

2-Физика конденсированного состояния вещества (включая наносистемы)

Анисимова Маргарита Владимировна, 2 курс
Владивосток, Дальневосточный государственный университет, физико-технический
Влияние формы наноточек на процессы перемангничивания
Чеботкевич Людмила Алексеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: masterofmight@list.ru стр. 81

Аржанова Наталья Александровна, магистрант 1 года обучения
Ярославль, Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова, физический
Расчет энергетического спектра электронов в полупроводниковых квантовых точках в приближении эффективной массы
Кузнецов Владимир Степанович, к.ф.-м.н.
e-mail: natarzhanova@mail.ru стр. 82

Бачурина Анна Юрьевна, аспирант
Гродно, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, физико-технический
Моделирование процессов теплопроводности в композиционных системах
Никитин Александр Викторович, к.т.н.
e-mail: a.bachurina@grsu.by стр. 83

Белоусов Максим Викторович, аспирант
Москва, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический
Нецентросимметричные ламеллярные структуры в смесях ассоциирующих диблок- и триблоксополимеров
Ерухимович Игорь Яковлевич, д.ф.-м.н.
e-mail: belousov@polly.phys.msu.ru стр. 84

Беляев Павел Юрьевич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский государственный технический университет-УПИ, физико-технический
Решение уравнений теории динамического среднего поля в области низких температур
Мазуренко Владимир Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: pbelyayev@gmail.com стр. 85

Бессонов Владимир Дмитриевич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский государственный технический университет-УПИ им. Б. Ельцина, металлургический
Оптическая индикация неоднородного состояния в наноструктурном борате FeVO₃
Телегин Андрей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: telegin@imp.uran.ru стр. 87

Бизюк Алексей Олегович, 4 курс
Благовещенск, Амурский государственный университет, инженерно-физический
Исследование структуры и стабильности нанокластера диоксида титана методом компьютерного моделирования
Чибилов Андрей Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: inial-sin-kerin@rambler.ru стр. 88

Бугаева Инна Александровна, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Получение наночастиц серебра методом восстановления из раствора
Звиденцова Надежда Семеновна, к.х.н.
e-mail: inkas88@bk.ru стр. 89

Валеева Лилия Ильхамовна, 5 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, физико-энергетический
О влиянии температуры на смачивание расплавом Fe₈₀B₂₀ подложек из BeO и Al₂O₃
Бельтюков Анатолий Леонидович, к.ф.-м.н.
e-mail: bal1973@mail.ru стр. 90

Валентюк Мария Вячеславовна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский государственный технический университет-УПИ им. Б. Ельцина, физико-технический

Микроскопический анализ электронной поляризации в мультиферроиках

Мазуренко Владимир Владимир, к.ф.-м.н.

e-mail: valentyuk@mail.ru стр. 91

Валиуллина Алия Мухарамовна, 6 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический

Фазоны в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga

e-mail: valiullina85@mail.ru стр. 93

Владимиров Александр Александрович, м.н.с.
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический

Получение ультрадисперсных частиц методом химического осаждения из растворов

Сечкарев Б. А., д.х.н

e-mail: sechkar@kemsu.ru стр. 94

Вязовцев Андрей Викторович, 5 курс
Челябинск, Южно-Уральский государственный университет, физический

Особенности дезарядки плёнок ПВДФ при их радиационной карбонизации мягким рентгеновским облучением и ионной бомбардировкой

Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.

e-mail: RV9WHK@mail.ru стр. 95

Ганеев Иршат Тагирьянович, аспирант
Уфа, Башкирский государственный университет, физический

Упругооптические свойства ортоферитов

Сагдаткиреева Минигуль Байгужевна, д.ф.-м.н.

e-mail: irshatufa@rambler.ru стр. 97

Гетманский Андрей Александрович, аспирант 3 года обучения
Ставрополь, Ставропольский государственный университет, физико-математический

Электроинтерференция света в тонкой пленке, состоящей из наночастиц, обратимо образующейся на непрозрачных электродах

Чеканов Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.

e-mail: mclayd@mail.ru стр. 97

Гребенников Антон Александрович, аспирант 2 года обучения
Воронеж, Воронежский государственный технический университет, физико-технический

Формирование никелевых кластеров при отжигах гомогенных сплавов Ni-Mg-O

Стогней Олег Владимирович, д.ф.-м.н.

e-mail: anton18885@yandex.ru стр. 99

Гребенькова Юлия Эрнестовна, 4 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, физический

Магнитооптический эффект Фарадея в пленках Ni-Ge: зависимость от толщины слоев Ge и режима отжига

Эдельман И.С.,

e-mail: ise@iph.krasn.ru стр. 100

Грешняков Владимир Андреевич, 5 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический

Закономерности формирования политипов алмаза и карбида кремния

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

e-mail: belenkov@csu.ru стр. 101

Губайдуллин Ренальд Рафаилович, 5 курс
Стерлитамак, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, физико-математический
Остаточная намагниченность магнетита при воздействии повышенных давлений
Гареева Магира Ямгетдиновна, к.ф.-м.н.
e-mail: web.renald@gmail.com стр. 102

Давлетова Олеся Александровна, ассистент
Волгоград, Волгоградский государственный университет, физический
MNDO-исследования процесса адсорбции легких атомов на монослое пиролизованного полиакрилонитрила
Запороцкова Ирина Владимировна, д.ф.-м.н.
e-mail: ollessya.08@mail.ru стр. 104

Давлетова Олеся Александровна, ассистент
Волгоград, Волгоградский государственный университет, физический
Исследования особенностей строения пиролизованного полиакрилонитрила на адсорбцию атомов кислорода
Запороцкова Ирина Владимировна, д.ф.-м.н.
e-mail: ollessya.08@mail.ru стр. 103

Денисов Константин Игоревич, 4 курс
Томск, Томский государственный университет, физический
Изучение процессов рекристаллизации в сплаве V-4Ti-4Cr после интенсивной пластической деформации методом многократного всестороннего прессования
Дитенберг Иван Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: deni@ultranet.tomsk.ru стр. 105

Доронин Иван Сергеевич, 5 курс
Хабаровск, Дальневосточный государственный университет путей сообщения, естественно-научный институт
Выращивание фотонных кристаллов из наносфер диоксида кремния в тонких кюветах
Окишев Константин Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: ivonpr@mail.ru стр. 106

Дублистова Ольга Васильевна, 5 курс
Стерлитамак, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, физико-математический
Структура слоистого дихалькогенида переходного металла интеркалированного серебром $Ag_0.20ZrSe_2$
Ягафарова Зульфия Абдулхаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: zulfiya_abdul@mail.ru стр. 108

Дюсембаев Руслан Нурлыханович, аспирант. Информация об авторе дополнительно представлена в секции 8
Оренбург, Оренбургский государственный университет, физический
Влияние магнитного поля на аннигиляцию мобильных триплетных электронных возбуждений в сферических нанопорах
Кучеренко Михаил Геннадьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: r_dusembaev@mail.ru стр. 108

Ермолович Игорь Михайлович, 6 курс
Томск, Томский политехнический университет, естественных наук и математики
Получение тонких пленок оксида титана на поверхности медицинских имплантатов методом магнетронного распыления
Пичугин Владимир Федорович, д.ф.-м.н.
e-mail: ermolovich@mail.ru стр. 110

Жилкашинова Альмира Михайловна, аспирант
Усть-Каменогорск, Восточно-Казахстанский государственный университет им.С. Аманжолова, математики, физики и технологий
Структурно-фазовое состояние стали 110Г13Л: роль легирующих элементов.
Скаков Мажын Канапинович, д.ф.-м.н.
e-mail: almira_1981@mail.ru стр. 111

Захожева Марина Игоревна, 4 курс
Томск, Томский государственный университет, физический
Исследование дефектной структуры и фазового состава метастабильной аустенитной стали 40Н25 после прокатки

Литовченко Игорь Юрьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: ejina-vrajina@mail.ru стр. 112

Иванов Юрий Павлович, доцент
Владивосток, Дальневосточный государственный университет, информационных технологий
Упорядоченные ансамбли ферромагнитных наноточек

Чеботкевич Людмила Алексеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: yivanov@phys.dvgu.ru стр. 113

Калачёва Екатерина Викторовна, 4 курс
Томск, Томский государственный университет, физический
Кристаллогеометрия структур в системах Ti-Ni, Ni-Nb, Ti-Nb и структурно-фазовые состояния в сплавах TiNi(Nb,Mo)

Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: Katusha_K@vtomske.ru стр. 114

Каримов Линар Закирович, аспирант 1 года обучения
Стерлитамак, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, физико-математический
Доменная структура слабоанизотропных тонких пленок

Сагдаткиреева М.Б, д.ф.-м.н.
e-mail: bickulova@mail.ru стр. 116

Киржнева Ольга Геннадьевна, 5 курс
Тула, Тульский государственный университет, естественно-научный
Поверхностная активность углерода и эффект Ребиндера в сплавах системы Fe-C

Чуканов Александр Николаевич, д.т.н.
e-mail: o.lya-lya@inbox.ru стр. 118

Кириллов Алексей Михайлович, аспирант
Тамбов, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики
Зависимость числа двойников в поликристаллическом ОЦК сплаве Fe+3,25%Si от температуры и скорости нагружения

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 118

Киямова Дарья Асхатовна, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование наночастиц металлов методом РФЭС

Юдин Андрей Леонидович, к.ф.-м.н.
e-mail: dasyuska@mail.ru стр. 119

Клименко Евгения Михайловна, 5 курс
Ставрополь, Ставропольский государственный университет, физико-математический
Структурная организация в тонком слое магнитной жидкости при воздействии на неё электрического поля

Вегера Жанна Геннадьевна, к.ф.-м.н.
e-mail: klimenkoevgeniya@mail.ru стр. 120

Кокатев Александр Николаевич, вед. инженер. Информация об авторе дополнительно представлена в секции 12
Петрозаводск, Карельский государственный педагогический университет, физико-математический
Нанокompозитные структуры на основе анодных оксидов алюминия и титана

Яковлева Наталья Михайловна, д.ф.-м.н.
e-mail: labnm@kspu.karelia.ru стр. 121

Колесников Сергей Владимирович, аспирант
Москва, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический
Эпитаксиальный рост кластеров Co на поверхности Cu(100)
Салецкий Александр Михайлович, д.ф.-м.н.
e-mail: kolesnikov_s_v@mail.ru стр. 122

Корабельников Дмитрий Васильевич, аспирант 3 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Электронные свойства поверхности оксианионных кристаллов
Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: dKorabelnikov@yandex.ru стр. 122

Корякина Дарья Сергеевна, 5 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, физико-энергетический
О неравновесной кристаллизации быстрозакаленных стержней Ni-B
Камаева Лариса Вячеславовна, к.ф.-м.н.
e-mail: las@pti.udm.ru стр. 124

Кочергина Юлия Алексеевна, аспирант
Тамбов, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики
Поверхностные образования в ионных кристаллах при термоэлектрическом воздействии
Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 125

Кравец Екатерина Михайловна, 5 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, физико-энергетический
Об особенностях вязкости и процессах кристаллизации расплавов Al-Y (до 10 ат.%Y)
Меньшикова Светлана Геннадьевна,
e-mail: svetlmensh@mail.ru стр. 126

Кувшинов Алексей Михайлович, аспирант
Челябинск, Челябинский государственный педагогический университет, физический
Сравнительная характеристика карбонизирующего действия на поливинилиденфторида рентгеновского облучения и бомбардировки ионами
Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.
e-mail: kuvshinov_am@list.ru стр. 127

Кудряшов Михаил Александрович, аспирант 1 года обучения
Нижний Новгород, Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, физический
Оптические свойства и морфология гетерогенных сред на основе полиакрилонитрила и наночастиц серебра
Машин Александр Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: Kudryashov@phys.unn.ru стр. 129

Ларионова Наталья Николаевна, 2 курс
Витебск, Витебский государственный технологический университет, конструкторско-технологический
Анализ оптического спектра иона Tm³⁺ в эльпасолите в приближении сильного конфигурационного взаимодействия
Корниенко Алексей Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: a_a_kornienko@mail.ru стр. 130

Лукьяненко Юлия Владимировна, аспирант
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Первопринципная динамика азидов металлов
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: lukjuaenkova@hotmail.ru стр. 131

Люханова Инна Владимировна, аспирант 2 года обучения
Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет, физико-технический
Определение степени кристалличности и областей когерентного рассеяния образцов древесной массы, полученных методом механического дефибрирования
Алешина Людмила Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: luhanova@yandex.ru стр. 133

Мавлютов Альмир Айдарович, аспирант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физический
Роль толщины в самоорганизации полосовой доменной структуры в наноразмерных антиферромагнетиках
Сагдаткиреева Минигуль Байгужевна, д.ф.-м.н.
e-mail: almir_m@mail.ru стр. 134

Макаров Андрей Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Уральский государственный технический университет-УПИ им. Б. Ельцина, физико-технический
Моделирование Н-центра в ШГК на основе расчетов из первых принципов
Кузнецов Алексей Юрьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: mas@dpt.ustu.ru стр. 135

Макаров Павел Андреевич, аспирант 1 года обучения
Сыктывкар, Сыктывкарский государственный университет, физический
Электродинамические исследования тонких многослойных структур
e-mail: istok86@mail.ru стр. 136

Мамонтов Александр Иванович, 5 курс
Сыктывкар, Сыктывкарский государственный университет, физический
Высокоразрешающие рентгеновские исследования пористых материалов
Петраков Анатолий Павлович, д.ф.-м.н.
e-mail: snowchek@mail.ru стр. 137

Марченко Екатерина Сергеевна, аспирант
Томск, Томский государственный университет, физический
Структурно-фазовые состояния в сплавах с эффектами памяти формы в области квазибинарного разреза TiNi₆₅Si₃₅; TiCu
Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: Marchenko_Katya@mail.ru стр. 138

Медведева Валерия Сергеевна, 5 курс
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, ФЭТ
Качественная и количественная оценка плёнок графита с подслоем из алюминия с помощью оптического и атомно- силового микроскопов
Шляхова Г.В., к.т.н.
e-mail: perchik6@mail.ru стр. 140

Минаков Александр Владимирович, 6 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Рост кристаллов сульфида цинка в расплавах хлоридов металлов
Мамаев Николай Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: minakov140586@mail.ru стр. 140

Михалюк Алексей Николаевич, аспирант 2 года обучения. Со-докладчик. Осн. автор- Титов П.Л.
Владивосток, Дальневосточный государственный университет, физико-технический
Алфавит квазикристаллического паркета Пенроуза
Юдин Виталий Витальевич, д.ф.-м.н.
e-mail: mih-alexey@yandex.ru стр. 166

Морозова Татьяна Владимировна, зав.лаб.
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование особенностей образования и роста частиц серебра на поверхности микрокристаллов AgBr
Колесников Л.В., д.ф.-м.н.
e-mail: morozova-tania@mail.ru стр. 141

Мухаметшина Ильмира Юлаевна, вед.специалист
Ижевск, Ижевский государственный технический университет, приборостроительный
Оценка изменения удельного объема титана при фазовом превращении
Белых Вячеслав Вячеславович, к.т.н.
e-mail: fizika@istu.ru стр. 143

Мядзюта Григорий Алексеевич, 2 курс
Хабаровск, Дальневосточный государственный университет путей сообщения, естественно-научный
Неустойчивость частицы в лазерной ловушке
Иванов Валерий Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: t_meh@FESTU.khv.ru стр. 144

Невский Сергей Андреевич, аспирант
Новокузнецк, Сибирский государственный индустриальный университет, материаловедения и обработки металлов давлением
О влиянии внешнего термического воздействия на релаксацию алюминия при сжатии
Громов Виктор Евгеньевич, д.ф.-м.н.
e-mail: nevskiy_sa@physics.sibsui.ru стр. 145

Николаева Елена Владимировна, аспирант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Структурные подрешетки Бравэ в трех модификациях кристалла CaTiO₃
Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.
e-mail: elena_eruk@mail.ru стр. 147

Новиков Геннадий Викторович, аспирант
Тамбов, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики и физики
Модификация свойств аморфных и нанокристаллических сплавов под воздействием интенсивного потока α -частиц
Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 148

Петров Дмитрий Анатольевич, аспирант 1 года обучения
Красноярск, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, физический
Ионно-синтезированные наночастицы Co и Ni в матрице SiO₂
Эдельман Ирина Самсоновна, д.ф.-м.н.
e-mail: irbiz@iph.krasn.ru стр. 149

Подлегаева Людмила Николаевна, аспирант
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование плазморезонансного поглощения наночастиц серебра и золота
Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.
e-mail: ludmila.k.06@mail.ru стр. 151

Полянский Дмитрий Александрович, доцент
Владивосток, Дальневосточный государственный университет, физико-технический
Механизм конденсации и мезоструктура сапфиров Приморских месторождений
e-mail: rambo192@mail.ru стр. 152

Потёмкин Вячеслав Владимирович, 5 курс
Тверь, Тверской государственный университет, физико-технический
Электропроводность монокристаллов сегнетоэлектрика-релаксора SBN с примесями родия и европия
Иванов Владимир Васильевич, к.ф.-м.н.
e-mail: Vladimir.Ivanov@tversu.ru стр. 153

Прохоров Павел Евгеньевич, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Структурные подрешетки в одноэлементных кристаллах кубической сингонии
Силинин Антон Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: propav@mail.ru стр. 154

Сазонов Андрей Рудольфович, инженер
Йошкар-Ола, Марийский государственный университет, физико-математический
Концентрационная зависимость среднего температурного коэффициента модуля всестороннего сжатия железо-никелевых сплавов
Леухин Александр Викторович, к.ф.-м.н.
e-mail: Ulen Spiegel@mail.ru стр. 155

Саросек Станислав Иосифович, 5 курс
Гродно, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, физико-технический
Сравнительный анализ моделей теплопроводности композиционных систем
Никитин Александр Викторович, к.т.н.
e-mail: sarosek.stas@gmail.com стр. 157

Седельников Александр Николаевич, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Первопринципная динамика галогенидов серебра
Кравченко Наталья Георгиевна, к.ф.-м.н.
e-mail: bigking@mail.ru стр. 158

Седельникова Анна Евгеньевна, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование оптических свойств тонких пленок серебра
Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.
e-mail: dm.russakov@gmail.com стр. 159

Сергейченко Надежда Владимировна, инженер
Томск, ООО НПП `Сенсерия`, радиофизический
Разработка интеллектуального пожарного газового извещателя на основе тонких пленок металлооксидных полупроводников
Максимова Надежда Кузьминична, к.ф.-м.н.
e-mail: anisimov@senseria.ru стр. 160

Степанов Сергей Александрович, 5 курс
Томск, Томский политехнический университет, электрофизический
Динамические механические напряжения в ионных кристаллах при воздействии импульсного электронного пучка
Штанько Виктор Федорович, д.ф.-м.н.
e-mail: shtanko@tpu.ru стр. 161

Степанов Сергей Александрович, 5 курс
Томск, Томский политехнический университет, электрофизический
Радиационные дефекты в кристаллах CaF₂ - CaO
e-mail: shtanko@tpu.ru стр. 163

Степанов Юрий Михайлович, аспирант 3 года обучения
Стерлитамак, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, физико-математический
Исследование фазового перехода на монокристалле Cu_{1,8}Se
Биккулова Нурия Нагимьяновна,
e-mail: bickulova@mail.ru стр. 165

Титов Павел Леонидович, вед.программист
Владивосток, Дальневосточный государственный университет, физико-технический
Алфавит квазикристаллического паркета Пенроуза
e-mail: T-P-L@inbox.ru стр. 166

Трегубов Кирилл Александрович, 5 курс
Тула, Тульский государственный университет, естественно-научный
Внутреннее трение в оценке корреляции процессов деградации и деструкции углеродистых
Чуканов Александр Николаевич, д.т.н.
e-mail: kiril430341@rambler.ru стр. 168

Усова Мария Викторовна, 5 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Структура соединений углеродных нанотрубок на основе топологических дефектов и фуллеренов
Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: belenkov@csu.ru стр. 169

Уфимцев Максим Константинович, 5 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Фононные спектры кристалла AgVg и его подрешёток
Поплавной А. С., д.ф.-м.н.
e-mail: ufimcevmk@rambler.ru стр. 170

Ушаков Алексей Вячеславович, 6 курс
Екатеринбург, Уральский государственный технический университет-УПИ им. Б. Ельцина,
физико-технический
Электронная и магнитная структура низкой размерности соединения со спиновой щелью CuTe2O5
Стрельцов Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: alexushv@mail.ru стр. 171

Фёдоров Александр Анатольевич, 5 курс
Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет, физико-технический
Фотопроводимость тонких оксидных плёнок ниобия
Малиненко Владимир Пантелеймонович, к.ф.-м.н.
e-mail: xeon3@onego.ru стр. 172

Филимонов Семён Юрьевич, аспирант
Томск, Институт сильноточной электроники, -
Импульсная электронно-пучковая модификация поверхности электровзрывного легирования углеродистой стали
Иванов Юрий Федорович, д.ф.-м.н.
e-mail: ZMAN3@ya.ru стр. 173

Филиппов Роман Игоревич, аспирант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Подрешетки совпадающих узлов в решетках кубической сингонии
Анатолий Степанович Поплавной, д.ф.-м.н.
e-mail: ont.rif@gmail.com стр. 175

Филиппов Семён Игоревич, 3 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Вычисление плотности состояний методом моментов
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: filippov_sem@kemsu.ru стр. 176

Филиппев Роман Анатольевич, аспирант
Новокузнецк, Сибирский государственный индустриальный университет, материаловедения и обработки металлов давлением
Изменение пластичности алюминия при воздействии электрическим потенциалом
Громов Виктор Евгеньевич, д.ф.-м.н.
e-mail: roman82@sibmail.com стр. 178

Харина Евгения Геннадьевна, аспирант
Новокузнецк, Кузбасская государственная педагогическая академия, физико-математический
Исследование энергетических перестроек в металлах при жестком сдвиге
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.
e-mail: jane-ohara@yandex.ru стр. 179

Хоменко Любовь Григорьевна, 2 курс
Киев, Технический центр НАН Украины, физики твердого тела
Процессы порообразования в конденсированных наносистемах
e-mail: [ljudyv.dzjuba@rambler.ru](mailto:ljudv.dzjuba@rambler.ru) стр. 180

Шарафуллин Ильдус Фанисович, аспирант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физический
Влияние внешнего магнитного и электрического поля на динамические взаимодействия в сегнетомагнитных системах
Харрасов Мухамет Хадисович, д.ф.-м.н.
e-mail: SharafullinIF@yandex.ru стр. 182

Шахова Ирина Валерьевна, аспирант 1 года обучения
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Экспериментальные и модельные исследования структуры полипропиленовых пленок
Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: belenkov@csu.ru стр. 183

Шматко Валентина Анатольевна, 5 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Изменение структуры свободных кластеров NaCl в зависимости от размера: анализ методом рентгеновской спектроскопии поглощения.
Яловега Галина Эдуардовна, к.ф.-м.н.
e-mail: shmatko86@mail.ru стр. 184

Шушаков Роман Анатольевич, 3 курс
Томск, Томский государственный университет, физико-технический
Численное моделирование разрушения металлических образцов при динамических испытаниях на трехточечный изгиб
Козулин Александр Анатольевич, к.ф.-м.н.
e-mail: kozulyan@ftf.tsu.ru стр. 185

Яковлев Алексей Владимирович, аспирант
Тамбов, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики
Взаимодействие лазерного излучения с поверхностью объемных аморфных металлических сплавов
Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 186

Влияние формы наноточек на процессы перемангничивания

Анисимова Маргарита Владимировна

Огнев Алексей Вячеславович, Иванов Юрий Павлович

Дальневосточный государственный университет

Чеботкевич Людмила Алексеевна

masterofnight@list.ru

Магнитные наноточки являются перспективными объектами для создания сред с возможностью сверхплотной записи информации, а также исследования трансформаций магнитных свойств и структуры в наномасштабах. Одним из методов получения наноструктур является ионное травление пленок, как через маску, так и фокусированным ионным пучком. В процессе ионной имплантации меняется морфология пленок, которая во многом определяет магнитные свойства получаемых наноструктур [1]. Экспериментально сложно исследовать влияние обработки, так как не всегда достаточно пространственного разрешения приборов. В данной работе изучено влияние радиационных дефектов, возникающих в процессе травления фокусированным ионным пучком, на магнитные свойства наноточек.

