.

В данном исследовании качестве интегрируемого в биологические объекты материала использовалась суспензия наночастиц кремния, изготовленная методом механического измельчения пленок пористого кремния. Пленки были получены методом электрохимического травления пластины кристаллического кремния c-Si (100) в течение часа в $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}=1:1$ (плотность тока 50 mA/cm^2), после чего пленку измельчали 50 минут в планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7 Planetary Ball Mill. Образцы для данной работы были получены в результате интеграции суспензии наночастиц пористого кремния в клеточные культуры 3T3 NIH (фибробласты мыши) на различных подложках. Материал подложек в свою очередь выбирался из соображений предполагаемой инертности по отношению к клеточным культурам и средам их содержащим. Такими поверхностями стали никель, золото и титан. Спустя 72 часа для клеточной культуры на золоте и никеле, 48 часов для клеточной культуры на подложке титана, рост клеток останавливался, питательная среда вымывалась, клетки фиксировались формальдегидом, который удалялся с поверхности образцов после закрепления.

XPS исследования проводились на спектрометре, оснащенный полусферическим анализатором Specs Phoibos 150 с монохроматическим источником рентгеновского Al K α излучения (1486.7 эВ), в НИЦ «Курчатовский институт» (г. Москва). Энергетическое разрешение составляло 0.1 эВ, глубина анализа ~3 нм. В качестве источников калибровочных сигналов использовались подготовленные фольги титана и золота.

Результаты XPS исследований показали неоднозначность определения энергий связи кремния в случае подложки из золота ввиду близкого расположения самых интенсивных линий энергий связи 4f золота и 2p кремния. В силу малого количества частиц кремния слабый сигнал от них полностью перекрывается существенно более интенсивным предпиковым фоном для Au 4f. Отметим, однако, что относительно слабый и зашумленный сигнал детектируется от Si 2s состояний. В случае использования поверхности никеля показана существенная фрагментация биогридного

материала, значительное его отслаивание. Качественный и количественный анализ данных XPS показал полное отсутствие на спектрах линий кремния, что подтверждает непригодность использования подложки никеля. Наилучшим образом показала себя поверхность титана. Помимо хорошей адгезии, качественного и количественного распределения клеточной культуры по поверхности подложки, наблюдается четкая дифференциация линий (оксида) титана (Ti 3p, Ti 3s) и кремния (Si 2p, Si 2s), что не препятствует дальнейшей идентификации состава и структуры наночастиц кремния внедренных в клеточную культуру методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высокого разрешения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20180). Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-135.

МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ И СИНХРОТРОННОЙ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ С ЖИВЫМИ КЛЕТКАМИ: НА ПУТИ К РАЗРАБОТКЕ БИОГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР

**Осминкина Л. А.^{1,2}, С. С. Титова³, А. А. Кудрявцев⁴,
С. Ю. Турищев³**

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, Физический факультет, Ленинские горы, 1с2, Москва 119991, Российская Федерация

²Институт Биологического приборостроения РАН, ул. Институтская, 7, Пуцино 142290, Российская Федерация

³Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

⁴Институт Теоретической и Экспериментальной Биофизики РАН, ул. Институтская, 3, Пуцино 142290, Российская Федерация
e-mail: osminkina@physics.msu.ru

Биогибридные наноструктуры, основанные на кремнии, представляют собой уникальные материалы, открывающие широкие перспек-

тивы их применений в области бионанотехнологий. Кремний, второй по распространенности элемент в земной коре, привлекает внимание исследователей благодаря своей доступности и относительно низкой стоимости производства. Наноматериалы на основе кремния обладают уникальными физико-химическими свойствами, а также высокой биосовместимостью и способностью к биodeградации [1]. Современные методы синтеза позволяют точно настраивать морфологию и поверхностные характеристики получаемых наноструктур для достижения оптимальных результатов в областях диагностики и терапии различных заболеваний.

В представленной работе наночастицы получали измельчением наноструктурированных пленок кремния. Показано, что 100-нм наночастицы пористого кремния (pSi NPs) представляют собой кремниевые нанокристаллы и поры, размер которых можно настраивать, меняя концентрации травящих растворов, уровень легирования используемых подложек кристаллического кремния и проч [2]. При этом значение пористости наночастиц достигает 80 % от их объема, что можно использовать для эффективной доставки лекарственных препаратов [3]. С применением комплекса биологических и физических методов *in vitro* было показано, что сами по себе наночастицы пористого кремния не являются токсичными вплоть до очень высоких, 0.7 мг/мл, концентраций даже при продолжительных, до 10 дней, временах взаимодействия с клетками [3]. При этом доказано свойство pSi NPs выступать в роли фотосенсибилизаторов, сенсибилизаторов высокочастотного электромагнитного поля и терапевтического ультразвука [4—6].