Магнитные наноточки изучали методами атомной и магнитной силовой микроскопией (АСМ и МСМ), сканирующей электронной микроскопией (СЭМ). Базовые пленки железа толщиной 10 нм, были осаждены термическим испарением на буфер Pd и покрыты сверху защитным слоем Pd ($d_{Pd} = 3$ нм). Моделирование магнитных свойств осуществляли с помощью программного пакета OOMMF [2]. При моделировании, в качестве шаблонов были использованы различные реальные контуры наноточек, полученные из изображений АСМ. Величины намагниченности насыщения $M_s = 1000$ Гс и магнитной анизотропии $K_u = 10^4$ эрг/см³ получены экспериментально. В микромагнитном моделировании использовали стандартное значение обменной константы для железа. Диаметр наноточек равен $D = 400$ и 650 нм (внутренний и внешний диаметры соответственно), толщина $h = 10$ нм, размер элементарной ячейки составлял 5 нм. За начальное магнитное состояние была принята 180° неелевская граница с шириной в 50 нм. Как оказалось позднее, начальное магнитное состояние наноточки не вносит существенного вклада в процессы перемангничивания.

Результаты исследования рельефа методами АСМ (рис. 1) и СЭМ показали, что наноточки имеют две границы: внутреннюю и внешнюю. Внешний контур наноточек обусловлен процессами эрозии материала (milling), а внутренний распуханием (swelling) под действием ионного пучка Ga⁺.

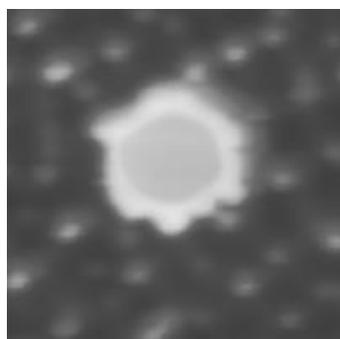


рис. 1. Изображение наноточки Fe, полученное методом АСМ. Размер изображения 2 мкм.

Используя метод МСМ было получено значение коэрцитивной силы $H_c = 30$ Э для данного массива наноточек [3]. Из изображений магнитной структуры, полученных методом МСМ, сложно определить контур магнитного слоя наноточки с высоким пространственным разрешением, что связано с особенностями магнитной силовой микроскопии. Поэтому мы использовали микромагнитное моделирование, чтобы оценить влияние формы магнитного слоя реальных наноточек на процессы перемангничивания.

В таблице приведены рассчитанные значения для наноточек идеальной и реальной формы (4 шаблона). Видно, что для точек с внутренним диаметром (~ 400 нм), получено меньшее значение коэрцитивной силы. Минимальное значение H_c наблюдается для точки идеальной формы.

Установлено, что незначительные различия в форме наноточек могут более чем в 2 раза увеличить поле перемангничивания, а также изменить вид петли гистерезиса. Эти трансформации связаны с возникновением дополнительных центров закрепления магнитных моментов на границе наноточек.

Зависимость H_c от внутреннего и внешнего диаметров наноточек

	1 шаблон	2 шаблон	3 шаблон	4 шаблон	Идеальная точка
H_c , внутренний	110 Эе	80 Э	50 Э	100 Э	40 Э
H_c , внешний	120 Э	100 Э	110 Э	160 Э	

Список публикаций

[1] P. Luches, A. di Bona *etc*, ACTA PHYSICA POLONICA A No. 6, Vol. 112 (2007), (1297-1312)

[2] <http://math.nist.gov/oommf>.

[3] Y.P. Ivanov, L.A. Chebotkevich, Ognev A.V. The thin magnetic structure of multilayer films Fe/Ge and Fe/Pd, Abstract of The Eighth Japan-Russia Seminar on Semiconductor Surfaces, Japan, 2008.

Расчет энергетического спектра электронов в полупроводниковых квантовых точках в приближении эффективной массы

Аржанова Наталья Александровна
 Ярославский государственный университет
 Кузнецов Владимир Степанович
natarzhanova@mail.ru

В последнее время возник большой интерес к изучению электронных состояний кристаллических наноструктур.

В данной работе рассматривается энергетический спектр электронов в сферической полупроводниковой квантовой точке в приближении эффективной массы с параболическим законом дисперсии. Будем считать, что электрон свободно движется внутри сферической ямы радиуса a , а за пределами потенциальная энергия подчиняется закону Кулона:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } r < a, \\ -\frac{e^2}{\varepsilon r} & \text{при } r \geq a. \end{cases}$$

где ε -диэлектрическая проницаемость среды, в которой находится квантовая точка, V_0 –глубина ямы.

Внутри ямы радиальная часть волновой функции уравнения Шредингера выразится в виде суперпозиции функции Бесселя $J_{n+1/2}(\rho)$ и Неймана $N_{n+1/2}(\rho)$ дробного порядка. Из-за квадратичной интегрируемости волновой функции слагаемое с функцией Неймана необходимо отбросить, поэтому радиальная часть волновой функции будет содержать только функцию Бесселя.

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}$$

Вне ямы уравнение для радиальной части может быть записано:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{\varepsilon r} \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0$$

с естественными граничными условиями $R|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. Решение этого уравнения с учетом естественных граничных условий запишется:

$$R_{n,l} \left(\frac{a}{a_0} \right) = A_l \left(\frac{2a}{na_0} \right)^l e^{\frac{-a}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{a_0} \right),$$

где L -обобщённые полиномы Лагерра, $a_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{me^2}$, $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2 \varepsilon^2}$, где n -главное квантовое число.

Поскольку уровни энергии электронов заданы, то из условия непрерывности самой функции и её производной на границе ямы возникают ограничения на размеры ямы:

$$R_{вне,l}(r=a) = R_{внутри,l}(r=a)$$

$$\frac{\partial R_{вне,l}(r)}{\partial r} \Big|_{r=a} = \frac{\partial R_{внутри,l}(r)}{\partial r} \Big|_{r=a}$$

Величина

$$w = \int_a^\infty R_{вне,l}^2(r) r^2 dr / \left[\int_a^\infty R_{вне,l}^2(r) r^2 dr + \int_a^\infty R_{внутри,l}^2(r) r^2 dr \right]$$

определяет вероятность обнаружения частицы вне ямы.

В таблице приведены первые шесть корней численного решения уравнения относительно a при

$l=0, n_1=1$ и вероятность нахождения частицы вне ямы ($V_0 = 0.1\text{эВ}, m = 0.067 \cdot 9.1 \cdot 10^{-28} \text{г}, \varepsilon = 12$):

a/a_0	0	0.205	1.2688743	2.16795	2.97241	3.5147
w	1.0	0.990995	0.677865	0.528902	0.418391	0.180441

при $l=0$ и $n_1=2$

a/a_0	0	0.2045	1.2993	2.780	3.6449	4.4776
w	1.0	0.991	0.6604	0.3766	0.3309	0.27904

при $l=1$ и $n_1=2$

a/a_0	0	0.1665	1.5315	2.3960	3.233	4.0622
w	1.0	0.999918	0.96442	0.861003	0.73036	0.610509

Аналогично можем получить выражения для других $n_1 > 2$. Из полученных выражений следует, что из-за большой протяжённости волновых функций (большого значения a_0) можно ожидать сильного взаимодействия между квантовыми точками, образование молекул наподобие молекулы водорода. На больших расстояниях между квантовыми точками будет наблюдаться взаимодействие типа Ван дер Ваальса.

Оценка спин-орбитального взаимодействия позволяет заключить, что из-за разрыва потенциальной энергии на поверхности ямы поправка к энергии растёт при увеличении радиуса ямы, но все равно остаётся пренебрежимо малой по сравнению с уровнями энергии.

Моделирование процессов теплопроводности в композиционных системах

Бачурина Анна Юрьевна

Гродненский государственный университет

Никитин Александр Викторович, к.т.н.

a.bachurina@grsu.by

Для определения коэффициента теплопроводности композиционной системы наряду с экспериментальными методами широко применяются методы компьютерного моделирования. Дело в том, что коэффициент теплопроводности композиционной системы может существенно меняться при одной и той же концентрации наполнителя. Это происходит вследствие различия в способах заполнения наполнителем исходной матрицы. Использование численных методов позволяет значительно упростить исследование тепловых свойств такой системы.

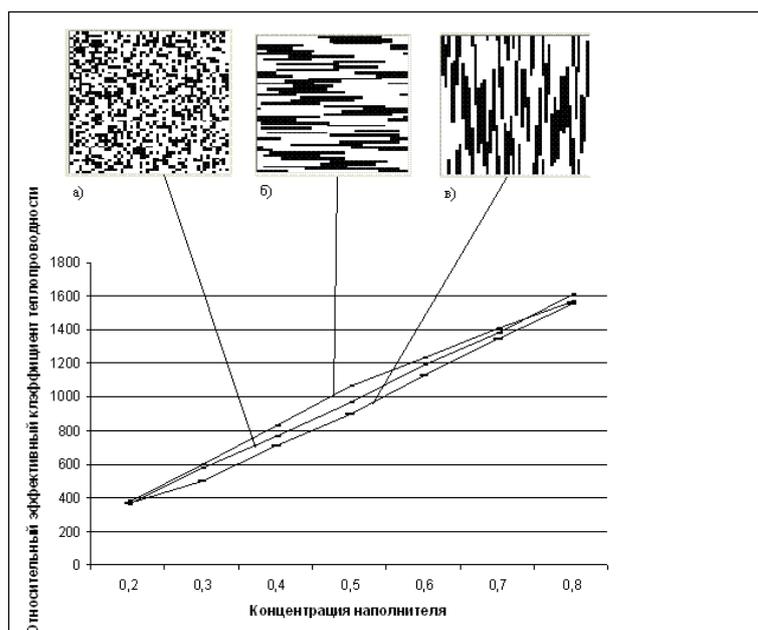


рис. 1. Относительный эффективный коэффициент теплопроводности бинарного композита для трех вариантов структуры наполнителя

Способ определения коэффициента теплопроводности композита основан на моделировании процессов передачи теплоты в нем. Для этого численно решается нестационарное уравнение теплопроводности методом конечных разностей. Суть данного метода состоит в следующем. Вся область протекания теплоты (в данном случае – композиционная система) заменяется расчетной сеткой – дискретным множеством точек. Вместо функции непрерывных аргументов (в данном случае - температуры) вводятся функции дискретных аргументов – сеточные функции, определяемые в узлах сетки. Частные уравнения, входящие в дифференциальное уравнение теплопроводности и граничные условия, заменяются (аппроксимируются) разностными соотношениями.

Композит представляется в виде кубической решетки, ячейки которой могут быть заполнены либо веществом матрицы, либо веществом наполнителя. Вдоль одного из направлений создается градиент температуры. Остальные грани куба теплоизолированы. Задавая распределение температуры в начальный момент времени, рассчитаем ее во все последующие моменты. Зная температурное поле, вычислим средний тепловой поток. Эффективный коэффициент теплопроводности определим по формуле

$$\lambda = \frac{qL}{T_2 - T_1},$$

где λ – эффективный коэффициент теплопроводности, L – длина ячейки куба, вдоль которой создан градиент температуры, $T_2 - T_1$ – разность температур противоположных граней.

На основе изложенного выше метода была разработана компьютерная программа, позволяющая рассчитывать эффективный коэффициент теплопроводности композиционной системы для различных способов генерации наполнителя. Рассматривались следующие варианты формирования структуры наполнителя: а) случайный; б) с продольными волокнами; в) с поперечными волокнами (рис.1).

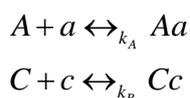
На рис.1 представлены зависимости относительного эффективного коэффициента теплопроводности от концентрации наполнителя при различных способах формирования структуры. Коэффициент теплопроводности матрицы принимаем равным единице. В эксперименте относительный коэффициент теплопроводности наполнителя $\lambda' = 2000$.

Нецентросимметричные ламеллярные структуры в смесях ассоциирующих диблок- и триблоксополимеров

Белоусов Максим Викторович
Московский государственный университет
Belousov@polly.phys.msu.ru

Материалы с наличием макроскопической электрической поляризации проявляют разнообразные полезные свойства, такие как пьезо- и пироэлектрические, а также нелинейную оптическую активность второго порядка. Таким образом, процесс формирования жидкокристаллических нецентросимметричных материалов из молекул, которые в свою очередь являются нецентросимметричными, но не обладают хиральностью, много обсуждался в последние два десятилетия.

В работе рассматривается смесь диблоксополимеров *ac* и триблоксополимеров *ABC*, слои которых способны ассоциировать:



Параметрами задачи являются: k_A, k_B
 Константы термообратимых реакций
 Степень покрытия ассоциирующими группами
 Доля среднего блока В в триблоксополимере ABC
 Длина диблоксополимера N

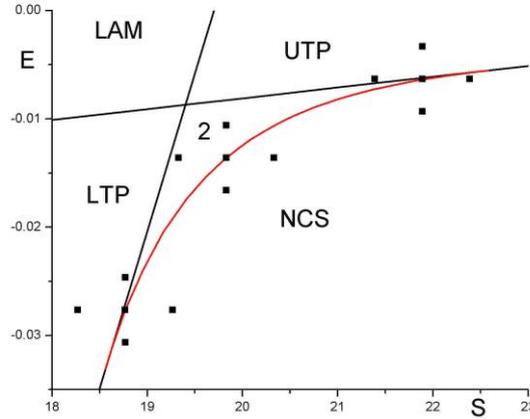
Цель работы: Исследование условий стабильности нецентросимметричной ламеллярной структуры и топологии типа фазового поведения в зависимости от основных параметров

Для теоретического описания системы используется режим сильной сегрегации, приближение Александера-де Жена.

Предполагается, что параметр Флори-Хаггинса χ и пространственная константа термообратимой химической реакции $g=kv$ зависят от температуры:

$$\chi(T) = \frac{\theta}{2T} + a, \quad g(T) = \exp\left(S - \frac{\varepsilon}{T}\right)$$

Итоговый типичный фазовый портрет на плоскости (S, E) представлен на рисунке.



Список публикаций:

- [1] Goldacker, T.; Abetz, V.; Stadler, R.; Erukhimovich, I.; Leibler, L. *Non-centrosymmetric superlattices in block copolymer blends. Nature* 1999, 398, 137-139.
- [2] Prost, J.; de Gennes, P.-G. *The Physics of Liquid Crystals* (Clarendon Press, Oxford) 1974.
- [3] Stupp, S.I.; LeBonheur, V.; Walker, K.; Li, L.S.; Huggins, K.E.; Keser, M.; Amstutz, A. *Supramolecular Materials: Self-Organized Nanostructures. Science* 1997, 276, 384-389.

Решение уравнений теории динамического среднего поля в области низких температур Беляев Павел Юрьевич

Уральский государственный технический университет - УПИ

Мазуренко Владимир Владимирович, к.ф.-м.н.

pbelyayev@gmail.com

Открытый относительно недавно новый класс сильнокоррелированных ферми-систем проявляет огромное разнообразие физических свойств, таких как высокотемпературная сверхпроводимость, Кондо резонанс, тяжелые фермионы, фазовые переходы в квазидвумерных ферми-жидкостях и др. Для теоретического описания подобных многочастичных эффектов, необходимо решать модель Хаббарда (1).

$$H_{\text{Хабб}} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

здесь $C_{i\sigma}^+$ ($C_{i\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона на узле решетки i , t_{ij} - интеграл перескока между узлами i и j , U - локальное кулоновское взаимодействие, n_i - оператор числа частиц. Точное решение модели Хаббарда возможно лишь в случае малого количества частиц. В случае реальных систем исследователи используют различные приближения. Например, в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) решеточная задача для модели Хаббарда сводится к решению эффективной примесной модели Андерсона (2).

$$H_{\text{Анд}} = \sum_{k, \sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \varepsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \sum_{k, \sigma} V_k (c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}) + U f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{k\sigma}$ представляет энергию электрона проводимости металла, ε_f - энергию изолированного состояния примесного атома, V_k - матричные элементы s-d смешивания по Андерсену [3], $f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}$ - плотность d-электронов на примесном узле. Метод DMFT описывает динамику локальных кулоновских электрон-электронных взаимодействий, а также сохраняет конкуренцию между кинетической энергией и кулоновским взаимодействием. Самосогласованное решение можно получить, используя проинтегрированное по k

уравнение Дайсона, связывающее собственно энергетическую часть (СЭЧ) Σ и полную решеточную функцию Грина $G(i\omega_n)$.

$$G(i\omega_n) = \sum_k [i\omega_n + \mu - H(k) - \Sigma(i\omega_n)]^{-1}, \quad (3)$$

Многие многочастичные эффекты проявляют себя только на малых масштабах температур, порядка 10 - 50 К. Из существующих на данный момент методов решения примесной задачи Андерсона в качестве основных можно выделить различные варианты метода квантового Монте-Карло (QMC) и метод точной диагонализации (ED). Известно, что метод QMC позволяет проводить расчёты для состояний системы с высокой температурой более 500К, для него также существует «проблема отрицательного знака», которая сводит на нет вычислительную эффективность этого подхода. Метод ED, основанный на полной диагонализации примесного гамильтониана, способен решать задачу в любом диапазоне температур, однако, из-за ограниченности ресурсов современных компьютеров, становится невозможным проведение расчётов для задач с количеством электронных уровней более $N_s=10$. Для описания многоорбитальных примесей необходимое число электронных уровней хорошо характеризующих среду более 12, такое количество принципиально возможно получить, только используя численную схему Ланцоша, которая описывает систему при $T=0$.

Целью данной работы является дальнейшее развитие метода точной диагонализации для описания низкотемпературных состояний системы (0 – 200 К) с большим количеством электронных уровней в примесной задаче ($N_s > 12$). Для этого метод Ланцоша нахождения основного состояния был заменен на метод Арнольди, который позволяет с минимальными вычислительными затратами вычислять определенный набор собственных значений наименьшей энергии. Очевидно, что при низких температурах вклад от состояний с высокими энергиями пренебрежимо мал, что позволяет использовать данную вычислительную схему для описания низкотемпературной области. Поскольку основной операцией метода Арнольди является умножение матрицы гамильтониана на вектор, то такая схема может быть распараллелена с высокой эффективностью, что даёт возможность проводить расчёты с $N_s=18-20$.

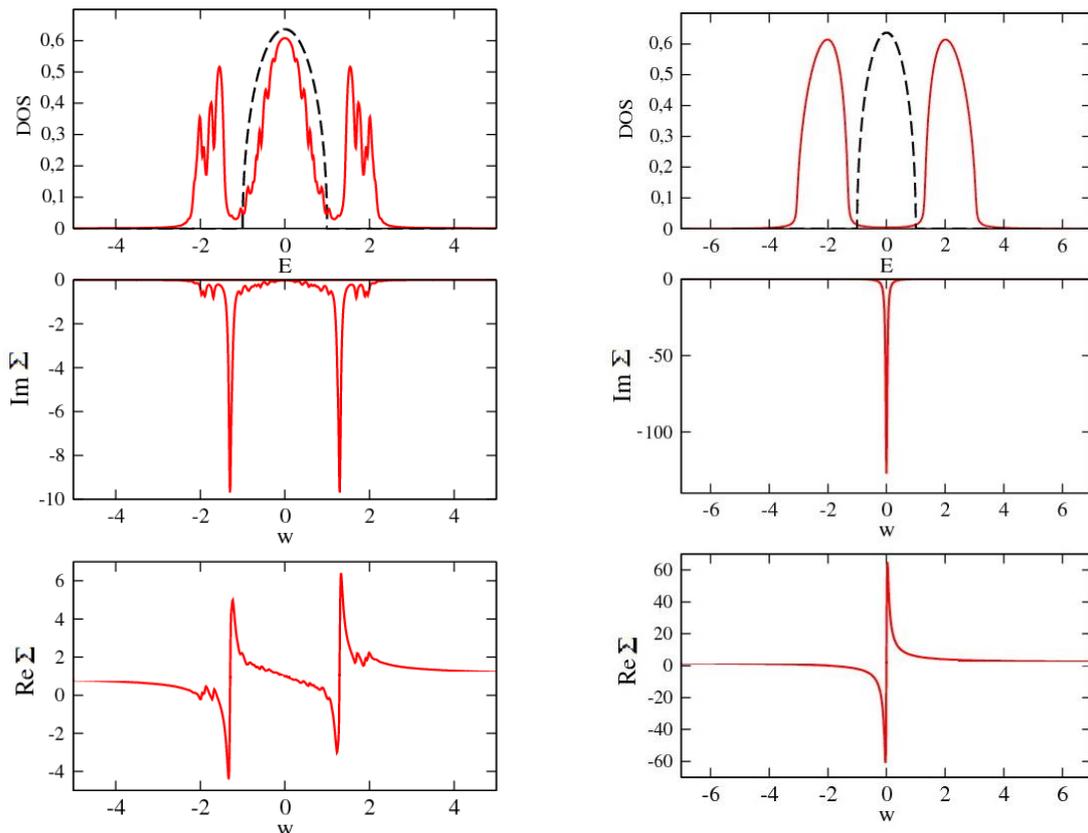


рис. 1. Электронная плотность состояний и СЭЧ для металлической ($U=2$, график слева) и изоляторной ($U=4$, график справа) фазы, полученные из DMFT расчёта для температуры $T = 0,01$. Пунктирная линия соответствует плотности состояний не взаимодействующей системы электронов.

С использованием разработанной численной схемы нами были проведены температурнозависимые тестовые DMFT расчёты, в рамках которых описаны металлические и изоляторные области фазовой диаграммы перехода металл-изолятор для решетки Бете. Результаты представлены на рис.1. Критерием перехода металл-

изолятор непосредственно для $T = 0$ является обращение в ноль квазичастичного веса, однако для конечных температур, как было показано в [4], в качестве критерия перехода используется характерный вид рассматриваемой СЭЧ. Полученные зависимости находятся в хорошем согласии с более ранними результатами ([1], [4]). Это дает возможность для дальнейшего развития численной схемы и проведения исследования реальных систем в рамках метода точной диагонализации.

Работа была выполнена при поддержке гранта «Развитие научного потенциала высшей школы» № 2.1.1/779.

Список публикаций:

- [1] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* 68, 13, 1996.
- [2] C. A. Perroni, H. Ishida, A. Liebsch *Phys. Rev. B* 75, 045125, 2007.
- [3] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 124, 41, 1961.
- [4] [R. Bulla](#), [T. A. Costi](#), [D. Vollhardt](#), *Phys. Rev. B* 64, 045103, 2001.

Оптическая индикация неоднородного состояния в наноструктурном борате FeVO_3

Бессонов Владимир Дмитриевич

Гижевский Борис Александрович, Лошкарёва Наталья Николаевна, Сухоруков Юрий Петрович

Гавико Виталий Семенович, Телегин Андрей Владимирович, Эдельман Ирина Самсоновна

Институт физики металлов УрО РАН

Gizhevskii@imp.uran.ru

Оптические методы являются эффективными методами для исследований неоднородного состояния в оксидах переходных металлов: монокристаллах, композитах с внедренными наночастицами, нанокерамиках и нанопорошках. Например, исследование оптического поглощения монокристаллов, нанокерамики и нанопорошков CuO позволило выявить особенности, связанные с наличием зарядовых неоднородностей, которые усиливались и существенно изменяли форму спектра при переходе CuO в наноразмерное состояние [1]. В настоящем докладе представлены результаты изучения ИК-спектров поглощения и отражения монокристаллов и высокоплотной нанокерамики бората FeVO_3 с целью выявления особенностей спектра, присущих наноструктурному FeVO_3 . С этой целью проведено сравнение оптических свойств наноструктурных образцов FeVO_3 с различной степенью дефектности со свойствами монокристалла. Образцы нанокерамики в виде пластинок толщиной ~ 100 мкм были получены методом кручения под давлением из крупнозернистого порошка FeVO_3 , приготовленного растированием монокристаллов. Давление при деформации сдвига составляло ~ 10 ГПа, углы поворота наковален равнялись 60° , 180° , 215° и 360° . Углы поворота наковален определяли размеры зерна кристаллитов и степень дефектности образца.

Показано, что в спектре отражения монокристалла FeVO_3 наблюдаются интенсивная полоса при ~ 7.83 мкм (1277 см^{-1}) и две полосы при ~ 23.5 мкм (425 см^{-1}) и ~ 26.4 мкм (388 см^{-1}). Близкая по энергии интенсивная полоса при 1210 см^{-1} наблюдалась в рамановских спектрах. Она связана с E_g фоновой модой молекулы VO_3^{3-} [2]. Глубокий минимум перед началом фоновый спектр монокристалла FeVO_3 является характерным для высокоомных полупроводников. Нанокерамика FeVO_3 , полученная при угле сдвига 60° , имеет вид спектра отражения подобный спектру монокристалла, но с меньшей величиной отражения. Увеличение угла сдвига при получении нанокерамики приводит к дальнейшему уменьшению интенсивности, размытию полос отражения и заполнению минимума перед фоновым спектром. Можно предположить, что увеличение степени деформации нанокерамики приводит к частичной аморфизации поверхностного слоя.

Анализ спектров поглощения, отражающих свойства объема образца, показывает, что монокристаллический FeVO_3 является прозрачным в области 0.8 - 6.0 мкм с коэффициентом поглощения $\sim 50 \text{ см}^{-1}$, в то время как в наноборатах поглощение при $\lambda < 2.5$ мкм на порядок выше, чем для монокристалла. Рост поглощения в нанокерамике бората может указывать на перераспределение спектральной плотности, аналогично наблюдаемому в нанокристаллическом CuO , в котором оно объяснялось образованием областей с высокой проводимостью в диэлектрической матрице FeVO_3 [1]. По-видимому, появление таких проводящих областей ответственно и за заполнение минимума в спектре отражения нанокерамики. В целом, вид спектров поглощения нанокерамики боратов в отличие от спектров отражения практически не зависит от степени деформации. При длине волны 8.37 мкм (1195 см^{-1}) наблюдается пик полосы поглощения, положение которого соответствует частоте поперечных колебаний высокоэнергетического фонона.

Таким образом, ИК-спектры отражения и поглощения могут указывать на появление неоднородных состояний в наноструктурных образцах FeVO_3 , которые усиливаются с ростом степени дефектности образца.

Работа поддержана РФФИ №08-03-99071офи, программой ОФН РАН и УрО РАН «Новые материалы и структуры», интеграционным проектом УрО и СО РАН «Спин-зависимые размерные эффекты в квазидвумерных, планарных и объемных наноматериалах на основе переходных металлов и их оксидов».

Список публикаций:

- [1] [1] Gizhevskii B. A., Sukhorukov Yu. P., Loshkareva N. N. et al. // *J.Phys.: Cond. Matt.* 2006. V. 17. P. 499.
 [2] [2] Shepherd I. W. // *J. Appl. Phys.* 1971. V. 42. P. 1482.

Исследование структуры и стабильности наносостояния диоксида титана методом компьютерного моделирования

Бизюк Алексей Олегович

Амурский государственный университет

Чибисов Андрей Николаевич, к.ф.-м.н.

inial-sin-kerin@rambler.ru

Объектом нашего исследования является нанокристаллическое состояние диоксида титана. Диоксид титана (TiO_2) является важным оксидным материалом, полезными свойствами которого являются его высокий коэффициент отражения ультрафиолетовых лучей, а также замечательные каталитические особенности, благодаря чему он широко используется в качестве катализатора, компонента солнечных батарей, а также чувствительного элемента детекторов газов. Полупроводниковые свойства TiO_2 позволяют использовать его в фотокатализе, однако большая ширина запрещенной зоны (порядка 3 эВ) приводит к избирательному поглощению в области солнечного спектра (от ультрафиолетовой области до 400 нм). $(\text{TiO}_2)_n$ ($n=1-3$).

Расчеты электронной структуры выполнялись с помощью программного пакета ABINIT, реализующего метод функционала электронной плотности. Псевдопотенциалы для атомов титана и кислорода конструировались с помощью программы FN198PP по методике Трульера – Мартинса (Troullier-Martins). Расчеты объемно-корреляционной энергии выполнялись в приближении локальной плотности с учетом спина (LSDA) с функционалом Педью-Янга (Perdew-Wang, PW92). Энергия обрезания набора плоских волн равнялась 816 эВ. Для расчета наночастиц использовалась суперячейка с геометрией соответствующей простой кубической ячейки, с параметром ячейки равным 544 Å. и с одной k-точкой (0; 0; 0) в зоне Бриллюэна. Проводилась самосогласованная оптимизация структуры, сходимость межатомных сил соответствовала значению порядка 0.005 eV/Å.

В процессе изучения нами были получены геометрические структуры (рис. 1), значения НОМО-LUMO щелей и удельных энергий связи для нанокластеров TiO_2 , Ti_2O_4 и Ti_3O_6 .

В таблице 1 представлены значения ширины запрещенной зоны для TiO_2 , Ti_2O_4 и Ti_3O_6 частиц. Экспериментальные значения запрещенной щели для TiO_2 , Ti_2O_4 и Ti_3O_6 частиц и рассчитанные удельные энергии связи атомов в кластере представлены в таблице:

Кластер	НОМО-LUMO щель, eV	Эксп. значение, eV	$E_{\text{св}}$, эВ/ат
TiO_2	2.18	2.22 ± 0.10	-4.72845
Ti_2O_4	2,30	2.59 ± 0.10	-5.79801
Ti_3O_6	2.29	2.26 ± 0.10	-6.02069

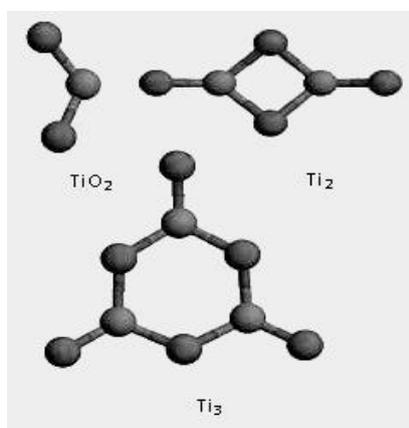


рис. 1. Структура нанокластеров TiO_2 , Ti_2O_4 и Ti_3O_6 .

Также нами построено распределения полной плотности электронных состояний нанокластеров диоксида титана (рис. 2), где E_f – уровень Ферми,

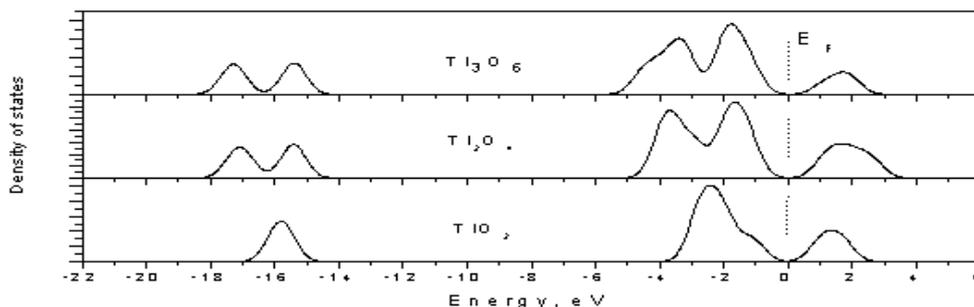


рис. 2. Плотность состояний для кластеров $(TiO_2)_n$ ($n=1-3$)

Значения ширины запрещённой зоны незначительно отличаются от эксперимента, что обусловлено особенностями метода функционала электронной плотности. Таким образом, мы можем свободно применять данный метод для расчёта энергетических и геометрических характеристик, а также для оценки изменений ширины запрещённой зоны при изменении величины кластера. Полученные результаты позволят лучше понять природу химических и физических свойств нанокластеров диоксида титана и лягут в основу новых исследований.

Данная работа поддержана Президиумом ДВО РАН.

Получение наночастиц серебра методом восстановления из раствора

Бугаева Инна Александровна

Тимофеева Екатерина Юрьевна

Кемеровский государственный университет

Звиденцова Надежда Семеновна, к.х.н.

inkas88@bk.ru

Коллоидные металлы занимают особое место в современной теории вещества. Повышенный интерес к этим объектам обусловлен уникальными свойствами этих образований. Свойства металлических коллоидов, а следовательно, и материалов на их основе в значительной степени определяются распределением частиц по размерам, которое в свою очередь, зависит от метода и условий получения.

При этом одной из важнейших проблем является синтез достаточно стабильных наночастиц, в течение длительного времени сохраняющих высокую химическую или биологическую активность. Одним из основных методов получения наноразмерных частиц является метод химического восстановления из растворов. Данный метод используется главным образом для синтеза частиц серебра.

В настоящей работе проведено исследование влияния температуры среды на дисперсионные характеристики наночастиц серебра. Методика получения гидрозолей серебра основана на восстановлении нитрата серебра таннином в присутствии буферного раствора тетрабората натрия и гидроксида натрия (рН = 9,8). К 200 мл дистиллированной воды добавляли 10 мл буферного раствора, 1 мл раствора таннина, затем, при интенсивном перемешивании, со скоростью 1,3 мл/мин вводился 1 мл раствора $AgNO_3$. Синтез проводился при пяти значениях температур в интервале от $+4^\circ C$ до $+70^\circ C$. Размер и форму частиц определяли с помощью электронной микроскопии. Полученные металлические частицы размером 13 нм имеют сферическую форму и узкое распределение по размерам (рис.1).

В качестве удобного метода контроля за формированием наночастиц использовался спектрофотометрический метод. Спектры поглощения образующихся частиц регистрировали на спектрофотометре СФ-56 в области 300-700 нм, при этом кварцевую кювету с длиной оптического пути 1 см наполняли исходным раствором, а кювету сравнения – дистиллированной водой.

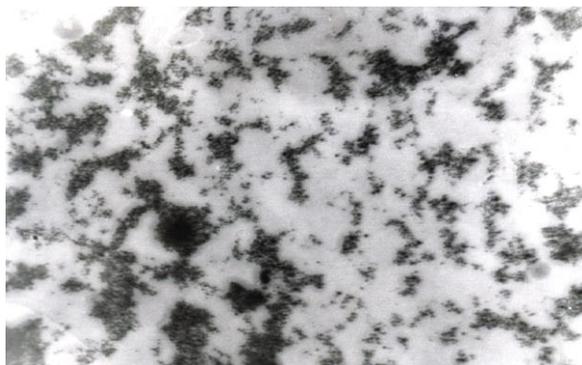


рис.1. Микрофотография наночастиц серебра, полученных при $T = 20^\circ \text{C}$.

В оптических спектрах наблюдаются характерная для коллоидного серебра плазменная полоса поглощения с $\lambda = 410 \text{ нм}$ (рис.2, а), что соответствует поглощению частиц серебра размером несколько нанометров. При повышении температуры наблюдается увеличение оптической плотности, что, возможно, связано с увеличением числа частиц.

Исследовалась стабильность полученных гидрозолей серебра. На кинетической кривой в координатах оптической плотности в максимуме поглощения от времени хранения золя (рис.2, б) наблюдается незначительное снижение интенсивности поглощения $D_{\text{макс}}$ без смещения, что свидетельствует о стабильности частиц серебра.

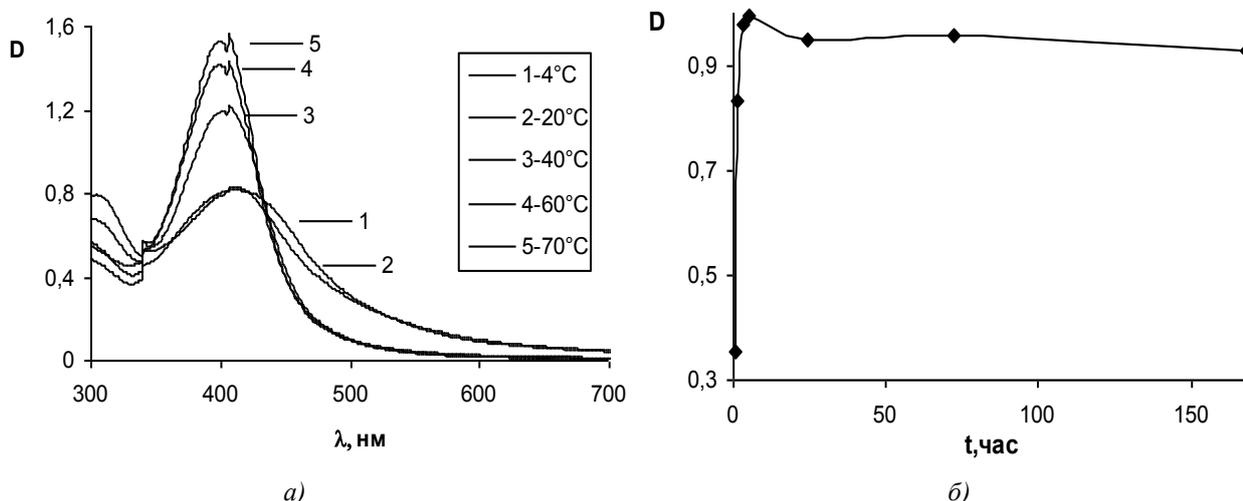


рис. 2. а) Оптические спектры гидрозолей серебра, полученных при различных температурах; б) кинетическая кривая изменения оптической плотности ($D_{\text{макс}}$) от времени хранения гидрозоля серебра, полученного при $T = 20^\circ \text{C}$.

Таким образом, в работе проведено сравнительное исследование условий получения наночастиц серебра в водном растворе методом химического восстановления при различных значениях температуры среды. Показано, что полученные гидрозоли серебра обладают высокой стабильностью.

О влиянии температуры на смачивание расплавом $\text{Fe}_{80}\text{V}_{20}$ подложек из BeO и Al_2O_3

Валеева Лилия Ильхамовна

Удмуртский государственный университет

Бельтюков Анатолий Леонидович

bal1973@mail.ru

Многочисленные исследования структурно-чувствительных свойств металлических расплавов указывают на аномальное поведение их температурных и концентрационных зависимостей. Однако противоречивость экспериментальных результатов, как по температуре, так и характеру проявления аномалий и малая информативность прямых дифракционных методов исследования структуры не дает возможности сделать однозначные выводы о причинах возникновения аномалий. Отмечается, что в некоторых случаях

аномалии политерм могут быть вызваны методическими причинами. Поскольку все измерения проводятся при высоких температурах, и расплав во время эксперимента находится в контакте с огнеупорными материалами (тигель, подложка и т.п.), то представляет интерес исследование влияния температуры на их взаимодействие. Оценить взаимодействие расплав – огнеупор можно непосредственно по углу смачивания.

В качестве объектов исследования были выбраны сплав $Fe_{80}B_{20}$ и подложки из BeO и Al_2O_3 . BeO и Al_2O_3 – это огнеупорные материалы, которые наиболее часто используются для изготовления посуды (тигли, чашки, подложки и т.д.) для высокотемпературных исследований свойств расплавов.

Угол смачивания (θ) определяли методом лежащей капли. При этом каплю расплава лежащую на горизонтальной пластинке фотографировали на цифровой фотоаппарат и полученное изображение обрабатывали с помощью программы “Компас 3D V8”. Погрешность в определении угла смачивания составляет не более 5%. Измерения температурных зависимостей проводили в режимах нагрева и последующего охлаждения от t_L до $1650^\circ C$ с шагом $20^\circ C$ после изотермической выдержки на каждой температуре в течение 20 минут. Кроме этого проводили измерения θ в течение длительных (до 180 мин) изотермических выдержек при различных температурах. Все исследования проводили в защитной атмосфере высокочистого гелия.

Вблизи температуры плавления ($1250^\circ C$) угол смачивания расплавом $Fe_{80}B_{20}$ подложек из BeO и Al_2O_3 примерно одинаков и равняется 150 ± 5 град. С увеличением температуры до $1600^\circ C$ значения угла θ уменьшаются до 120 град. Характер температурных зависимостей угла смачивания является немонотонным. В режиме нагрева наблюдается относительно резкое уменьшение угла смачивания (на 20%) расплава подложки из BeO в интервале температур $1350-1420^\circ C$. При последующем охлаждении на политерме наблюдается резкое увеличение угла смачивания в этом же интервале температур. Значения угла θ , полученные в режимах нагрева и охлаждения, совпадают (гистерезис отсутствует). На температурной зависимости угла смачивания расплавом подложки из Al_2O_3 при нагреве также наблюдается относительно резкое уменьшение его значений в интервале $1325-1400^\circ C$. В режиме охлаждения угол θ на подложке из Al_2O_3 практически не меняется. В этом случае в режиме охлаждения наблюдается гистерезис угла смачивания, который сохраняется вплоть до кристаллизации капли.

Исследования временных зависимостей угла смачивания показали, что значения угла θ при $1300^\circ C$ и $1500^\circ C$ с течением времени практически не изменяются. Снижение значений угла смачивания при изотермической выдержке наблюдается в области резкого снижения θ на политерме (вблизи $1400^\circ C$). Это дополнительно указывает на то, что температурная зависимость угла смачивания является следствием изменения температуры, а не длительности эксперимента (временем контакта расплава и подложки).

Одним из возможных объяснений резкого уменьшения угла смачивания при нагреве является уменьшение в этой области температур поверхностного натяжения расплава, что сопровождается уплощением капли (уменьшением ее высоты и увеличением экваториального диаметра) и увеличением площади контакта расплава с подложкой. Температурный интервал с резким уменьшением угла смачивания удовлетворительно согласуется с температурами аномалий обнаруженных ранее на политермах структурно-чувствительных свойств расплава $Fe_{80}B_{20}$, в частности, вязкости [1], которые, предположительно, обусловлены структурным превращением в жидком сплаве.

Возможной причиной гистерезиса температурной зависимости угла смачивания расплавом подложки из Al_2O_3 является деформация твердой поверхности на периметре смачивания в результате их взаимодействия. Взаимодействие капли с подложкой при нагреве усиливается, и как следствие капля в месте пятна контакта как бы «закапывается» в образующееся углубление. Это может вызвать уменьшение угла θ , поскольку капля все больше растекается по подложке.

Список публикаций:

[1] Ладьянов В.И., Бельтюков А.Л., Шишмарин А.И. // *Расплавы*. 2005. № 4. С. 34-40.

Микроскопический анализ электронной поляризации в мультиферроиках

Валентюк Мария Вячеславовна

Уральский государственный технический университет

Мазуренко Владимир Владимирович, к.ф.-м.н.

valentyuk@mail.ru

Мультиферроики относятся к классу соединений, в которых экспериментально наблюдаются одновременно как магнитные, так и ферроэлектрические переходы. Наибольший интерес представляют

системы, в которых температуры переходов в электрических и магнитных подсистемах одного порядка по величине, что открывает возможности широкого технологического применения. Например, использование подобных систем для изменения электронной поляризации системы, помещая ее во внешнее магнитное поле. К таким соединениям относятся оксиды марганца YMnO_3 и LuMnO_3 , для которых температура магнитного перехода (85K), находится в том же диапазоне, что и температура электронной поляризации (от 10K до 300K).

К настоящему времени существуют различные модели микроскопического объяснения электронных свойств мультиферроиков с помощью эффектов изотропных и анизотропных взаимодействий. Целью работы является изучение электронной и магнитной структуры YMnO_3 в диапазоне температур от 10K до 300K в гексагональной фазе и описания изотропных обменных механизмов в рамках модели Гейзенберга:

$$H_s = \sum_{i,j} J_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (1)$$

где J_{ij} - обменный интеграл, \vec{S}_i - вектор спина i -ого атома.

Для этого были проведены расчеты, основанные на методе локальной спиновой электронной плотности для структурных фаз, соответствующих различным температурам. Кристаллическая структура YMnO_3 изображена на *рис.1*.

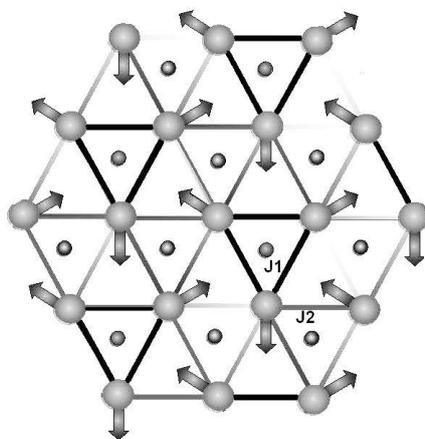


рис.1. Схематическое изображение гексагональной фазы структуры YMnO_3 . Большими сферами обозначены атомы марганца, малые сферы представляют атомы кислорода. Стрелками обозначены направления смещения атомов Mn при понижении температуры ниже точки Нееля ($T_N=75\text{K}$).