Впервые комплекс неинвазивных оптических методов: комбинационное (рамановское) рассеяние света (КР) и люминесцентная микроскопия, применяются наряду с высокоточными методами электронной микроскопии и рентгеновской (синхротронной) рентгеноэлектронной спектроскопии для диагностики процессов взаимодействия pSiNPs с клетками.

Полученные результаты представляют собой несомненный интерес для разработки биогибридных наноматериалов на основе кремния.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 19-72-20180 и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части методических вопросов синхротронных исследований.

Литература

1. *Low S. P., Voelcker N. H.* Biocompatibility of porous silicon // Handbook of porous silicon. — Springer, 2014. — С. 381—393.
2. *Osminkina L. A., Gongalsky M. B.* Porous silicon suspensions and colloids // Handbook of Porous Silicon: Second Edition. — 2018. — С. 227—245.
3. *Maximchik Polina V., et al.* “Biodegradable porous silicon nanocontainers as an effective drug carrier for regulation of the tumor cell death pathways.” ACS Biomaterials Science & Engineering 5.11 (2019): 6063—6071.
4. *Tamarov K. P. et al.* Radio frequency radiation-induced hyperthermia using Si nanoparticle-based sensitizers for mild cancer therapy // Scientific reports. — 2014. — Т. 4. № 1. — С. 7034.
5. *Osminkina L. A. et al.* Porous silicon nanoparticles as efficient sensitizers for sonodynamic therapy of cancer // Microporous and Mesoporous Materials. — 2015. — Т. 210. — С. 169—175.
6. *Osminkina L. A. et al.* Photoluminescent biocompatible silicon nanoparticles for cancer theranostic applications // Journal of biophotonics. — 2012. — Т. 5. № 7. — С. 529—535.

ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП «СКИФ»: СТАТУС СОЗДАНИЯ И НАУЧНАЯ ПРОГРАММА

**Я. В. Зубавичус, Е. Б. Левичев,
В. И. Бухтияров**

*ЦКП «СКИФ», Никольский пр., 1, р. п. Кольцово
ya.v.zubavichus@srf-skif.ru*

В докладе будет представлен статус реализации проекта создания источника синхротронного излучения поколения 4+ ЦКП «СКИФ» в рабочем поселке Кольцо Новосибирской области (Рисунок 1), описаны его ключевые технические параметры, а также функциональные возможности шести экспериментальных станций первой очереди. Плановое завершение строительной фазы — декабрь 2024 года.



*Рис. 1. Строительная площадка ЦКП «СКИФ» на конец сентября 2023 г.
(в центре — здание основного накопителя)*

Отдельное внимание в докладе будет уделено направлениям междисциплинарных научных исследований, реализуемым на экспериментальных станциях первой очереди, а также проекту программы инфраструктурного развития ЦКП «СКИФ», включающей создание экспериментальных станций второй очереди.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЛЕНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ PdO, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В КАЧЕСТВЕ РЕЗИСТИВНЫХ СЕНСОРОВ

**С. В. Рябцев¹, О. А. Чувенкова¹, А. А. К. Аль-Хабиб¹,
А. М. Самойлов¹, А. В. Шапошник², С. Ю. Турищев¹**

¹*Воронежский государственный университет,
Университетская пл., 1, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный аграрный университет,
ул. Мичурина, 1, Воронеж, Россия
e-mail: Ryabtsev@phys.vsu.ru*

В работе изучались тонкие (~30 нм) пленки PdO, которые проявили высокую газовую чувствительность к микропримесям озона

в атмосфере воздуха. Оксидные пленки были получены путем окисления металлических слоев Pd при 600°C. Сенсорные свойства PdO были обнаружены нами впервые и подробно изучены [1, 2]. Озон широко используется в технологических целях, например, для обеззараживания воды. Вместе с тем, озон является одним из самых токсичных газов, поэтому анализ его микроконцентраций в воздухе является актуальной задачей.

Сенсорные свойства PdO, а именно, изменение сопротивления пленок под действием контролируемых микроконцентраций озона (25-55-90-250 ppb) исследовались в режиме термической модуляции [3]. Были обнаружены особенности резистивного отклика сенсоров PdO, которые мы связываем со специфическими для системы PdO-O₃ адсорбционно-десорбционными явлениями и связанными с ними изменениями электронного состояния поверхности пленок.