Мы промоделировали различные типы магнитных конфигураций атомов марганца. Было получено, что антиферромагнитная конфигурация представляется более энергетически выгодной, чем ферромагнитная. Оказалось, что магнитный момент атома Mn равен $3,6\mu_B$, что близко магнитному моменту $4\mu_B$, соответствующему спину $S=2$, который наблюдается экспериментально.[2] Существующую разницу можно объяснить за счет гибридизации между атомом кислорода и атомом марганца. Оценка распределения электронной плотности показала, что состояния на уровне Ферми формируются в основном за счет 3d орбиталей атомов марганца.

Следующим шагом исследования стало вычисление параметров изотропного обменного взаимодействия для данного соединения. Полученные параметры ($J_1=2,8\text{мэВ}$ и $J_2=4,24\text{мэВ}$) находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами. Как и в большинстве оксидов переходных металлов, данные магнитные взаимодействия являются следствием сверхобменных процессов с участием орбиталей атомов кислорода, лежащих между атомами марганца (*рис.1*).

В дальнейшем интерес представляет расчет параметров анизотропного обменного взаимодействия $\vec{D}_{ij} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$ и анализ релятивистских и нерелятивистских вкладов в описание электронной поляризации данной системы.

Данная работа была выполнена при поддержке гранта «Развитие научного потенциала высшей школы» №2.1.2.779

Список публикаций:

- [1] A.S.Moskvin and S.-L.Dreshler Microscopic mechanism of spin-dependent electric polarization in 3d-oxides // *Phys.Rev.B. Vol.78 024102 (2008)*
 [2] Seongsu Lee, A.Pirogov, J.-G. Park Giant magneto-elastic coupling in multiferroic hexagonal manganites // *Letters to Nature 29 November 2007.*

Фазоны в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga
Валиуллина Алия Мухарамовна
Челябинский государственный университет
Бучельников Василий Дмитриевич, д.ф.-м.н.
valiullina85@mail.ru

Потребность промышленности в новых функциональных материалах обуславливает активные исследования по поиску новых соединений с необычными свойствами. К одним из таких соединений можно отнести сплавы Гейслера Ni-Mn-Ga, в которых наблюдается ряд интересных эффектов таких как эффект памяти формы и гигантский магнитокалорический эффект [1]. Эффект памяти формы позволяет реализовать большие обратимые деформации за счет структурных превращений мартенситного типа, физика которых на микроскопическом уровне еще не достаточно понятна. Поэтому детальное изучение различных структурных и межуструктурных превращений в данных сплавах привели бы к существенному вкладу в теорию мартенситных превращений. Структурным превращениям мартенситного типа, наблюдаемым в широком классе материалов, предшествуют переходные явления. К одному из таких явлений относится формирование мягких мод колебаний в решетке.

Результаты ранних экспериментальных исследований предмартенситных явлений в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga показали, что поперечная акустическая фоннная мода TA_2 в направлении $[110]$ демонстрирует заметное смягчение на отличном от нуля волновом числе. Более поздние эксперименты показали, что в данных сплавах имеется еще одна мода колебаний, которая стремится к нулю также на отличном от нуля волновом числе [2]. Кроме того, оказалось, что данная мода может принимать нулевые значения при двух значениях волновых чисел. В работе [2] было высказано предположение, что эта новая мода колебаний является фазонной. До сих пор теоретического объяснения существования такой моды в сплавах Гейслера не существует. В связи с этим, представляет интерес рассмотреть теоретическую модель, которая позволила бы объяснить наблюдаемую экспериментально новую фоннную моду. В данной работе предложена простая феноменологическая модель для объяснения наблюдаемой фазонной моды.

Первопринципные расчеты показывают, что за смягчение фоннных мод в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga ответственны атомы Ni. Последние атомы в этих сплавах образуют линейные цепочки вдоль направления $[110]$, в котором как раз и наблюдается смягчение мод при предмартенситном переходе. В связи с этим в работе рассматривается классическая одномерная модель цепочки взаимодействующих атомов и спектр ее колебаний при учете взаимодействия между несколькими ближайшими атомами. Впервые такая задача была рассмотрена в работе [1], в которой учитывалось взаимодействие соседних атомов вплоть до третьих и ангармонические слагаемые в энергии. В ней, в частности, были получены и фазонные моды. В данной работе в энергии цепочки учитывается взаимодействие атомов вплоть до пятых соседних атомов:

$$H = \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} \alpha (u_n - u_{n-1})^2 + \frac{1}{2} \beta (u_n - u_{n-2})^2 + \frac{1}{2} \delta (u_n - u_{n-3})^2 + \frac{1}{2} \sigma (u_n - u_{n-4})^2 + \frac{1}{2} \kappa (u_n - u_{n-5})^2 + \frac{1}{4} \gamma (u_n - u_{n-1})^4 \right] \quad (1)$$

где $\alpha, \beta, \delta, \sigma, \kappa$ - коэффициенты взаимодействия между первыми, вторыми, третьими, четвертыми и пятыми соседними атомами, γ - коэффициент ангармонизма во взаимодействии с первыми атомами системы, u_n - смещение атомов.

Одним из равновесных состояний гамильтониана (1) является состояние с $u_n^0=0$. Дисперсионное уравнение для данного положения равновесия имеет вид

$$mw^2 = 4 \sin\left(\frac{1}{2}q\right)^2 \left[\alpha + 4\beta + 9\delta + 16\sigma + 25\kappa - 4 \sin\left(\frac{1}{2}q\right)^2 (\beta + 6\delta + 20\sigma + 50\kappa) + 16 \sin\left(\frac{1}{2}q\right)^4 (\delta + 8\sigma + 35\kappa) - 64 \sin\left(\frac{1}{2}q\right)^6 (\sigma + 10\kappa) + 256\kappa \sin\left(\frac{1}{2}q\right)^8 \right] \quad (2)$$

Численное решение дисперсионного уравнения (2) при значениях параметров энергии (1): $\alpha=4.81, \sigma=-1.50, \beta=-4.26, \kappa=1.00, \delta=3.00$ приведено на (рис.1).

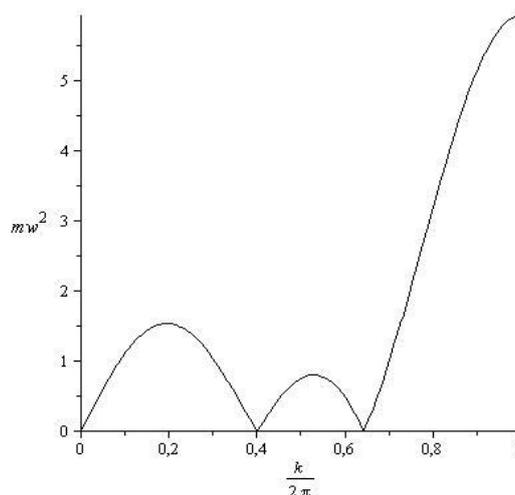


рис.1. Спектр колебаний линейной цепочки при учете взаимодействия пяти ближайших соседей

Из (рис.1) следует, что предложенная простая модель линейной цепочки позволяет качественно описать результаты экспериментального наблюдения аномального поведения новой фазонной моды колебаний в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga.

Список публикаций:

- [1]. P. Entel, V.D. Buchelnikov, V.V. Khovailo, A.T. Zayak, W.A. Adeagbo, M.E. Gruner, H.C. Herper and E.F. Wassermann. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 39 (2006) 865-889.
 [2]. S. M. Shapiro, P. Vorderwisch, K. Habicht, K. Hradil, and H. Schneider, *EPL* 77, 56004 (2006).
 [3]. T. Janssen and J.A. Tjon, *Phys. Rev. B* 25, 3767 (1982).

Получение ультрадисперсных частиц методом химического осаждения из растворов

Владимиров Александр Александрович

Титов Федор Вадимович, Дзягилев Денис Владимирович, Нарушев Андрей Сергеевич, Шарасва Ульяна Владимировна

Кемеровский государственный университет

Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.

sechkar@kemsu.ru

Получение частиц в нанокристаллическом состоянии различных химических соединений и изучение физико-химических свойств, одна из основных задач современного материаловедения. Для этих целей в последнее время применяют способы получения частиц в коллоидных системах. Например, химическое осаждение из водных растворов.

Данная работа посвящена получению ультрадисперсных частиц AgI в водных растворах. Среди галогенидов серебра AgI единственное полиморфное соединение. При осаждении из растворов в избытке ионов Ag^+ получают, преимущественно кристаллы, с гранецентрированной кубической решеткой, а в избытке ионов I⁻, преимущественно, с гексагональной решеткой. Кроме того, ряд экспериментальных данных показывает, что существование той или иной решетки связано с наличием структурных фазовых переходов для малых частиц. Так, в зависимости от размера частицы AgI имеют разную (гексагональную при $r < 20$ nm и кубическую при $r > 30$ nm) структуру.

В работе проведено исследование влияния температуры кристаллизации и pI на размер коллоидных частиц. Для получения дисперсий галогенидов серебра используется способ контролируемой двухструйной кристаллизации (КДК), на лабораторной установке, схема которой представлена на (рис. 1). Реактор (1), содержащий требуемое количество водно-желатинового раствора, помещен в термостат (11). Температуру и значение pI реакционной смеси доводили до заданной величины. Перемешивание осуществляется с помощью мешалки (2) с насадкой типа «беличье колесо». Кристаллизацию вели, вводя в реактор одновременно и с одинаковой скоростью растворы нитрата серебра и галогенида калия из мерных емкостей (4, 5) с помощью перистальтического насоса (3). Образующиеся ультрадисперсные частицы коалесцируют между собой до тех пор, пока не будет достигнут достаточный потенциал отталкивания. Минимальный радиус, необходимый для стабилизации, обычно составляет порядка 10^{-6} см. Однако если частицы имеют низкий поверхностный заряд, то этот размер еще увеличивается. При смешивании реагентов поверхностный заряд частиц зависит от относительной концентрации ионов Ag^+ или I⁻ в растворе. Частицы, расположенные в области,

соответствующей изоэлектрической точке, будут продолжать коалесцировать, пока не уйдут из этой области, поскольку большинство частиц формируется в условиях изоионного окружения (т.е. вблизи изоионной точки).

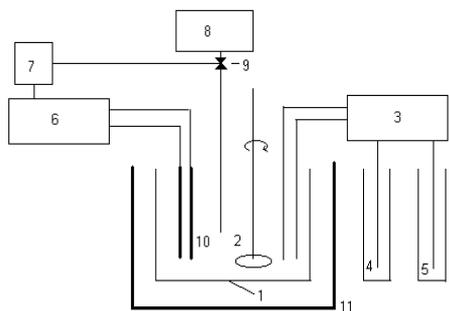


рис. 1 Схема установки для синтеза AgHal дисперсий

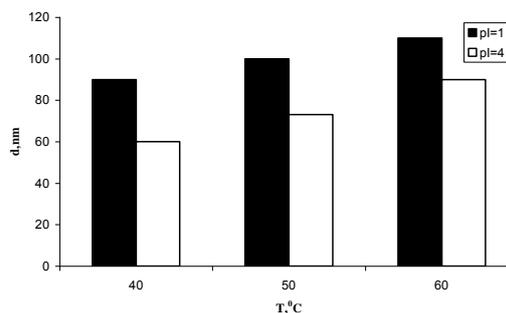


рис. 2 Зависимость среднего диаметра ультрадисперсных частиц AgI от температуры и pH.

Средний диаметр образующихся в результате синтеза AgI частиц определяли спектрально-турбидиметрическим методом. В основе метода лежит явление ослабления интенсивности светового потока при его прохождении через коллоидный раствор, содержащий малые непоглощающие свет частицы. Это ослабление обусловлено рассеянием света коллоидным раствором во всех направлениях. Измерение оптической плотности проводилось на фотокolorиметре ФЭК-56М.

Как видно из представленных результатов на (рис. 2) температура является одним из основных факторов, определяющим размер ультрадисперсных частиц AgI, создаваемых методом контролируемой двухструйной кристаллизации. Было установлено, что с ростом температуры кристаллизации AgI происходит увеличение среднего размера образующихся частиц. Изменение pH реакционной смеси приводит к уменьшению среднего размера частиц.

Особенности дезарядки плёнок ПВДФ при их радиационной карбонизации мягким рентгеновским облучением и ионной бомбардировкой

Вязовцев Андрей Викторович

Евсюков Сергей Евгеньевич, Грибов Игорь Васильевич, Москвина Наталья Анатольевна, Кузнецов Вадим Львович
Южно-Уральский государственный университет

Песин Леонид Абрамович

RV9WHK@mail.ru

Для многих полимеров наблюдается явление радиационной деградации при воздействии излучений и потоков частиц различной природы. Исследования особенностей данного явления для поливинилиденфторида проведены в работах [1-5]. Поливинилиденфторид обладает сочетанием уникальных свойств: пьезоэлектричество, высокое электросопротивление, инертность, биосовместимость, термостойкость. Количество CH_2 и CF_2 групп в нём одинаково. В работах [4, 5] показано, что при радиационной деградации ПВДФ происходит карбонизация его поверхности. Это явление может найти широкое применение в физике и технике в качестве получения новых материалов на основе поливинилиденфторида, в том числе с контролируемой электрической проводимостью [6]. Представляемое исследование особенностей ФЭС карбонизованной рентгеновским излучением и пучком ионов аргона поверхности ПВДФ проводилось с целью разработки методов направленной и контролируемой лучевой модификации материала и изучения возможности синтеза одномерной аллотропии углерода – карбина на полимерной подложке. Такие продукты радиационной карбонизации ПВДФ перспективны для применения в твердотельной, эмиссионной и оптической электронике [7], химии, физике.

Плётки ПВДФ помещались в сверхвысоковакуумную камеру фотоэлектронного спектрометра ИФМ-4, где происходила модификация их поверхности вследствие бомбардировки ионами аргона и Al K_α облучения. Одновременно Al K_α фотоны использовались для возбуждения фотоэлектронных и оже-спектров.

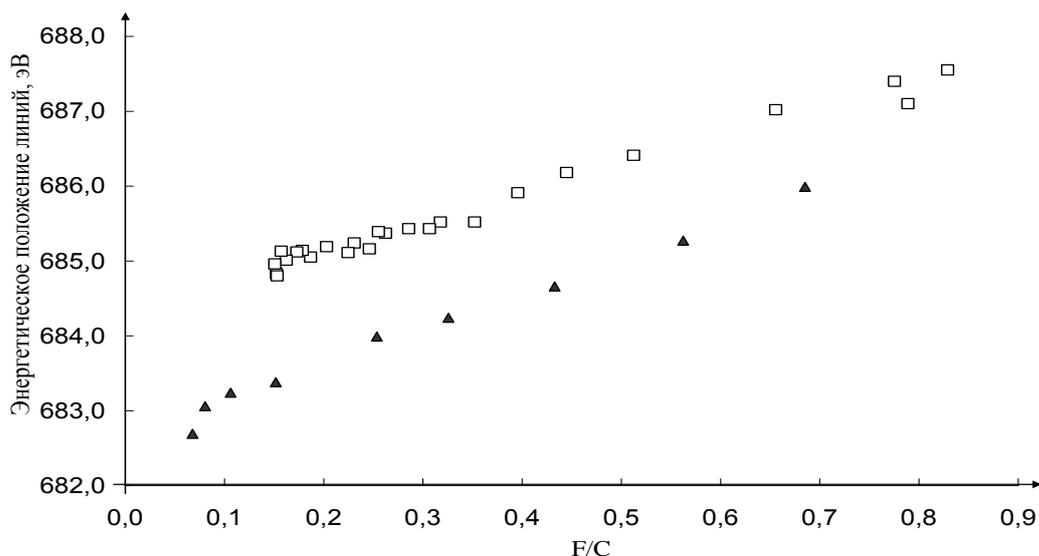


рис. 1 Зависимость энергетического положения F1s-линий от F/C:
 ▲ – при карбонизации ионами, □ – при рентгеновской карбонизации

Косвенную информацию об электрических свойствах модифицированной поверхности полимера может дать изучение электростатической зарядки образца при фотоэлектронной спектроскопии, обусловленной тем, что часть электронов выходят в вакуум вследствие фотоэффекта. Этот эффект проявляется в наблюдаемых сдвигах энергии связи пиков фотоэлектронных и оже-полос. При карбонизации полимера [6] его проводимость увеличивается, и, следовательно, большее число электронов способно диффундировать из глубины образца и областей, не подвергнутых ионизирующему излучению, частично или полностью компенсируя накопившийся поверхностный положительный заряд. Разная зарядка при одинаковых концентрациях остаточного фтора в продуктах радиационной деградации ПВДФ при различных карбонизирующих воздействиях будет свидетельствовать о различиях атомного упорядочения углерода в структурах, сформированных рентгеновским облучением и ионной бомбардировкой. Для оценки проводящих свойств карбонизованного слоя ПВДФ измерялся сдвиг F1s линий, а их интенсивность позволяла измерять относительную концентрацию остаточного фтора F/C. На рис. 1 представлены энергетические положения этих линий от F/C.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Челябинской области (проекты 07-02-96008p_урал_a, 016.02.06-08.AX).

Список публикаций:

- [1] Duca M.D., Plosceanu C.L., Pop T. Effect of X-rays on poly(vinylidene fluoride) in X-ray photoelectron spectroscopy.// J. Appl. Polym. Sci. 1998 (68) №13, p. 2125-2129.
- [2] Le Moel A., Duraud J.P., Balanzat E. Modifications of poly(vinylidene fluoride) (PVDF) under high energy heavy ion, X-ray and electron irradiation studied by X-ray photoelectron spectroscopy.// Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1986; N18(1), p. 59-63.
- [3] Okudaira K.K., Yamane H, Ito K, Imamura M, Hasegawa S, Ueno N. 2002 Photodegradation of poly (tetrafluoroethylene) and poly(vinylidene fluoride) thin films by inner shell excitation.// Surf. Rev. Lett. 9(1), 335-340.
- [4] Morikawa E, Choi J, Manohara H.M., Ishii H, Seki K, Okudaira KK, Ueno N. 2000 Photoemission study of direct photomicro machining in poly(vinylidene fluoride).// J. Appl. Phys. 87(8), p. 4010-4016.
- [5] Chebotaryov S.S., Volegov A.A., Pesin L.A., Evsyukov S.E., Moskvina N.A., Gribov I.V., Kuznetsov V.L. Modification of X-ray excited photoelectron and C KVV Auger spectra during radiative carbonization of poly(vinylidene fluoride) // Physica E: Low dimensional systems and nanostructures. Elsevier science. 2007. V 36 (2). – p. 184-189.
- [6] Ferraria A.M, da Silva JDL, do Rego AMB. 2003 XPS studies of directly fluorinated HDPE problems and solutions// Polymer 44, p. 7241-7249.
- [7] Коробова Ю.Г., Бабаев В.Г., Хвостов В.В., Гусева М.Б. Эмиссионные характеристики волокон на основе линейно-цепочечного углерода. //Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия, 2008 №1, с. 33-39

Упругооптические свойства ортоферритов

Ганеев Иршат Тагирьянович

Латыпов Дамир Гакилович

Башкирский государственный университет

Сагаткиреева Минигуль Байгужевна, д.ф.-м.н.

irshatufa@rambler.ru

Редкоземельные ортоферриты являются перспективными материалами для новой техники. Их применение требует детального исследования природы формирования упругих, магнитоупругих и оптических свойств.

В модели жестких ионов нами проведен расчет упругих свойств сложных многоподрешеточных соединений – редкоземельных ортоферритов. При этом получено удовлетворительное количественное описание широкого набора имеющихся экспериментальных данных по упругим постоянным, частотам длинноволновых оптических колебаний, активных в комбинационном рассеянии и инфракрасном поглощении, статической диэлектрической проницаемости. Найденны численные значения компонент тензора внутренних напряжений, определяющего вклад скрытых смещений подрешеток в различные физические явления. Показано, что учет скрытых смещений приводит к перенормировке упругих, магнитоупругих и упругооптических констант, достигающей в ряде случаев 50%, а в некоторых случаях величина констант практически полностью определяется вкладом скрытых смещений подрешеток. Анализ собственных векторов оптических длинноволновых мод показывает, что низкочастотные колебания в основном связаны с редкоземельной подрешеткой, тогда как высокочастотные – с кислородной подрешеткой. Особенностью нашего модельного расчета является появление мягкой моды для EuFeO_3 (15 см^{-1}), TbFeO_3 (13 см^{-1}), YFeO_3 (18 см^{-1}), TmFeO_3 (16 см^{-1}). В целом рассчитанные значения частот оптических колебаний ортоферритов находятся, как и следовало ожидать, в диапазоне $100 - 1000 \text{ см}^{-1}$. Найденный спектр частот колебаний вполне удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными в ортоферритах.

Таким образом использование простой модели жестких ионов для анализа упругооптических свойств ортоферритов позволяет не только дать удовлетворительное описание достаточно широкого набора экспериментальных данных, но и рассчитать компоненты тензора внутренних напряжений через упругие параметры, имеющих принципиальное значение для расчета вклада скрытых смещений в различные упругие, магнитоупругие и магнитоупругооптические эффекты.

Электроинтерференция света в тонкой пленке, состоящей из наночастиц, обратимо образующейся на непрозрачных электродах

Гетманский Андрей Александрович

Ставропольский государственный университет

Чеканов Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.

mclayd@mail.ru

В слабопроводящих магнитных дисперсных наносистемах под воздействием внешних факторов наблюдаются различные эффекты. Одним из таких эффектов является изменение характеристик отраженного света в результате изменения структуры наносистемы под действием внешнего электрического поля [1, 2]. Характерным представителем магнитных дисперсных наносистем являются магнитные жидкости (МЖ). Дисперсионной фазой являются частицы магнетита Fe_3O_4 (со средним диаметром $d_{\text{ср}} \sim 10 \text{ нм}$). В качестве дисперсионной среды используется неполярный диэлектрик – керосин. Для предотвращения коагуляции и седиментации МЖ стабилизирована поверхностно-активным веществом (ПАВ).

В работах [1, 2 и др.] исследовалась интерференция света в тонкой пленке, образующейся на прозрачных полупроводниковых электродах, однако представляет интерес исследование свойств пленки, образующейся вблизи непрозрачных электродов различной физической природы (металлического и полупроводникового электродов). Для экспериментального изучения свойств тонкой пленки из наночастиц на непрозрачном электроде использовался нулевой метод эллипсометрии с ручным управлением по схеме типа К2Р [3]. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. Луч света от лазера $\lambda = 632,8 \text{ нм}$ направляли на поляризатор (призма Глана, 1). Плоскость пропускания поляризатора располагали под углом 45° к плоскости поляризации луча. Определение плоскости поляризации луча осуществляли по углу Брюстера [4]. Затем луч падал на исследуемый электрод. Металлическим электродом являлся алюминий, нанесенный методом вакуумного напыления на стекло, а полупроводниковым – сегмент одного из этапов производства интегральной схемы. Угол падения света на ячейку контролировался с помощью лимба

поворотного столика 3. Отраженный свет, пройдя компенсатор (четвертьволновая пластина, изготовленная из слюды, 4) и анализатор (призма Аренса, 5), падал на фотоэлектронный умножитель ФЭУ—27. Сигнал с ФЭУ записывался при помощи платы АЦП ЛА-2М5 на жесткий диск персонального компьютера.

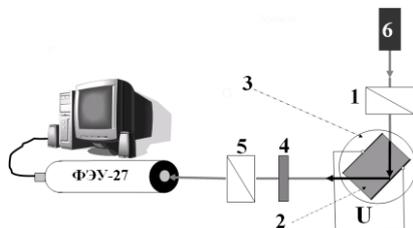


рис. 1. Схема экспериментальной установки.

В эксперименте наблюдалось изменение эллипса поляризации света при отражении от границы «МЖ – непрозрачный электрод». Это указывает на электроинтерференцию в тонкой пленке из наночастиц, образующейся под действием внешнего электрического поля вблизи непрозрачного электрода. Эффект является обратимым, так как при выключении поля исследуемая система приходит в первоначальное состояние (эллипс поляризации по истечении ~15с становится таким же, как и до включения поля). Нами были получены зависимости азимутов анализатора и компенсатора от напряжения на ячейке с МЖ различной концентрации для электрода положительной и отрицательной полярности. По полученным эллипсометрическим измерениям можно определить толщину слоя МЖ, образующегося в электрическом поле вблизи электрода, для различных напряжений. Для этого необходимо реальную отражающую систему заменить моделью, наиболее адекватно её описывающей и записать для нее уравнения Френеля. Затем решить основное уравнение (1) эллипсометрии

$$\operatorname{tg} \psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s}, \quad (1)$$

где R_p и R_s – коэффициенты отражения для р- и s- составляющих падающей волны соответственно [3]. Это уравнение связывает экспериментально измеряемые эллипсометрические углы ψ и Δ с оптическими постоянными системы, толщинами поверхностных слоев, углом падения и длиной волны света, которые зависят от выбранной модели, описывающей отражающую систему. Для того, что бы оценить толщину образующегося вблизи алюминиевого электрода слоя концентрированной МЖ в зависимости от величины усредненной напряженности $E=U/l$ (l – расстояние между электродами) электрического поля в ячейке, сравнивали экспериментальную номограмму с теоретической. Теоретическая номограмма была получена путем решения обратной задачи для основного уравнения эллипсометрии с учетом выбранной нами модели отражающей системы. Зависимости толщины приэлектродного слоя от напряженности электрического поля в ячейке имеют следующие закономерности:

- При увеличении напряженности поля в ячейке увеличивается толщина пленки вблизи непрозрачного электрода.
- Для данной напряженности электрического поля в ячейке толщина интерферирующей пленки вблизи отрицательного электрода больше, чем толщина пленки вблизи положительного электрода. Вблизи положительного электрода толщина пленки достигает ~60нм, а вблизи отрицательного - ~90нм.
- Толщина приэлектродной пленки из наночастиц зависит от концентрации МЖ в объеме ячейки. Причем, чем больше концентрация МЖ, тем больше толщина пленки вблизи непрозрачного электрода.
- Толщина интерферирующей пленки при прочих постоянных условия (концентрации МЖ в объеме ячейки, напряженности поля, полярности электрода) не зависит от рода электрода.

Таким образом, при исследовании электроинтерференции света в тонкой пленке, состоящей из наночастиц, показано, что вблизи непрозрачного электрода обратимо образуется слой частиц повышенной концентрации (~25 об. %) . Толщиной интерференционной пленки можно управлять, изменяя величину внешнего напряжения. Данный эффект может быть применен в технике восстановления данных об отражающей поверхности по изменению свойств отраженного света [5].

Список публикаций:

- [1] Чеканов В.В. Интерференция света в тонкой пленке на границе с магнитной жидкостью // Тезисы докладов 5 Всесоюзной конференции по магнитным жидкостям. Т. 2. - Плес, 1988. - С. 128-129.
- [2] Чеканов В.В., Падалка В.В., Бондаренко Е.А. Изменение эллипса поляризации при отражении света от многослойной интерференционной структуры с магнитной жидкостью // 10 юбилейная международная конференция по магнитным жидкостям. Плес, 2002. С.98-102.
- [3] Ржанов А.В. Эллипсометрия - методы исследования поверхности. - Новосибирск: Наука, 1972.
- [4] Горшков М.М. Эллипсометрия. – М.: Сов. радио, 1974. – 200 с.
- [5] Чеканов В.В., Кандаурова Н.В., Мараховский А.С. Об одном способе определения качества товаров с помощью электроуправляемого спектрофотометра // Мат. докл. на науч. –практ. конф. профессорско – преподавательского состава, студентов и практических работников потребительской кооперации. – Ставрополь, 1999. – С. 305 – 311.

Формирование никелевых кластеров при отжигах гомогенных сплавов Ni-Mg-O

Гребенников Антон Александрович^а

Стогней Олег Владимирович^а, Ситников Александр Викторович^а,

Терехов Владимир Андреевич^б, Румянцева Нина Анатольевна^б

^а Воронежский государственный технический университет

^б Воронежский государственный университет

Стогней Олег Владимирович, д.ф.-м.н.

Anton18885@yandex.ru

В работе проведено исследование структуры, электрических и магнитных свойств образцов Ni-MgO, полученных методом ионно-лучевого распыления составных мишеней. Процессы намагничивания исследовались с помощью вибрационного магнитометра, электрические и магниторезистивные свойства исследовались потенциометрическим методом по двухзондовой схеме.

Концентрационная зависимость электросопротивления сплавов Ni-MgO имеет характерную для нанокмозитов s-образную форму с участком резкого уменьшения сопротивления (на три порядка) при незначительном увеличении концентрации никеля, обычно интерпретируемым как порог перколяции. Температурные зависимости сопротивления сплавов Ni-MgO также аналогичны зависимостям, получаемым для нанокмозитов: при малой концентрации никеля сопротивление монотонно растет с температурой, достигает максимума (при 600 - 650 °C) и затем уменьшается; при большой концентрации никеля на зависимостях наблюдается резкое уменьшение сопротивления (скачок) и последующий рост сопротивления. Однако, анализ физических свойств сплавов не позволяет предполагать наличие у них наногранулированной структуры: во-первых, во всех образцах отсутствует магнитосопротивление, во-вторых, даже в сплавах с большим содержанием никеля практически отсутствует намагниченность в полях 5 кЭ (рис.1, вставка). Данные рентгеноструктурного анализа показали, что структура образцов в исходном состоянии гомогенная: на рентгенограмме присутствуют только пик от кристаллического MgO, а присутствие никеля не обнаруживается.

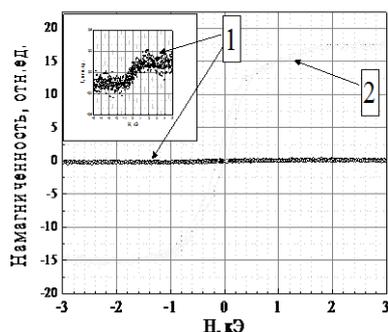


рис. 1. Кривые намагничивания сплава NiMgO.

1 - в исходном состоянии,

2 - после отжига при 650 °C

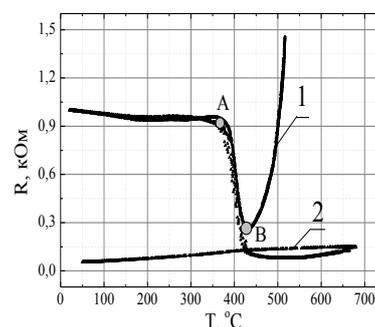


рис. 2. Температурные зависимости сопротивления образцов NiMgO.

(1)-нагрев в вакууме, (2)-в водороде

С помощью рентгеноструктурного анализа установлено, что в результате термического отжига (600 °C) сплавов с большим содержанием никеля их структура становится гетерогенной – на рентгенограмме появляются пики, соответствующие кристаллическому Ni. При этом радикально изменяются магнитные свойства сплавов: намагниченность после отжига возрастает на два порядка и возникает магнитный гистерезис с коэрцитивностью 75 – 80 Э (рис. 1). Поскольку магнитосопротивление в отожженных образцах не наблюдается можно сделать вывод о том, что выделяющийся при отжиге никель формирует большие, макроскопические кластеры.

Подтверждением формирования кластеров никеля является различие температурных зависимостей сопротивления образцов одного состава, нагретых до 700 °C в вакууме (вакуум $5 \cdot 10^{-5}$ Торр) и в водороде (давление водорода 30 Торр) (рис. 2). До точки А кривые 1 и 2 практически совпадают. На отрезке А-В в образцах, по-видимому, происходят структурные изменения, результатом которых является формирование кластеров никеля. Выше точки В ход зависимостей существенно меняется в зависимости от характера атмосферы в которой проводился отжиг: сопротивление образца, нагреваемого в вакууме резко возрастает, в то время как у образца, нагреваемого в водороде изменение сопротивления незначительно. Предполагается, что это связано с формированием гидрида никеля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант N 09-02-97536-р-центр-а

Магнитооптический эффект Фарадея в пленках Ni-Ge: зависимость от толщины слоев Ge и режима отжига

Гребенькова Юлия Эрнестовна

Черниченко Ангелина Виталиевна^б, Маруценко Дмитрий Анатольевич^{аб}
Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ^а

Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН^б

Эдельман Ирина Самсоновна, д.ф.-м.н.

ise@iph.krasn.ru

Пленочные структуры, состоящие из слоев 3d ферромагнитного металла и полупроводника, вызывают особый интерес, как исследователей, так и разработчиков новых технологий и устройств. Основное внимание уделяется структурам на основе Si, в то время как, довольно мало работ посвящено пленкам Ge-3d металл, которые могут проявлять новые неожиданные свойства, в частности, из-за высоких скоростей взаимной диффузии этих материалов. Настоящая работа посвящена изучению связи магнитооптических свойств и морфологии пленок Ge-Ni, Ge-Ni-Ge-Ni-Ge в сравнении с пленками Ni и влиянию на эти свойства термических обработок.

Серия Ni-Ge и Ge-Ni-Ge-Ni-Ge пленок получена методом ионно-плазменного распыления из отдельных источников в вакуумной камере при базовом давлении 10^{-6} мм рт. ст. в атмосфере аргона. В качестве подложек использовались покровные стекла, температура которых при напылении составляла 373 К. Толщина каждого слоя регулировалась временем подачи тока на распыляемую мишень. Структура подложек и осажденных пленок исследовалась с помощью атомного силового микроскопа Veeco MultiMode AFM (АСМ). Эффект Фарадея (ЭФ) измерен при комнатной температуре в поле до 5 кЭ, направленном нормально поверхности пленки вдоль светового луча. Данные АСМ показали, что поверхность пленки, практически, повторяет структуру поверхности подложки без нарушения целостности на масштабах ~ 500 нм. Отжиг пленки приводит к упорядочению наблюдаемой картины: поверхность пленки представляет собой мелкодисперсную структуру со средним линейным размером зерна в плоскости ~ 40 нм.

Характер полевых зависимостей ЭФ при наложении магнитного поля вдоль нормали в плоскости образца одинаков для двухслойных пленок Ni-Ge и близок к пленкам Ni: плавное возрастание ЭФ в малых полях с насыщением в поле ~ 4 кЭ. Для этих пленок наблюдается линейная зависимость величины ЭФ от толщины слоя Ni, экстраполяция этой зависимости к нулевому значению ЭФ соответствует толщине слоя Ni, не дающего вклада в ЭФ, ~ 5 нм. Неожиданной оказалась зависимость ЭФ от толщины промежуточного слоя Ge в пятислойных образцах. В двух сериях пятислойных образцов с разной толщиной слоев Ni ЭФ обратно пропорционален толщине промежуточного слоя Ge. При этом наблюдается и уменьшение поля насыщения ЭФ до ~ 1 кЭ, то есть в 3-4 раза по сравнению с двухслойными пленками.

Отжиг приводит к постепенному возрастанию ЭФ двухслойных пленок и пленок Ni, максимальное увеличение при пятикратном отжиге составляет примерно 30%. В многослойных пленках при первом отжиге ЭФ возрастает, что похоже на поведение двухслойных пленок и пленки Ni, но последующие отжики вызывают уменьшение ЭФ. По-видимому, в результате отжига происходит устранение некоторых дефектов, улучшение однородности пленки и соответствующее возрастание намагниченности, а, следовательно, и ЭФ. В случае пленки Ni этот процесс завершается уже при первом отжиге. В двухслойной пленке он постепенный, а из-за значительной толщины слоя Ni диффузия Ge не проявляется. При наличии Ge с обеих сторон слоя Ni, приблизительно вдвое более тонкого по сравнению с двухслойной пленкой, а особенно при включении промежуточного слоя Ge, влияние его диффузии в слой Ni на ЭФ начинает проявляться уже при втором отжиге. При первом же отжиге, однако, превалирует увеличение однородности структуры образца.

Обнаруженная зависимость ЭФ от толщины промежуточного слоя Ge в пятислойных образцах объяснена диффузией Ge в Ni на значительную глубину. При малой толщине промежуточного слоя Ge немагнитный слой на границе между Ge и Ni тонкий, значительно тоньше, чем это допускается глубиной диффузии, и большая часть Ni находится в ферромагнитном состоянии. По мере возрастания толщины слоя Ge увеличивается глубина его проникновения в Ni, то есть большая часть слоя Ni теряет магнитный порядок. Приблизительная оценка показывает, что толщина смешанного слоя $Ge_x Ni_y$ составляет ~ 5 нм.

Таким образом, показано, что интерфейс Ge-Ni достигает значительной толщины и играет важную роль в формировании магнитных свойств многослойных пленочных структур.

Работа поддержана Аналитической ведомственной целевой программой "Развитие научного потенциала высшей школы", проект № 2.1.1/6038 и Грантом РФФИ, проект № 08-02-00397-а.

Закономерности формирования политипов алмаза и карбида кремния

Грешняков Владимир Андреевич

Агалямова Эльвира Наилевна

Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Исследование закономерностей формирования аллотропных и политипных структурных разновидностей кристаллических фаз является одним из основных в современной физике конденсированного состояния и интересно как с научной, так и практической точек зрения. Область термодинамической устойчивости различных политипных фаз определяется в первую очередь такими параметрами, как температурой, давлением и концентрацией примесей. Однако для ряда соединений при одинаковых значениях этих параметров наблюдается формирование и одновременное устойчивое существование сразу нескольких политипных структурных разновидностей. Явление политипизма характерно для различных классов веществ: металлов, керамик, минералов, интерметаллидов, органических веществ. Причем он обнаружен при изучении не только монокристаллов, но и пленок, частиц порошков, поликристаллических компактных материалов. Механизмы образования политипных фаз недостаточно изучены и в большинстве случаев не удается предсказать заранее, какой политип получится при том или ином экспериментальном методе синтеза и, следовательно, объяснить причины образования различных политипов при одинаковых термодинамических условиях. В данной работе выполнен анализ структуры и закономерностей формирования политипов алмаза и карбида кремния.

Для описания структуры политипов различных соединений обычно пользуются моделью жестких сфер. Переход от конкретной структуры соединения к модельному представлению происходит в результате выбора группы атомов, которая рассматривается как молекула и заменяется в структуре на сферу. В алмазной структуре сферой заменяется группа из пары соседних углеродных атомов, связанных ковалентной связью, в SiC происходит замена сферами пар соседних атомов разных элементов. После перехода к жестким сферам трехмерную структуру любой политипной разновидности можно рассматривать как последовательность плотноупакованных слоев, состоящих из жестких сфер. Если первый слой обозначить как слой типа А, то следующие слои можно плотно упаковать двумя различными способами, эти слои обозначаются В и С, соответственно. Различные политипы отличаются друг от друга порядком чередования слоев трех типов, периодом повторяемости слоёв в направлении кристаллографической оси Z, типом кристаллической решетки, а также степенью гексагональности (G), численное значение которой определяют как долю гексагональных слоев, выраженную в процентах. Гексагональным считается слой, у которого соседние слои одинакового типа.

Анализ структуры возможных политипных модификаций выполняли, перебирая при помощи специально разработанной программы все возможные комбинации чередования слоев в направлении кристаллографической оси Z для политипных фаз, имеющих период повторяемости N от 2 до 13 слоев. Из всех возможных комбинаций отбрасывали те, которые не соответствуют плотной упаковке либо переходят друг в друга при замене обозначений слоев. В результате было установлено, что имеется зависимость числа возможных разрешенных комбинаций (L) (при отбрасывании повторяющихся) и комбинаций без эквивалентных замен (P) от периода повторяемости слоев, соответственно.

$$P_N = \begin{cases} 1, & \text{при } N = 2; \\ 2 \times P_{N-1} + 1, & \text{при } N > 2 \text{ (N - четное)}; \\ 2 \times P_{N-1} - 1, & \text{при } N > 2 \text{ (N - нечетное)}. \end{cases} \quad L_N = \begin{cases} 6, & \text{при } N = 2; \\ 2 \times L_{N-1} + 6, & \text{при } N > 2 \text{ (N - четное)}; \\ 2 \times L_{N-1} - 6, & \text{при } N > 2 \text{ (N - нечетное)}. \end{cases}$$

Таким образом, если период повторяемости слоёв в политипе меньше шести, то существует по одному политипу для каждого определённого N. Начиная с 6 слоёв, одному и тому же числу N может соответствовать несколько политипов. Причем эти политипы имеют различную степень гексагональности:

$$G = \frac{2 \times i}{N} \cdot 100\%, \quad \text{где } i = \begin{cases} 1, & \text{при } N = 2; \\ 0, & \text{при } N = 3; \\ 1 \dots i_{\max}, & \text{при } N > 3. \end{cases}$$

Поскольку степень гексагональности политипов для разных модификаций при одинаковом N может быть различной, то, по-видимому, именно это является причиной формирования политипов с различной гексагональностью при одинаковых термодинамических условиях.

Остаточная намагниченность магнетита при воздействии повышенных давлений

Губайдуллин Ренальд Рафаилович

Стерлитамакская государственная педагогическая академия

Гареева Магира Ямгетдиновна, к.ф.-м.н.

web.renald@gmail.com

Изучение магнитных свойств горных пород и минералов при повышенных давлениях и температурах является актуальным для решения проблем, связанных с формированием и свойствами магнитоактивного слоя земной коры. Эти исследования представляют интерес для решения насущных проблем народного хозяйства, в частности, для прогнозирования глубинных концентраций минерального сырья и для обоснования поисков геомагнитного предвестника землетрясения.

В работе представлены результаты исследований остаточной намагниченности магнетитов различных месторождений в зависимости от глубины их залегания.

Результаты изучения закономерностей пьезоостаточной намагниченности в процессе наложения квазивсесторонних давлений представлены на *рис. 1-2*.

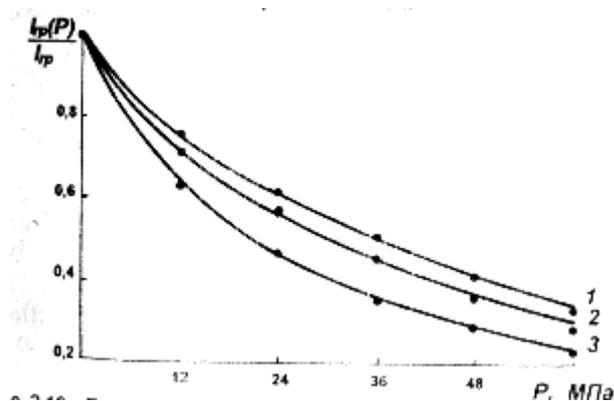


рис. 1 Пьезоостаточная намагниченность образцов пород Ковдорского месторождения в присутствии квазивсесторонних давлений. 1-530 м, 2-966 м, 3-1225 м.

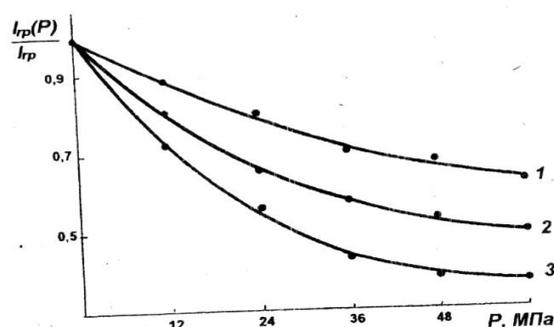


рис. 2 Пьезоостаточная намагниченность образцов горных пород Магнитогорского месторождения в присутствии повышенных давлений в зависимости от глубины залегания. 1-76-86 м, 2-127 м, 3-160 м.

При первоначальном наложении давления на образец в скомпенсированном магнитном поле ($0 \rightarrow P_1 \rightarrow 0 \rightarrow P_2 \rightarrow 0 \dots 0 \rightarrow P_m \rightarrow 0$) наблюдается интенсивное разрушение пьезоостаточной намагниченности. Относительное уменьшение величины $I_{гр}$ магнетитов Ковдорского месторождения, отобранных с различных глубин (530, 966, и 1225 м), при действии давлений до 60 МПа составляет 66-77% от исходной величины $I_{гр}$. Для магнетитов месторождения «Малый Куйбас» (глубины залегания 76, 127, 160 м) величина относительного уменьшения пьезоостаточной намагниченности при тех же давлениях лежит в интервале от 38 до 64 % от первоначального значения $I_{гр}$. Таким образом, с увеличением глубины залегания пород стабильность пьезоостаточной намагниченности по отношению к воздействию квазивсестороннего давления уменьшается.

Исследования особенностей строения пиролизованного полиакрилонитрила на адсорбцию атомов кислорода

Давлетова Олеся Александровна

Красильникова Анна Сергеевна

Волгоградский государственный университет

Запорожкова Ирина Владимировна, д.ф.-м.н

olesya.08@mail.ru

Подчеркивая важность материалов для прогресса, историческим периодам развития человеческого общества присваивают наименование материалов (бронзовая, железная, стальная (индустриальная революция), кремниевая (революция техники связи) эпохи). Настоящий период развития человеческого общества называют полимерным, так как полимеры проникают во все области техники и быта: в медицину, сельское хозяйство, машиностроение, приборостроение, строительство, электротехнику, электронику, оптоэлектронику и на транспорт.

Развитие науки и потребности индустрии приводят к уменьшению размеров объектов исследования до нанометрового масштаба (параметр которых хотя бы в одном измерении составляет не более 100 нм) и к созданию физико-химических методов для получения наноструктур с модифицированными физическими и химическими свойствами, которые требуют фундаментальных и прикладных исследований. Влияние квантово-размерного эффекта наноструктуры на свойства вещества, развитие органических полупроводников и открытие новой аллотропной формы углерода, фуллерена, стимулировали интерес к синтезу новых углеродных нанокристаллических материалов с модифицированными химическими свойствами на основе полиакрилонитрила (ПАН), которые содержат искривленные углеродные плоскости (сферические, кольцеподобные и тубуленоподобные образования). Для модифицирования химических свойств, ускорения химических превращений в ПАН и получения нанообразований с молекулярной и надмолекулярной структурами использован механизм самоорганизации структуры при взаимодействии ИК-излучения с полимером. В результате был получен так называемый пиролизованный ПАН (ППАН).