Для изучения исходного состояния поверхности PdO был применен метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Спектры были сняты на синхротроне BESSY II (Германия). Энергия налетающих фотонов составила 800 эВ, поток фотонов $\sim 10^{12}$ фотон/с, ток накопителя 150—300 мА, аппаратное уширение порядка 0.1 эВ. Вакуум в камерах спектрометра поддерживался на уровне 10^{-10} Торр. Глубина анализа составляла ~ 1.5 нм.

На обзорных спектрах образцов PdO наблюдаются только линии, ожидаемые для данных образцов: линии палладия Pd 3d_{3/2,5/2}, Pd 4d, Оже линия Pd MNN, линия кислорода O 1s. На рисунке 1 представлены разложения линий Pd 3d_{5/2} и O 1s для исследуемых образцов.

Линия Pd 3d_{5/2} для образца является трехкомпонентной. Металлический палладий в исследуемых образцах не обнаружен. Следует отметить, что интерпретация компонент линий кислорода O1s для исследуемых объектов весьма затруднительна и связана с наложением между собой линии кислорода O1s с линией Pd 3p_{3/2} по энергиям связи. Достоверно можно интерпретировать только низкоэнергетические компоненты 530.61 и 530.58 эВ (рисунок 1b), связанные с наиболее интенсивной компонентой оксида палладия. Компоненты O1s с энергиями связи в интервале значений 532.1—534.7 эВ могут включать в себя как гидроксильные группы и воду, так и Pd 3p_{3/2}. Энергии связи компонент полученных при разложении линий Pd 3p_{3/2} и O 1s имеют хорошее соответствие с литературными данными. Анализ полученных компонент палладия, позволяет предположить присутствие в образцах фаз Pd (OH)_x, PdO и PdO₂.

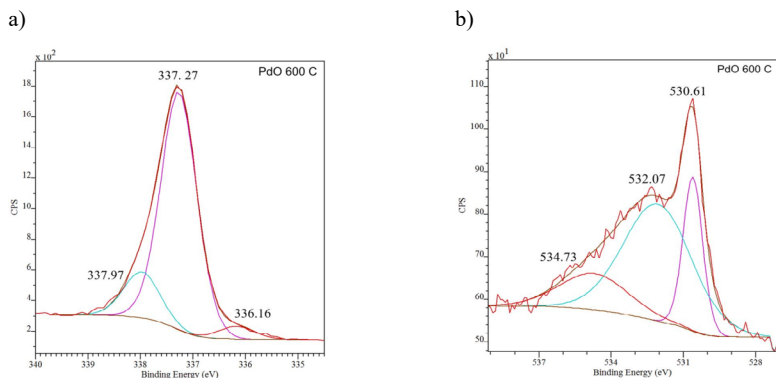


Рис. 1. а) Разложение основной линии Pd 3d_{5/2} образца отожженного при 600°C;
 б) Разложение основной линии O 1s образца отожженного при 600°C

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023—2025 годы (проект No FZGU-2023-0006).

Литература

1. Ryabtsev S. V., Ievlev V. M., Samoylov A. M., Kuschev S. B., Soldatenko S. A., Thin Solid Films, 2017, 636, 751—759.
2. Ievlev V. M., Ryabtsev S. V., Samoylov A. M., Shaposhnik A. V., Kuschev S. B., Sinelnikov A. A., Sensors and Actuators B, 2018, 255, 1335—1342.
3. Рябцев С. В., Обвинцева Н. Ю., Чистяков В. В., Аль-Хабиб А. А. К., Шапошник А. В., Турищев С. Ю., Домашевская Э. П., 2023, 25(3), 392—397.

Научное издание

ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ:
ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ

Сборник тезисов
II Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 9—14 октября 2023 г.)

Издание публикуется в авторской редакции

Подписано в печать 09.10.2023. Формат 60 × 84/16
Усл. печ. л. 7,32. Тираж 100 экз. Заказ 209.

ООО Издательско-полиграфический центр «Научная книга»
394018, г. Воронеж, ул. Никитинская, 38, оф. 308
Тел.: +7 (473) 200-81-02, 229-78-68
<http://www.n-kniga.ru> E-mail: zakaz@n-kniga.ru

Отпечатано в типографии ООО ИПЦ «Научная книга»
394026, г. Воронеж, Московский пр-т, 11/5
Тел.: +7 (473) 229-32-87
<http://www.n-kniga.ru> E-mail: nautyp@yandex.ru