Несмотря на экспериментально установленные свойства адсорбции атомов кислорода на поверхности ППАН, неизвестны механизмы его оксидирования, а также особенности поведения полимера при оксидировании, характер и степень влияния структуры на эти процессы. Все это определяет необходимость проведения теоретических исследований описанных проблем и является целью представленной работы.

При проведении исследования адсорбции атома кислорода были выполнены расчеты этого процесса в рамках модели ионно-встроенного ковалентно-циклического кластера (ИВ-КЦК) с использованием квантово-химической полуэмпирической схемы MNDO.

В результате пиролиза полиакрилонитрила формируется графитоподобная слоистая структура. Для исследования процесса адсорбции атомарного кислорода был выбран двухслойный пиролизованный полиакрилонитрил, каждый слой которого содержал 20% атомов азота от общего количества атомов в одном слое. Расстояние между атомами в слое составляет 1.4 Å, а между слоями по аналогии с графитом выбиралось равным 3.4 Å. Рассматривалось два варианта расположения слоев относительно друг друга: 1) один слой расположен строго над другим; 2) один слой смещен относительно другого на 1/2 гексагона. При исследовании процесса адсорбции атомарного кислорода на одной из внешних поверхностей двухслойного ППАН (для двух предложенных вариантов), адсорбирующийся атом помещался над тремя различными атомами поверхности: 1) над атомом углерода чисто углеродного гексагона; 2) над атомом углерода гексагона, в котором присутствует атом азота; 3) над атомом азота. Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением адсорбирующегося атома кислорода к атому поверхности слоя вдоль перпендикуляра к поверхности, проведенного через выбранный атом. Геометрия системы оптимизировалась на каждом шаге.

Выполненные расчеты позволили построить профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции. Анализ энергетических кривых установил, что атом кислорода адсорбируется на поверхности ППАН, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых. Наличие минимума иллюстрирует факт образование химической связи между атомом O и атомом поверхности, т.е. является результатом перекрывания орбиталей атомов поверхности полимера и кислорода с обменом электронной плотностью между ними. Реализуется так называемая химическая адсорбция. Для того чтобы оказаться в точке минимума, атом кислорода должен преодолеть потенциальный барьер (отождествляемый с энергией активации). Были определены основные энергетические характеристики процесса адсорбции атома кислорода на двухслойном пиролизованном полиакрилонитриле: оптимальные расстояния адсорбции, соответствующие им значения энергии адсорбции и активации.

MNDO-исследования процесса адсорбции легких атомов на монослой пиролизованного полиакрилонитрила

Давлетова Олеся Александровна
Волгоградский государственный университет
Запорожкова Ирина Владимировна, д.ф.-м.н
olesya.08@mail.ru

Полиакрилонитрил является наиболее интересным по возможным областям применения и широко распространенным полимером. Для модифицирования химических свойств, ускорения химических превращений в ПАН и получения нанообразований с молекулярной и надмолекулярной структурами использован механизм самоорганизации структуры при взаимодействии ИК-излучения с полимером. В результате был получен так называемый пиролизованный ПАН (ППАН). Возникающая структура под воздействием ИК излучения приводит к новым свойствам пиролизованного ПАН. Полимер перспективен для изготовления рН-электродов, используемых в медицине, биологии и химической промышленности, а также в качестве сенсоров для определения химически агрессивных паров и газов, имеющих кислый или щелочной гидролиз (NH_3 , H_2S , CO_2 , NO_2 , HCl , Cl_2 , HF , F_2 , Br_2 , кремнийорганические соединения, PH_3 , SO_3 , SO_2 , I_2), так как пиролизованный ПАН имеет высокую химическую стабильность во влажной, кислой и щелочной средах. Пиролизованный полиакрилонитрил обладает развитой поверхностью и способностью эффективно адсорбировать различные газы, что доказано с помощью экспериментальных исследований. Однако для детального описания процессов адсорбции на поверхности полимера использование только экспериментальных подходов оказывается недостаточным. Модельные представления и квантовомеханические расчеты электронной структуры обеспечивают более полную информацию об особенностях электронного строения вещества, позволяют изучить механизмы различных процессов, предсказать возможные свойства и сферы применения.

В данной работе была исследована возможность присоединения атомов водорода, кислорода, фтора и хлора к поверхности монослоя ППАН. Расчеты выполнены в рамках модели молекулярного кластера с использованием адаптированной квантово-химической полуэмпирической схемы MNDO (модифицированного пренебрежения двухатомным перекрыванием). Выбор метода расчета обусловлен достаточно хорошо согласующимися с экспериментом результатами изучения многих высокомолекулярных твердотельных структур.

В качестве объекта исследования был выбран монослой полимера, содержащий 20% атомов азота и 0% атомов водорода на поверхности, от общего числа атомов. Расстояние между атомами в слое составляет 1.4 Å. Были рассмотрены три варианта ориентации адсорбирующихся атомов на поверхности монослоя полимера: 1) над атомом углерода, 2) над центром связи C-C, 3) над центром углеродного гексагона.

В первом случае адсорбирующиеся атомы (Cl, F, H, O) присоединялись к поверхностному атому углерода, находящемуся примерно в середине кластера полимера, что позволило исключить влияние краевых эффектов. Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением адсорбирующихся атомов к атому углерода поверхности слоя вдоль перпендикуляра к поверхности, проведенного через выбранный атом C. Геометрия системы оптимизировалась на каждом шаге. Выполненные расчеты позволили построить профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции. Анализ энергетических кривых установил, что атомы F, H, O адсорбируются на поверхности ППАН, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых. Наличие минимума иллюстрирует факт образование химической связи между атомами F, H, O и атомом углерода поверхности, т.е. является результатом перекрывания орбиталей атомов C и F, H, O с обменом электронной плотностью между ними. Реализуется так называемая химическая адсорбция. Атом хлора также адсорбируется на поверхности, но в отличии от вышеперечисленных атомов адсорбционный комплекс полимер-атом хлора является метастабильным, т.к. значение энергии адсорбции близко к нулю.

Аналогично моделировались процессы для вариантов 2 и 3 ориентации адатомов над поверхностью пиролизованного полиакрилонитрила. Адатомы пошагово приближались к фиктивному атому, находящемуся либо над центром связи C-C, либо над центром углеродного гексагона. Оказалось, что для варианта 2 реализуется лишь адсорбция атома кислорода, при этом положении атома O оказывается энергетически более выгодным, чем для варианта 1 (над атомом C). На энергетической кривой взаимодействия атома H и поверхности пиролизованного полиакрилонитрила также имеется минимум, но образовавшийся адсорбционный комплекс полимер-атом водорода является метастабильным, т.к. значение энергии адсорбции является положительным. Этот минимум, на наш взгляд, соответствует взаимодействию Ван-дер-Ваальса между водородом и полимером, то есть так называемой физической адсорбции атома. Для варианта 3, над центром углеродного гексагона, адсорбция выбранных атомов невозможна.

Итак, выполненные MNDO-исследования адсорбции атомов Cl, F, H, O на поверхности пиролизованного полиакрилонитрила позволили сделать следующие выводы:

В положении 1 (над атомом углерода поверхности полимера) возможна адсорбция всех рассматриваемых атомов, причем для атома хлора имеет место физическая адсорбция и такой адсорбционный комплекс метастабилен.

В положении 2 (над центром С-С связи) возможна адсорбция атома кислорода и водорода, причем для атома водорода имеет место физическая адсорбция и такой адсорбционный комплекс метастабилен.

В положении 3 (над центром углеродного гексагона) адсорбция выбранных атомов невозможна.

Изучение процессов рекристаллизации в сплаве V-4Ti-4Cr после интенсивной пластической деформации методом многократного всестороннего прессования

Денисов Константин Игоревич

Томский государственный университет

Дитенберг Иван Александрович, к.ф.-м.н.

deni@ultranet.tomsk.ru

Одним из традиционных способов повышения прочностных свойств металлических материалов является измельчение зеренной структуры. Хорошо известный метод чередования деформационной и последующей термической обработки вблизи температуры рекристаллизации уже несколько десятилетий назад позволял получать в металлах и сплавах микронные и субмикронные размеры зерен [1]. В настоящее время для формирования в металлических материалах мелкокристаллических (МК), субмикрокристаллических (СМК) и нанокристаллических структурных состояний используются методы интенсивной пластической деформации (ИПД), такие как кручение под давлением, равноканальное угловое прессование, многократная всесторонняя ковка и прессование и т.д. [2]. Среди перечисленных методов ИПД наиболее привлекательным в технологическом отношении является многократное всестороннее прессование. Данный метод позволяет получать МК и СМК структурные состояния в наиболее крупных объемных образцах. Однако для формирования требуемых параметров зеренной структуры необходим подбор оптимальных условий деформационной и термической обработок с учетом особенностей структурно-фазового состояния материала.

Целью настоящей работы является изучение процессов рекристаллизации высокодефектных структурных состояний в гетерофазном сплаве системы V-4Ti-4Cr после интенсивной пластической деформации методом многократного всестороннего прессования.

Образцы ванадиевого сплава были подвергнуты интенсивной пластической деформации методом многократного всестороннего прессования в пресс-форме при комнатной температуре. После 16 циклов прессования конечное значение истинной логарифмической деформации, по аналогии с обычной прокаткой, составило $\epsilon \approx 5.8$.

С целью формирования в высокодефектном состоянии максимального количества мелких зерен или их зародышей были проведены пятиминутные отжиги при температурах 900° С и 1000° С с быстрым нагревом и охлаждением. Для этого предварительно деформированные образцы V-4Ti-4Cr с защитным покрытием из меди помещали в трубчатую печь типа СУОЛ, нагретую до необходимых температур. Дальнейшая модификация структуры проведена в процессе часового отжига в вакууме при 1000° С. Сравнительное исследование структурных состояний образцов на разных стадиях обработки проводилось методами оптической металлографии, просвечивающей и растровой электронной микроскопии.

Установлено, что важной особенностью структуры является сильная локализация деформации в процессе ИПД и высокая неоднородность распределения частиц фаз внедрения, что оказывает значительное влияние на дальнейшие процессы рекристаллизации. Анализ полученных результатов показал, что распределение зерен крайне неоднородно, при этом крупные зерна образуются, как правило, в местах, свободных от примесей, тогда как в областях с повышенной концентрацией частиц второй фазы и участках локализации деформации наблюдается большое количество мелких зерен. Зерна минимального размера наблюдаются после пятиминутного отжига при 900° С. Но после часового отжига в вакууме при 1000° С наиболее мелкие зерна формируются в образце, отожженном непосредственно после ИПД, средний размер зерен при этом не превышает 10 мкм.

Как показали исследования, классическая схема измельчения зеренной структуры в данном случае не работает, а рост зерен определяется одновременным протеканием процессов рекристаллизации и модификации гетерофазной структуры.

В целом, представленные результаты свидетельствуют о чрезвычайно сложном характере рекристаллизации, зависящем от структурно-фазового состояния материала. При выборе оптимальных условий для формирования однородного по структуре и составу материала требуется учитывать одновременное действие нескольких конкурирующих процессов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта по Российско-американской программе "Фундаментальные исследования и высшее образование" (CRDF, RUXO-016-TO-06). Исследования проведены с использованием оборудования Томского материаловедческого центра коллективного пользования ТГУ.

Список публикаций:

[1] *Сверхмелкое зерно в металлах / Под ред. Л.К. Гордиенко. – М.: Металлургия, 1973. – 384 с.*

[2] *Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. – М.: Логос, 2000. - 272 с.*

Выращивание фотонных кристаллов из наносфер диоксида кремния в тонких кюветах

Доронин Иван Сергеевич

Дальневосточный государственный университет путей сообщения

Окишев Константин Николаевич, к.ф.-м.н.

Ivonpr@mail.ru

В настоящее время одним из важнейших направлений, использующих нанотехнологии в оптике, является создание периодических наноструктур, называемых обычно фотонными кристаллами. Типичным фотонным кристаллом является опал, образованный из наносфер диоксида кремния. В опалах также как и в кристаллах присутствует дальний порядок расположения наносфер.

В работе синтез наносфер диоксида кремния проводился методом гидролиза тетраэтилортосиликата $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ (ТЭОС). Для этого смешивались 12 мл ТЭОС, 30 мл дистиллированной воды, 7,8 мл 28% раствора аммиака в воде и 150 мл этилового спирта. В результате реакции образуются наносферы со средним диаметром 380 нм (*рис. 1*). Измерения проводились методом динамического рассеяния света с помощью лазерного анализатора размеров частиц Nanotrac 151.

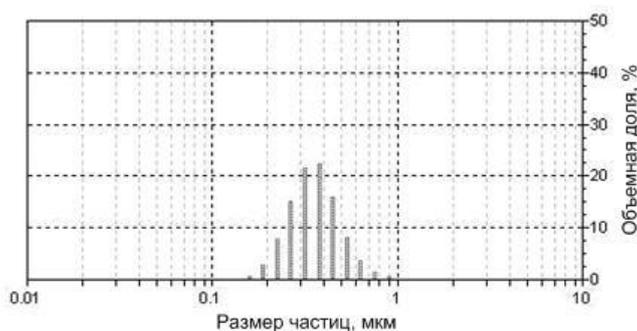


рис.1. Распределение размеров наносфер диоксида кремния в суспензии

В эксперименте выращивание фотонных кристаллов диоксида кремния проводилось в тонких наклонных кюветах. Было замечено, что скорость осаждения частиц в такой кювете значительно превышает скорость осаждения в экспериментах других авторов. При этом наблюдалось разделение суспензии на фазы имеющие четкую границу раздела. На *рис. 2, а* можно различить три фазы образования фотонного кристалла – «газообразную» фазу, фазу «жидкости» и «кристаллическую» фазу (фотонный кристалл) (*рис. 2, б*).

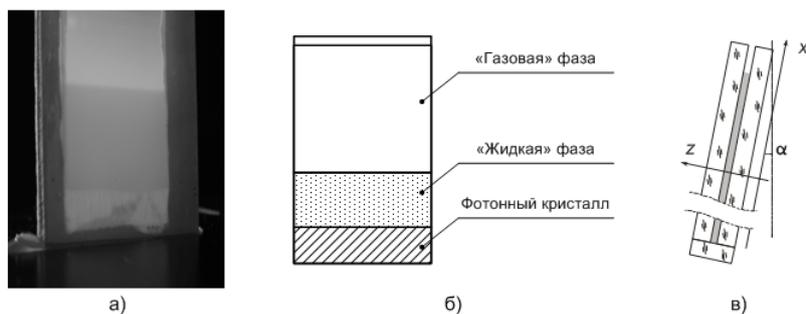


рис. 2. Рост фотонных кристаллов в тонкой наклонной кювете

Для объяснения скорости осаждения наночастиц в такой системе предложена следующая модель. В процессе седиментации встречные процессы диффузии и гравитационного осаждения наносфер, приводят к установлению седиментационного равновесия концентрации частиц по оси z (рис. 2, в) описываемое следующим выражением

$$n(z) = n_0 \exp\left(-\frac{m_e g_z \cdot z}{kT}\right), \quad (1)$$

где n_0 – концентрация частиц на уровне, принятом за нулевой; m_e – эффективная (с учетом архимедовой поправки) масса частицы; g_z – проекция ускорения свободного падения вдоль оси Z ; z – координата по оси Z ; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Изменение концентрации дисперсионных частиц по толщине кюветы приводит к изменению плотности $\rho(z)$ и вязкости $\eta(z)$ суспензии

$$\rho(z) = \rho_0 + m_e n(z), \quad (2)$$

$$\eta(z) = \eta_0 + \eta_0 K \phi(z), \quad (3)$$

где ρ_0 и η_0 – плотность и вязкость дисперсионной среды; $K = 2,5$; $\phi(z) = V_0 n(z)$ – объемная доля дисперсионной фазы, V_0 – объем сферической частицы. Различие плотности суспензии по оси z приводит к возникновению встречных течений жидкости у стенок кюветы вдоль оси x . В фазе установившегося равномерного движения жидкости уравнение Навье-Стокса примет вид

$$g_x - \frac{1}{\rho(z)} P_x + \frac{\eta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} = 0, \quad (4)$$

где g_x – составляющая ускорения свободного падения по оси x , P_x – градиент давления по оси x , v_x – скорость течения слоев жидкости.

Учитывая что скорость течения вблизи стенок кюветы а также средняя скорость равны нулю запишем граничные условия

$$v_x(a) = 0; \quad v_x(b) = 0; \quad \int_a^b v_x \partial z = 0, \quad (5)$$

где a и b – координаты стенок кюветы по оси z .

Для наносфер диаметром 240 нм, в кювете толщиной 0,2 мм расположенной под наклоном 15° рассчитанная средняя по толщине скорость переноса частиц составила 670 мм/час, что многократно превышает скорость естественной седиментации наносфер (0,3 мм/час) и подтверждает данные эксперимента.

Структура слоистого дихалькогенида переходного металла интеркалированного серебром $\text{Ag}_{0.20}\text{ZrSe}_2$

Дублистова Ольга Васильевна

Ягафарова Зульфия Абдулхаевна, Юсупов Ильшат Тимергалиевич, Сайфуллин Айдар Хайдарович

Стерлитамакская государственная педагогическая академия

Zulfiya_Abdul@mail.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) представляют собой соединения, описываемые химической формулой MX_2 , где М – переходный металл IV-VI группы, Х – халькоген. Соединения этого класса обладают способностью кристаллизоваться в квазидвумерную структуру, состоящую из блоков, в которых подслои атомов гексагонально упакованного переходного металла заключены между двумя слоями гексагонально упакованных атомов халькогена. Внутри слоя взаимодействие сильное – ковалентное, а между слоями взаимодействие осуществляется с помощью относительно слабых сил Ван-дер-Ваальса. Слоистая структура способствует возможности обратимого внедрения (интеркалирования) в вакантные позиции между слоями (в так называемые Ван-дер-Ваальсовы щели) чужеродных атомов или ионов, являющихся электронными донорами. Электростатические силы между слоями интеркаланта и блоками стабилизируют эти слоистые структуры.

Расположение подрешеток халькогена и подрешеток переходного металла друг относительно друга может быть различным. Существует два различных типа координации: тригонально-призматический и октаэдрический. СДПМ, в которых атомы халькогена координированы октаэдрически кристаллизуются в структурном типе CdI_2 , слоистые халькогениды с тригонально-призматической координацией могут иметь структуру MoS_2 .

В данной работе была исследована структура интеркалатного соединения на основе диселенида циркония $\text{Ag}_{0.20}\text{ZrSe}_2$. Образцы интеркалированных фаз получены методом твердофазной реакции спеканием СДПМ и интеркаланта. Для синтеза использовались селен (марки ОСЧ 17-3), цирконий и серебро – чистотой 99.99 %. Кроме этого, для внедрения серебра в слои СДПМ использовался метод электрохимических ячеек. Синтезированные образцы были аттестованы методом рентгеноструктурного анализа (ДРОН-4-07).

Исходная решетка-матрица ZrSe_2 кристаллизуется в структурном типе CdI_2 . В начальном этапе рентгенограммы обрабатывались программами IDENT и INDEX. Дифрактограммы матричного соединения ZrSe_2 индиферировались в гексагональной сингонии с параметрами "a"=3,77(6) Å; "c"=6,14(7) Å. Рентгенограммы интеркалированной фазы $\text{Ag}_{0.20}\text{ZrSe}_2$ (содержание интеркаланта $x=0.20$) также определялись в гексагональной сингонии. В интеркалированной фазе происходит уменьшение параметра "c" решетки. Сжатие слоев решетки вдоль оси "c" может быть объяснено образованием ковалентных центров Zr-Ag-Zr, являющихся результатом гибридизации d_z^2 орбиталей переходного металла матричного соединения и 5s валентных состояний интеркаланта серебра

Влияние магнитного поля на аннигиляцию мобильных триплетных электронных возбуждений в сферических нанопорах

Дюсембаев Руслан Нурлыханович

Кучеренко Михаил Геннадьевич

Оренбургский государственный университет

Кучеренко Михаил Геннадьевич

r_dusembaev@mail.ru

Магнитный эффект в аннигиляции триплетных (Т) электронных возбуждений зависит от пространственной и спиновой динамики частиц, образующих когерентную пару. В нанопорах твердых сорбентов возможны различные режимы перемещений Т-молекул: 1) латеральная диффузия по поверхности нанопоры; 2) трехмерные блуждания одного реагента по объему поры до встречи с иммобилизованным Т-центром на стенках. В свою очередь, спиновая динамика триплетных центров может формироваться при участии процессов спиновой релаксации и без них. Предложена модель влияния внешнего магнитного поля на скорость триплет-триплетной аннигиляции (ТТА) в приближении раздельной пространственной и спиновой динамики триплетных пар в нанопорах сферической формы для латерального и внутриобъемного режима перемещений молекул, или их Т-возбуждений (квазичастиц), с учетом спиновой релаксации. Получены аналитические выражения для кинетики концентрации Т-частиц и сигнала аннигиляционной замедленной

флуоресценции. Магнито- и времязависимая бимолекулярная скорость $K_{ann}(t|B)$ аннигиляции когерентных пар в поле индукции B определялась интегралом

$$K_{ann}(t|B) \sim \int_0^t \langle 00 | \rho(t'|B) | 00 \rangle \chi(t') dt' . \quad (1)$$

В рамках модели латеральных блужданий по сфере радиуса R неселективная по спину скорость $\chi(t)$ дистанционной аннигиляции в круговом $R - R_0$ - поясе реагирования триплетных молекул

$$\chi(t) = \int_{\Delta V} U(r, \theta) G(r, \theta, t | r', \theta', t') r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi , \quad (2)$$

где $U(r, \theta)$ - дистанционно зависящая скорость обменно-резонансного процесса ТТА; G - функция Грина для уравнения диффузии:

а) на сфере с коэффициентом D_Ω :

$$G(\theta, t | \theta_0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \cdot P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta_0) \exp \left[-\frac{D_\Omega l(l+1)t}{R^2} \right]; \quad (3)$$

б) внутри объема полости с коэффициентом D :

$$G(r, \theta; t | R) = \frac{1}{4\pi R^{5/2} \sqrt{r}} \sum_{k,l=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{D}{R^2} \lambda_k^{(l)2} t \right] \frac{(2l+1) J_{l+1/2}(\lambda_k^{(l)} r/R)}{[1-l(l+1)/\lambda_k^{(l)2}] J_{l+1/2}(\lambda_k^{(l)})} P_l(\cos \theta) . \quad (4)$$

Здесь $J_{l+1/2}(\lambda_k^{(l)} r/R)$ - функция Бесселя, $P_l(x)$ - полиномы Лежандра степени l , $\lambda_k^{(l)}$ - положительные корни уравнения

$$\lambda_k^{(l)} J'_{l+1/2}(\lambda_k^{(l)}) - \frac{1}{2} J_{l+1/2}(\lambda_k^{(l)}) = 0 . \quad (5)$$

$\langle 00 | \rho | 00 \rangle$ - матричный элемент оператора спиновой плотности Т-Т-пары в коллективном синглетном $|00\rangle$ спиновом состоянии $|JM\rangle$. Для определения спиновой матрицы плотности ρ_{MM} использовалось релаксационное уравнение в форме Редфильда, или других формах, учитывающих то обстоятельство, что основным механизмом спиновой релаксации для триплетной молекулы является модуляция тензора внутримолекулярного спин-спиновой взаимодействия случайными поворотами молекулярного остова. При больших временах спиновой релаксации рассматривалась спиновая динамика для сумм, не зависящих от времени гамильтонианов расщепления тонкой структуры и зеемановского взаимодействия. На рис. 1 и 2 представлены полевые зависимости скорости ТТА для различных структурных и динамических параметров систем. Установлено, что при переходе к модели контактного реагирования на радиусе реакции $r_0 < R$ качественный вид этих зависимостей остается неизменным.

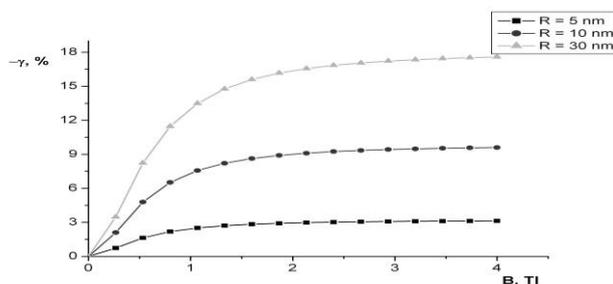


рис.1. Зависимость величины магнитной модуляции скорости ТТА от индукции B внешнего поля для пор различного радиуса R . Режим латеральной подвижности и спиновой релаксации. Кривые построены при $D = 10^{-5} \text{ см}^2 / \text{с}$, $U_0 = 10^{11} \text{ с}^{-1}$

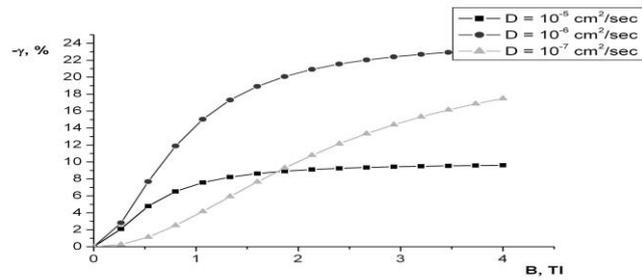


рис.2. Зависимость величины магнитной модуляции скорости ТТА от индукции B внешнего поля для различных коэффициентов D диффузии. Режим латеральной подвижности и спиновой релаксации. $U_0 = 10^{11} \text{ c}^{-1}$.

Работа выполнена благодаря поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 08-02-99035-р_офи), а также Министерства образования и науки России (задание Рособразования № 1.3.06).

Получение тонких пленок оксида титана на поверхности медицинских имплантатов методом магнетронного распыления

Ермолович Игорь Михайлович

Томский политехнический университет

Пичугин Владимир Федорович, д.ф.-м.н.

ermolovich@mail.ru

Проблема биосовместимости медицинских имплантатов остается одной из наиболее актуальных проблем медицинского материаловедения. Опыт показал, что успех элютинга стентирования (ЭС) имеет свою цену: на смену рестенозам, редко представляющим угрозу для жизни больных, пришли тромбозы в стенте, которые часто приводят к смерти или инфаркту миокарда (ИМ). Поэтому поиск гемосовместимых покрытий, уменьшающих риск возникновения тромбоза в стенте, является актуальным. Покрытия на основе TiO_2 являются весьма перспективными и способны решить проблему рестеноза и тромбоза [1-3].

В данной работе описывается методика получения биосовместимых пленок TiO_2 методом реактивного магнетронного распыления (РМР). Метод РМР представляет собой перспективную технологию формирования покрытий на основе титана с высокой адгезией, плотной беспористой структурой и возможностью обработки изделий, имеющих трехмерную форму.

Пленки TiO_2 были получены на экспериментальной установке среднечастотного магнетронного напыления «УВН-200МИ», детальное описание которой приведено в работе [4]. В настоящей работе использовался следующий режим напыления: давление 10^{-1} Па, напряжение 335 В, ток 2,3 А, подача газа O_2 в камеру осуществлялась в объеме $1,5 \text{ см}^3/\text{мин}$. Подложкой служила нержавеющей сталь 12Х18Н10Т, разрешенная к медицинскому применению. Толщина покрытия, определялась с использованием профилометра Talysurf 5, механические свойства покрытий исследовались методом динамического наноиндентирования на приборе NHT-S-000X при нагрузке на индентор 5 мН. Нанотвердость, модуль Юнга и контактная жесткость определялись по методу Оливера-Фарра. По кривым нагрузки-разгрузки определялось упругое восстановление. Рентгенодифрактометрический анализ (РДА) проводился на сканирующем шаговом дифрактометре в геометрии скользящего луча ($\omega = 1^\circ$) в $\text{Cu } K_\alpha$ -излучении. Шероховатость поверхности осажденных слоев определялась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на площади размером 10×10 мкм. Состав плазмы, из которой происходит рост покрытия, исследовался методом оптической эмиссионной спектроскопии.

При использовании в качестве рабочего газа аргона для инициации разряда, в спектрах присутствуют линии излучения Ar ($680 \div 840 \text{ нм}$) и титана ($300 \div 530 \text{ нм}$). При замещении аргона в вакуумной камере кислородом наблюдаются линии излучения кислорода (O^+ : 394.8, 437.3, 636.0, 777.2 нм) и его соединений с титаном (TiO^+ : 526.8, 558.9, 597.9, 671.4, 719.7), максимальная интенсивность линии TiO^+ при 558.9 нм). Линии излучения, связанные с титаном отсутствуют. Это свидетельствует о том, что синтез молекул окиси титана TiO^+ происходит в плазме магнетронного разряда. С учетом того, что плазма находится под положительным потенциалом относительно любого тела, приведенного с ней в соприкосновение, рост пленки связан с потоком молекулярных ионов TiO^+ в направлении поверхности конденсации. Толщина всех полученных покрытий была в интервале 350-2000 нм. Скорость роста пленок TiO_2 составила величину 6 нм/мин. РДА показывает, что компонентами пленок являются анатаз (69.8%), рутил (8.1%) и аморфная фаза TiO_2 (22.1%). При отжиге полученного покрытия на воздухе при 700°C происходит кристаллизация аморфной фазы и рост содержания

рутила в покрытии. Исследование механических свойств покрытий показывают, что характер деформации покрытия является упруго-пластическим. При снятии нагрузки, происходит частичное восстановление отпечатка, при этом степень восстановления увеличивается с ростом толщины покрытия. Сводные данные по механическим характеристикам TiO₂ покрытий представлены в таблице:

Измеренные величины	12X18H10T без покрытия	Толщина покрытия		
		350 нм	1050 нм	2000 нм
$\langle H \rangle$, МПа	7413,39	6562,9	9280,88	13997,26
$\langle E \rangle$, ГПа	165,31	134,18	148,66	151,85
$\langle S \rangle$, мН/мм	0,1479	0,1309	0,1198	0,0996

Анализируя экспериментальные данные можно сделать вывод, что нанотвердость покрытий выше, чем подложки без покрытия. Прослеживается отчетливая зависимость изменения нанотвердости от толщины покрытия. В интервале толщины пленки от 350 нм до 2000 нм происходит значительный рост нанотвердости и модуля упругости. Величина контактной жесткости уменьшается с ростом толщины покрытий.

Таким образом, полученные методом реактивного магнетронного распыления пленки TiO₂ обладают твердостью большей, чем подложка. Способность покрытий восстанавливать свою форму после механической деформации улучшается с ростом толщины покрытия. Покрытия обладают механическими характеристиками позволяющими прогнозировать возможность их использования в качестве покрытий для стентов.

Список публикаций:

- [1] P. Yang, N. Huang, Y.X. Leng, et al., *Surface and Coatings Technology*, **156**, 284–288 (2002).
 [2] J.Y. Chena, Y.X. Leng, X.B. Tiana, et al., *Biomaterials* **23**, 2545–2552 (2002).
 [3] И.А. Цыганов, А.И. Позднякова², Э. Рихтер, М.Ф. Майтц., *Физика твердого тела, Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского № 1*, 52–56 (2007).
 [4] O.S. Kusmin, L.G. Kositsin, A.N. Radusenko, A.V. Pokushalov, I.M. Yermolovich., *Proceedings of the 9th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows*, 35-37 (2008).

Количественные параметры дислокационной субструктуры

¹Жилкашинова Альмира Михайловна

²Скаков Мажын Канапинович

³Попова Наталья Анатольевна

¹Восточно-Казахстанский государственный университет им.С.Аманжолова

²Восточно-Казахстанский государственный технический университет им.Д.Серикбаева

Томский государственный архитектурно-строительный университет

Скаков Мажын Канапинович, д.ф.-м.н.

almira_1981@mail.ru

В данной работе рассмотрена взаимосвязь стадий деформации с количественными параметрами дислокационной субструктуры. Для этой цели были измерены такие параметры: скалярная и избыточная плотность дислокаций и плотность двойников деформации, размер дислокационных ячеек в ячеистой субструктуре, амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки, амплитуда внутренних напряжений.

Изменение количественных параметров субструктуры (скалярной и избыточной плотности дислокаций и плотности деформационных микродвойников) от степени пластической деформации представлено на *рис.1*.

Из рисунка видно, что изменение способа деформирования (растяжение, прокатка) почти не влияет на плотность микродвойников и избыточную плотность дислокаций. Зависимость скалярной плотности дислокаций от степени деформации до $\epsilon \approx 30\%$ носит параболический характер, при более высоких степенях деформации происходит насыщение накопления дислокаций. При растяжении разрушение образца происходит раньше, чем может быть достигнуто насыщение плотности дислокаций.

Ранее мы отмечали, что с момента включения в деформацию механического двойникования начинает интенсивно развиваться ячеистая субструктура. Это хорошо видно из *рис.2*.

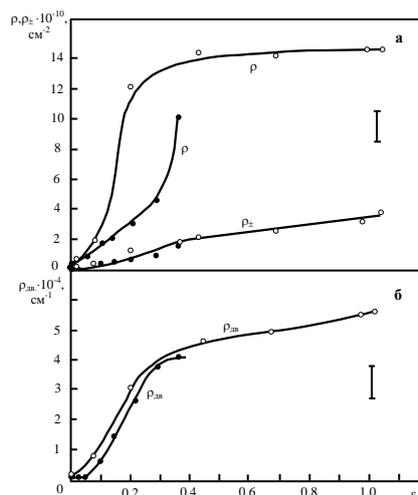


рис.1. Зависимости скалярной ρ и избыточной ρ_{\pm} плотности дислокаций (а) и плотности деформационных микровдвойников $\rho_{\text{м}}$ (б) от степени пластической деформации в стали 110Г13: \circ – деформация прокаткой, \bullet – деформация растяжением

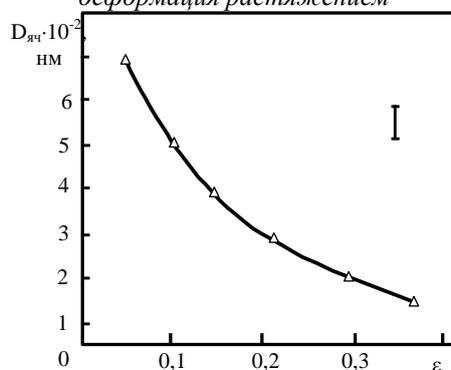


рис.2. Зависимость размера ячеек $D_{\text{яч}}$ от степени пластической деформации ε для стали 110Г13.

Из рис.2 видно, что с увеличением степени пластической деформации размер ячеек убывает.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют об изменении количественных параметров субструктуры (скалярной и избыточной плотности дислокаций и плотности деформационных микровдвойников) от степени пластической деформации. Данная зависимость носит параболический характер скалярной плотности дислокаций от степени деформации.

Исследование дефектной структуры и фазового состава метастабильной аустенитной стали 40Н25 после прокатки

Захожева Марина Игоревна

Томский государственный университет

Литовченко Игорь Юрьевич, к.ф.-м.н

Ejina-vrajina@mail.ru

В работах [1, 2] показано, что прокатка при комнатной температуре стабильной аустенитной стали 02X17H14M2 до степеней деформации $\varepsilon = 70 - 90\%$ приводит к формированию дефектной структуры, состоящей из микровдвойников деформации и полос локализации деформации с внутренней фрагментированной структурой. Внутри дефектной структуры обнаруживаются частицы мартенситных α - и ε фаз. Однако их объемная доля не превышает 1%. В работах [1, 2] развиваются представления об участии механизма прямых плюс обратных $\gamma \rightarrow \alpha \rightarrow \gamma$ (ГЦК-ОЦК-ГЦК) превращений мартенситного типа в формировании дефектной структуры при больших степенях деформации аустенитных сталей.

В настоящей работе исследована дефектная структура и фазовый состав метастабильной (испытывающей при деформации мартенситные превращения) аустенитной стали 40Н25 (Ni – 25%, С- 0.4%) после прокатки. Прокатку проводили при комнатной температуре в интервале деформаций $\varepsilon \approx 40 - 85\%$.

Дефектную структуру исследовали на электронном микроскопе Philips CM-30. Фазовый состав стали после прокатки, изучали на дифрактометре Shimadzu XRD-6000.

Проведенные исследования показали, что исходное состояние материала γ - аустенит, в котором встречается некоторая доля включений α -феррита. После деформации $\varepsilon \approx 85\%$ дефектная структура стали состоит из микродвойников деформации, пластин α - и ε -мартенсита, а также полос локализации деформации с внутренней фрагментированной структурой.

На (рис. 1) представлено темнопольное изображение в рефлексе ε - фазы и соответствующая микродифракционная картина. Характерный вид микро дифракционной картины с полосы локализации деформации свидетельствует о существовании высокоугловых разориентировок кристаллической решетки и наличии фрагментированной структуры γ -аустенита.

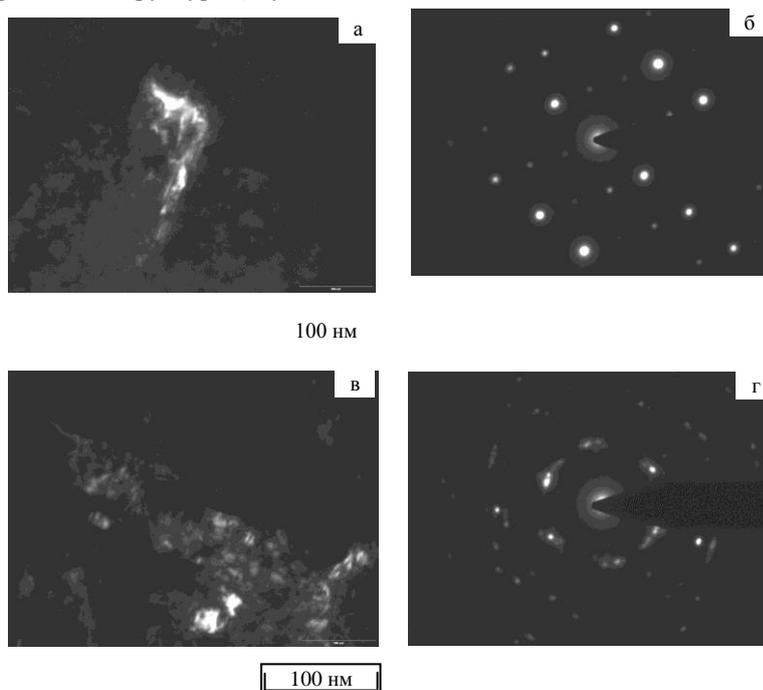


рис. 1 Дефектная структура стали после деформации прокаткой до $\varepsilon \approx 85\%$: (а) – темнопольное изображение в рефлексе ε -фазы; (б) - микродифракционная картина к (а), (в) – темнопольное изображение в рефлексе $g = [111]$ γ ; (г) – микродифракционная картина к (в)

На основании полученных результатов обсуждаются механизмы деформации, и роль фазовых превращений в формировании дефектной структуры стали при прокатке.

Список публикаций:

- [1] Литовченко И.Ю., Шевченко Н.В., Тюменцев А.Н., Пинжин Ю.П. // *Физ. мезомех.* – 2005. – Т. 8. – №4. – С. 5-12.
- [2] Тюменцев А.Н., Литовченко И.Ю., Пинжин Ю.П., Коротаев А.Д. и др. // *ФММ*, 2003. - Т. 95. - № 2. - С. 86-95

Упорядоченные ансамбли ферромагнитных наноточек

Иванов Юрий Павлович

Ильин Алексей Игоревич, Пустовалов Евгений Владиславович
Дальневосточный государственный университет

Чеботкевич Людмила Алексеевна, д.ф.-м.н.

yivanov@phys.dvgu.ru

Массивы магнитных наноточек широко исследуются в последнее время из-за их возможного применения в сверхплотных носителях информации, сверхчувствительных магнитных датчиках и т.д., а также с точки зрения фундаментальной науки. Получение наноразмерных структур травлением фокусированным ионным пучком (ФИП) - очень универсальная и быстродействующая технология. В некоторых случаях, скорость изготовления может быть достаточно высокой, чтобы рассмотреть использование ФИП для коммерческого изготовления наноструктур. В работах [1, 2] была показана возможность получения высококачественных магнитных наноструктур из магнитомягких и магнитожестких тонких пленок методом ФИП посредством

подбора соответствующих параметров травления в зависимости от размеров наноструктур, материала и толщины пленки.

В настоящей работе исследовались магнитные свойства матрицы магнитных наноточек Co и Fe, полученных методом ионно-лучевого травления из сплошных пленок.

Пленки Co и Fe получали методом молекулярно-лучевой эпитаксии в условиях сверхвысокого вакуума 10^{-10} Торр на естественно окисленные монокристаллы Si(100). Сверху пленки покрывали слоем Cu толщиной 3 nm для предотвращения окисления. Толщина пленок составляла 10 nm. Из пленок фокусированным пучком ионов Ga⁺ формировали массивы круглых точек диаметром 600 nm. Период наноточек во всех массивах (расстояние между центрами точек) 1,8 мкм. В каждом массиве было 10 × 10 наноточек.

Структуру ансамблей наноточек определяли методом дифракции быстрых электронов (ДБЭ), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Магнитные параметры определяли по петлям магнитного гистерезиса, полученным продольным магнито-оптическим эффектом Керра (наноМОКЕ-2). Для получения изображения магнитной структуры пленок использовали метод магнитной силовой микроскопии (МСМ).

ДБЭ анализ показал, что пленки являются поликристаллическими. Одноосная наведенная магнитная анизотропия в поликристаллических пленках формировалась наклонным падением молекулярного пучка в процессе осаждения. Коэрцитивная сила пленок Fe и Co 30 Э и 22 Э соответственно.

Изображения МСМ ансамбля Fe и Co наноточек аналогичны. Наноточки Fe и Co являются двухдоменными. Однако в магнитном поле, приложенном в плоскости ансамбля наноточки Fe и Co ведут себя по-разному. Коэрцитивная сила ансамбля Fe наноточек 25 Э, а поле насыщения 350 Э, в то время как коэрцитивная сила ансамбля Co наноточек 56 Э, а поле насыщения ~ 100 Э. Чтобы понять такую разницу в величине коэрцитивной силы ансамблей Fe и Co наноточек, исследовали морфологию поверхности наноточек. АСМ показала, что амплитуда шероховатостей поверхности Fe наноточек 0,25 nm, а период 100 nm. Амплитуда шероховатостей поверхности Co наноточек 0,42 nm, период 50 nm. Однако на поверхности Co наноточек АСМ выявила отдельные образования, высота которых 3 nm, что по всей видимости и является причиной большей величины коэрцитивной силы ансамбля Co наноточек.

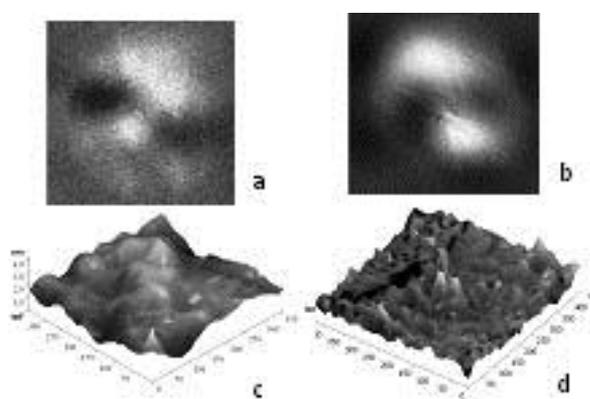


рис. 1. Изображение МСМ (a,b) и АСМ (c,d). Наноточка Fe (a,d) и Co (b,c)

Список публикаций:

[1] Gang Xiong, D. A. Allwood, M. D. Cooke, and R. P. Cowburn., *Applied Physics Letters*, 21, 79 (2001)

[2] W. M. Kaminsky, G.A. C. Jones, N. K. Patel, W. E. Booij, M. G. Blamire, S. M. Gardiner, Y. B. Xu, and J. A. C. Bland, *Appl. Phys. Lett.*, 78, 1589 (2001).

Кристаллогеометрия структур в системах Ti-Ni, Ni-Nb, Ti-Nb и структурно-фазовые состояния в сплавах TiNi(Nb,Mo)

Калачева Екатерина Викторовна

Марченко Екатерина Сергеевна, Грищенко Юлия Евгеньевна

Томский государственный университет

Гюнтер Виктор Эдуардович, д.ф.-м.н., Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н.

Katusha_K@vtomske.ru

В сплавах на основе никелида титана проявляются уникальные физико-механические свойства, обусловленные протекающими в них структурными фазовыми переходами (ФП). Легирование TiNi различными элементами оказывает значительное влияние на эти свойства [1]. В литературе практически не изучены многокомпонентные сплавы TiNi(Mo,Nb). В данной работе представлены результаты структурных и физических свойств сплавов $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Nb_x$, ($x=0,5, 1,0, 1,5$). Структурные данные были получены на дифрактометре «ДРОН-3». Температурные зависимости кривых электросопротивления определялись стандартным четырехточечным методом [1]. Необходимо отметить, что для объяснения структурно-фазовых

состояний многокомпонентных сплавов на основе никелида необходимо привлекать к анализу бинарные диаграммы состояний основных сплавообразующих элементов. Поэтому в данной работе приведены результаты расчета кристаллогеометрических параметров в исследуемых системах.

Для анализа механизмов образования и устойчивости сплавов в той или иной кристаллической структуре используют разные кристаллогеометрические параметры [2,3]. В настоящей работе для анализа кристаллических структур использованы следующие кристаллогеометрические параметры: сверхструктурное сжатие и коэффициент заполнения пространства.

Сверхструктурное сжатие используется как фундаментальный параметр, характеризующий особенности образования металлических соединений и показывающий степень отклонения от линейной зависимости в законе Зена Ω_3 . Для бинарного сплава этот закон может быть записан в виде:

$$\Omega_3 = C_A \Omega_A + C_B \Omega_B, \quad (1)$$

C_A и C_B – концентрация атомов сорта A и B , Ω_A и Ω_B атомные объемы атомов сорта A и B соответственно. Относительная величина сверхструктурного сжатия определяется как относительное отклонение от закона Зена [4]:

$$\Delta\Omega/\Omega^3 = (\Omega^3 - \Omega_3)/\Omega^3 \quad (2)$$

где, Ω^3 – атомный объем, приходящийся на один атом в элементарной ячейке, определенный из экспериментальных данных и на основе расчета атомных диаметров, рассчитанных из кратчайших расстояний между атомами в структурах. Ω_3 – атомный объем в законе Зена.

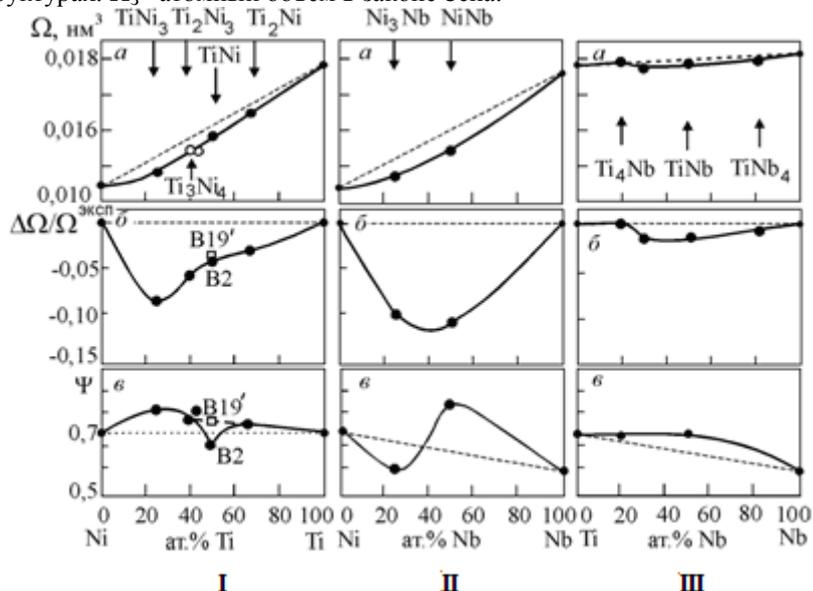


рис. 1. Зависимости атомного объема (а), относительного сверхструктурного сжатия (б) и коэффициента упаковки (в) от концентрации в соединениях систем Ni-Ti (I), Ni-Nb (II) и Ti-Nb (III)

Коэффициент заполнения пространства ψ , который является интегральным параметром, характеризующим кристаллические структуры. ψ представляет собой отношение объема содержащихся в элементарной ячейке атомов (представляющих жесткие шары известного радиуса) к объему элементарной ячейки V , полученных из экспериментальных данных

$$\psi = \frac{\frac{4}{3} \pi \sum_{i,j} (nR_i^3 + mR_j^3 + \dots)}{V}, \quad (3)$$

где n, m, \dots – число атомов сорта i, j, \dots и радиусы атомов R_i, R_j, \dots в элементарной ячейке объема V .

На рис. 1 приведены концентрационные зависимости атомного объема, относительной величины сверхструктурного сжатия и плотности упаковки для кристаллических структур в бинарных системах Ti-Ni, Ni-Nb и Ti-Nb. На зависимости атомного объема от концентрации для структур в системах Ti-Ni и Ni-Nb хорошо проявляется отклонение от закона Зена и видно, что сверхструктурное сжатие в системах является значительной величиной (рис.1, I а, б), в то время как в системе Ti-Nb это отклонение незначительно. Важно отметить, что величина сверхструктурного сжатия в соединении Ti_2Ni более чем в два раза меньше, чем для интерметаллида NiTi. (рис.1).

Концентрационные зависимости коэффициента упаковки ψ для соединений в бинарной системе Ti-Ni имеют немонокотный характер с минимумом в области эквиатомного состава, если принимать в расчет структуру B2. В соединении NiTi плотноупакованная ромбическая B19' образуется из структуры B2 в результате мартенситного перехода (МП) [1]. В соединениях в системе Ni-Nb ψ от состава имеет сложный характер. В области эквиатомного состава соединение NiNb обладает высоким значением, заметно превышающим ψ в TiNi с B19' структурой. Выявленное поведение кристаллогеометрических параметров в системе Ti-Nb обусловлено тем, что Ti с Nb образуют непрерывные и ограниченные твердые растворы (рис. 1). Тогда, как в системах Ti-Ni и Ni-Nb, образуются интерметаллические соединения с узкими областями гомогенности. Таким образом, этот интегральный параметр, характеризующий заполнение пространства в элементарных ячейках рассматриваемых соединений, отражает то, что в них имеет место различный характер изменения сил межатомного взаимодействия в зависимости от сорта сплавобразующих элементов. Так в системе Ti-Ni с изменением концентрации происходит следующая последовательность морфотропных превращений $A3 \rightarrow E9_3 \rightarrow B2 \rightarrow D0_{24} \rightarrow A1$ (Ti \rightarrow Ti₂Ni \rightarrow TiNi \rightarrow TiNi₃ \rightarrow Ni). В системе Ni-Nb: $A1 \rightarrow D8_5 \rightarrow D0_a \rightarrow A2$ (Ni \rightarrow NiNb \rightarrow NbNi₃ \rightarrow Nb).

Полученные температурные зависимости кривых электросопротивления в сплавах TiNi(Nb, Mo) позволили определить температурные интервалы и последовательности МП.

На основании проведенных исследований были сделаны следующие выводы:

1. В соединениях на основе Ti-Ni, Ni-Nb и Ti-Nb существует сверхструктурное сжатие, которое проявляется в разном характере отклонения от закона Зена.
2. Разные функциональные зависимости коэффициентов упаковки в исследуемых соединениях отражают значительное изменение сил межатомного взаимодействия одноименных и разноименных пар атомов Ni-Ti, Ni-Nb и Ti-Nb в узлах кристаллической решетки.

Список публикаций:

- [1] Гюнтер В. Э., Домбаев Г. Ц., Сысолятин П. Г. и др. *Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы*. Томск: ТГУ. 1998. 486 с.
- [2] Юм-Розери В., Рейнор Г. *Структура металлов и их сплавов*. М.: Металлургиздат. 1958.
- [3] Голутвин Ю. М. *Теплоты образования и типы химической связи в неорганических кристаллах*. М.: АН СССР. 1962. 196 с.
- [4] Потекаев А. И., Клопотов А. А., Козлов Э. В. и др. *Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана*. Томск: НТЛ. 2004. 296 с.

Доменная структура слабоанизотропных тонких пленок

Каримов Линар Закирович

Камалиев Линар Розябович

Стерлитамакская государственная педагогическая академия

Сагдаткиреева Минигуль Байгужевна, д.ф.-м.н.

bickulova@mail.ru

Современная наука достаточно глубоко проникла в сущность магнитных явлений и вскрыла их основные квантовые закономерности. Это позволило с большим эффектом заставить служить эту замечательную силу природы человеческому обществу. В связи с большим всплеском интереса к исследованиям доменных структур, связанным с непосредственным практическим использованием доменов, произошли также довольно серьезные сдвиги в понимании роли доменной структуры (ДС), в формировании магнитных свойств материалов. Многообразие типов доменной структуры и доменных границ объясняется наличием в пленке двух осей легкого намагничивания, одна из которых наклонена к плоскости, другая расположена в плоскости пленки. Полная энергия ферромагнитной пленки состоит из плотности обменной энергии $H_{обм}$, энергии анизотропии $H_{ан}$, упругой энергии $H_{упр}$, магнитоупругой $H_{му}$, магнитостатической $H_{мс}$ и энергии магнетика во внешнем поле H_n :

$$H = H_{обм} + H_{ан} + H_{мс} + H_n + H_{упр} + H_{му} \quad (1)$$

Определенную трудность представляет вычисление магнитостатической энергии. Полную магнитостатическую энергию можно представить в виде:

$$H_{mc} = \frac{1}{2\pi} \int H_m^2 dV \quad (2)$$

Целью данной работы было исследование характера формирования и перестройки доменной структуры в слабоанизотропных тонких пленках с произвольной осью легкого намагничивания в зависимости от угла наклона одной из осей легкого намагничивания (ОЛН) с учетом толщины, магнитострикции пленки.

Для выяснения возможных ДС в пленках с произвольной ОЛН, исследование возможных ориентаций вектора намагниченности в них необходимо провести только с одновременным учетом с магнитной анизотропией толщины пленки и магнитострикции.

Необходимым и достаточным условием существования определенного вида доменной структуры, т.е. возможных периодических ориентаций вектора намагниченности $m = M / M_s$ относительно нормали к пленке, является выполнение следующих условий:

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \varphi} = 0, \quad (3)$$

При

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2} \geq 0, \quad \frac{\partial^2 E_v}{\partial \varphi^2} \frac{\partial^2 E_v}{\partial \theta^2} - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \varphi \partial \theta} \right)^2 \geq 0, \quad (4)$$

В общем виде это сводится к решению системы (3) уравнений совместно с соотношениями (4). Для каждой из возможных ориентаций \vec{m} минимум плотности полной энергии реализуется при определенных значениях угла наклона ОЛН к нормали к пленке, толщины и соотношениях между константами наклонной и плоскостной анизотропий $K_\psi(T), K_a$, коэффициента магнитострикции $\lambda_s(T)$ и при компонентах тензора размагничивающего фактора по трем соответствующим направлениям осей, зависящие от толщины пленки (D) и типа реализуемых ДС: $N_{\varphi x}, N_{\varphi y}, N_{\varphi z}$.

Исследования показали, что в пленках с произвольной ОЛН, образующей острый угол с ОЛН в плоскости, тип реализуемых ДС, определенных на основе результатов решений основного состояния в виде возможных (стабильных) периодических ориентаций \vec{m} , определяется знаком и величиной констант эффективных анизотропий $K_{\varphi 1}, K_{\varphi 2}, K_{\varphi 3}$, содержащих в себе магнитные параметры пленок, толщину и значение угла наклона ОЛН.

Результаты исследования характера формирования и перестройки доменной структуры в рассматриваемых наноразмерных пленках привели к следующим результатам. Перестройка полосовых ДС при изменении угла наклона ОЛН от 0 до $\pi/2$ относительно нормали к плоскости образца на основе ДС вида Широкова происходит в два этапа. Для первого этапа характерно изменение в доменах угла выхода \vec{m} из плоскости пленки, расширение (сужение) ДГ, возникновение (исчезновение) тонкой структуры в ДГ, при этом расширение ДГ завершается полным разрушением ДС. На втором этапе \vec{m} в доменах испытывает переориентацию скачком на $\pi/2$, и при этом вид ДС меняется от ДС вида Широкова до отрицательной полосовой регулярной периодичности (k_λ в области значений 0.55-0.91), сильной полосовой (360° ДС) и нерегулярной периодичности. Здесь k_λ модуль эллиптического интеграла первого и второго родов.

Таким образом, реализуемые фазы в пленках представляют собой ДС трех видов: $180^\circ, 360^\circ$, отличающиеся между собой углом выхода \vec{m} и ДС промежуточного типа нерегулярной периодичности, \vec{m} в доменах которой образуют 45° , представляющие собой 180° и 360° или 90° и 270° соседей.

Поверхностная активность углерода и эффект Ребиндера в развитии повреждаемости сплавов Fe-C

Киржнева Ольга Геннадьевна

Тульский государственный университет

Чуканов А.Н., д.т.н.

o.lya-lya@inbox.ru

Образование и рост трещин связаны с энергетическими затратами на развитие свободной поверхности. Снижение поверхностной энергии под влиянием адсорбции поверхностно-активных веществ изменяет энергетику структурных и фазовых превращений, воздействует на механизм и кинетику структурообразования. Углерод также относится к поверхностно-активным веществам [1]. В сплавах Fe-C перераспределение и адсорбция углерода интенсифицирует деформацию, разрушение, самопроизвольное диспергирование. Изменение поверхностной энергии определяет формирование моноатомных слоёв и выделение углерода в виде графита на свободной поверхности и может происходить даже в ненасыщенных углеродом растворах [2].

В работе оценили возможность реализации в поврежденных сплавах Fe-C «растворно-осадительного» механизма и эффекта Ребиндера. Первый механизм отражает «механическое» влияние перераспределения углерода с возникновением графита и дополнительным трещинообразованием на ювенильной поверхности дефектов поврежденности. Второй – адсорбцию и химическое взаимодействие углерода и элементов микроструктуры.

Анализировали термоактивационные параметры неупругих процессов, фиксируемых при измерениях температурных зависимостей внутреннего трения (ВТ) и микроструктуру поврежденных сталей. В качестве модельного материала с графитными включениями использовали серый чугун.

Температурный спектр ВТ представлял комплекс неупругих эффектов, отражающих изменение фазового состава, перераспределение растворенных и собственных атомов, формирование суб- и микронесплошностей. Измерение ВТ проводили на образцах ($l = 200$ мм, $d = 8$ мм) сталей марок Ст3, сталь 20, а также серого чугуна СЧ15. Использовали резонансную методику (ГОСТ 25156-82) (частота изгибных колебаний $\sim 1 \cdot 10^3$ с⁻¹). ТЗВТ измеряли в диапазоне от -100 до 500 °С. Скорость нагрева 2 К/мин. На ТЗВТ идентифицировали неупругие эффекты: водородный Снука; деструкционный; релаксацию Снука (С, N); Кестера; зернограничную релаксацию.

Выявили корреляцию параметров перераспределения углерода с изменением геометрических характеристик трещин в сталях и пластин графита в чугуне. Фиксировали облегчение трещинообразования в металлической матрице чугуна вблизи пластин графита.

Подтвердили работоспособность первой гипотезы, отражающую перераспределение углерода к технологическим микротрещинам, его адсорбцию, графитизацию и доразрушение. Сложно однозначно связать указанные проявления с эффектом Ребиндера, отражающим физико-химическое взаимодействие ПАВ с матрицей.

Список публикаций:

[1]. Бунин К.Н., Данильченко Н.М. О метастабильности железоуглеродистых сплавов//ДАН СССР.-1950.-Т. 72.-№ 5.-С. 889-890.

[2]. Гегузин Я.Е. Макроскопические дефекты в металлах.-М.: ГНТИ, 1962.-252.с.

Зависимость числа двойников в поликристаллическом ОЦК сплаве Fe+3,25%Si от температуры и скорости нагружения

Кириллов Алексей Михайлович

Плужникова Татьяна Николаевна, Долгих Дмитрий Геннадьевич

Тамбовский государственный университет

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н

feodorov@tsu.tmb.ru

При деформировании в условиях пониженных температур и высоких скоростей относительной деформации механическое двойникование является одним из ведущих механизмов деформации кристаллов с различными типами решеток. В металлах наряду с двойникованием имеет место скольжение. Эти процессы, как правило, протекают одновременно, а в поликристаллических сплавах связаны с ориентацией отдельных зерен в деформируемой области, и с размерами самих зерен.

Поликристаллический ОЦК сплав Fe+3,25%Si подвержен деформацией двойникованием в исследуемом интервале скоростей деформирования $\dot{\epsilon} \approx 0,002 \div 0,66 \text{ c}^{-1}$ и температур $T=183 \div 373 \text{ K}$. Образцы ОЦК сплава, вырезанные в форме двойной лопатки с размером рабочей зоны $40 \times 9,5 \times 0,35 \text{ мм}$ и приготовленные как металлографический шлиф, предварительно травили для выявления зёрненной структуры. Порядка 80 % всех зерен имели размеры в пределе $0,025 \div 0,175 \text{ мм}$ и среднестатистический размер зерна $d_{cp}=0,12 \text{ мм}$. После испытаний на разрыв определялись размеры и число сдвойникованных зерен, а также число образованных двойников в них.

Исследования показали, что при постоянной скорости относительной деформации характерное снижение среднего числа двойников происходит с повышением температуры и уменьшением размера зерна (рис.1.а). Среднее число двойников в зерне при повышенных температурах с ростом скорости деформирования возрастает, а при низких температурах снижается. Данное изменение можно объяснить сменами механизмов деформации, в определенном смысле конкурирующих между собой: при повышении температуры переход от двойникования к скольжению, а при снижении – наоборот.

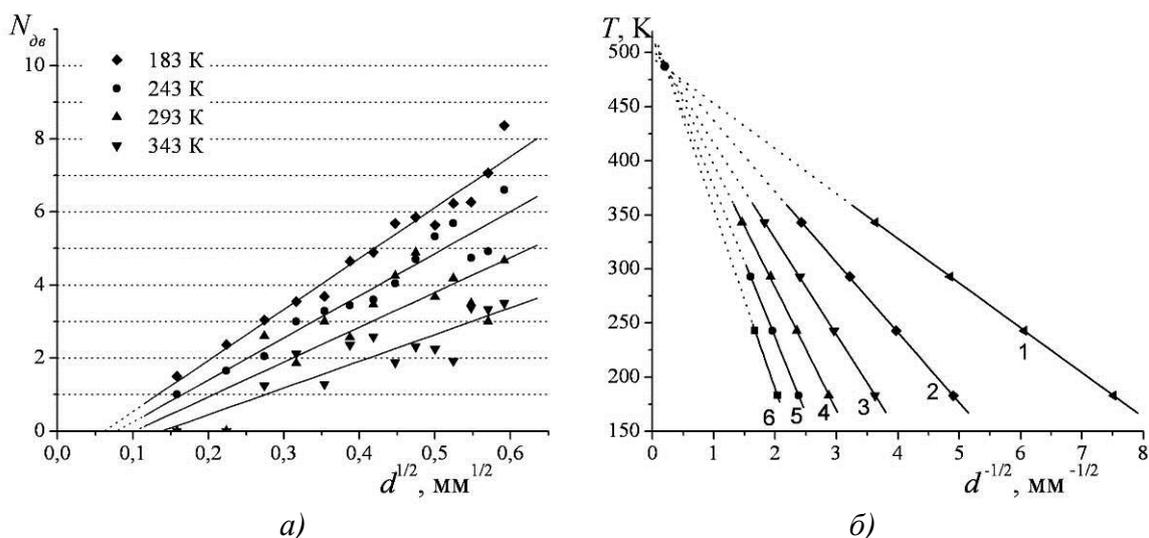


рис.1. а) Зависимость среднего числа двойников в зерне от размера зерна при $\dot{\epsilon}=0,19 \text{ c}^{-1}$; б) Влияние температуры испытаний и размера зерна на количество двойников в зерне при $\dot{\epsilon}=0,19 \text{ c}^{-1}$, где 1, 2, 3, ... – число двойников в зерне

Прямые зависимости на рис.1.а. могут быть объяснены с позиций соотношения Холла-Петча. Из рис.1.б. видно, что при превышении некоторой критической температуры $\sim 500 \text{ K}$ двойникование в этом сплаве при данной скорости деформирования наблюдаться не будет. При высоких температурах снижение скоростей деформирования до некоторых критических сопровождается исчезновением двойников.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №09-01-97514 р_центр_а)

Исследование наночастиц металлов методом РФЭС

Киямова Дарья Асхатовна

Юдин Андрей Леонидович

Кемеровский государственный университет

Юдин Андрей Леонидович, к.ф.-м.н.

dasyuska@mail.ru

Предметом интенсивных исследований в последние годы являются нанобъекты, а частности наноразмерные частицы металлов, свойства которых существенным образом отличаются от свойств, присущих массивным металлам, благодаря чему в материалах, содержащих наночастицы металлов, обнаружен ряд уникальных физических эффектов. Актуальность исследований модификации физико-химических свойств низкоразмерных систем на основе наночастиц таких металлов как Ag, Pd, Ni, Cu обусловлена тем, что данные системы могут успешно использоваться в качестве эффективных адсорбентов, катализаторов реакций химических превращений углеводородов.

Исследование химической природы поверхности и электронного состояния элементов наночастиц и адсорбентов на различных стадиях приготовления и полученных различными способами, представляют собой важные научные задачи.

Для более глубокого понимания указанных процессов целесообразна информация о свойствах серебряных частиц и изменении их электронного состояния, после проведения различных обработок, например, адсорбции молекул и ионов на серебряных частицах, а также термического воздействия. Размеры и состояние серебряных частиц влияют на те реакции, в которых они выступают в качестве катализатора. Параметры серебряных частиц, характеризующие их электронное состояние, изменяющиеся в процессе окислительных реакций, роста или термической обработки, или при адсорбции на их поверхности кислорода требуют тщательного изучения.

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) является одним из таких методов, которые чувствительны как к изменению электронных свойств подложки (металла), так и к природе адсорбента. Эти обстоятельства предопределили наш выбор РФЭС как основного метода для изучения природы частиц серебра и адсорбированного на них кислорода.

Методом РФЭС в работе был исследован широкий круг серебряных образцов: поликристаллическая серебряная фольга (массивный образец), серебряные кластеры в виде напыленных в вакууме слоев и химически синтезированные порошки наночастиц серебра. Образцы подвергались различным обработкам: адсорбция кислорода в вакууме и атмосфере и нагрев до 570 К.

Основные выводы работы.

Применен метод расчета химического сдвига для соединений серебра, основанный на комплексном учете изменения энергии связи $3d_{5/2}$ -уровня Ag, Оже-линии AgM_{5VV} , α' -фактора Вагнера, распределения плотности $4d$ -состояний серебра, положения уровня Ферми относительно потолка валентной зоны и наличия релаксации в конечном состоянии. Самую точную оценку химического состояния серебра может дать модифицированный параметр Вагнера. Дифференцирование (выделение) металлической и ионной фаз дисперсий серебра возможно с использованием при анализе формы $3d$ -линии и Оже-линий MVV серебра.

Установлено отклонение электронных свойств дисперсного серебра и нанесенных серебряных частиц от свойств массивного металла в диапазоне размеров частиц (300-500 Å и выше > 50 нм), характеризующееся ухудшением проводимости нанесенного серебра, что проявляется в эффекте дифференциальной подзарядки, изменении структуры $4d$ -зоны (валентной) и Оже-параметра, а также смещении энергии связи $3d$ -уровня Ag в сторону больших величин.

Исследована химическая топография поверхности частиц серебра. Охарактеризован поверхностный слой серебряных материалов, и установлена природа хемосорбированного на дисперсном серебре при низких температурах и в процессе последующего нагрева кислорода, которая зависит от размера нанесенных Ag частиц и природы самих частиц. Продемонстрировано, что на поверхности средних и крупных серебряных частиц (> 500 Å) в этих условиях регистрируется (образуется) молекулярно хемосорбированная форма кислорода $O_{2\text{ ад.}}$. Нагрев до $T = 370$ К, а также переход нанесенным частицам серебра приводят к трансформации этой формы в атомарную форму кислороду O с более ионным характером связи с атомами серебра.

Структурная организация в тонком слое магнитной жидкости при воздействии на неё электрического поля

Клименко Евгения Михайловна

Ставропольский государственный университет

Вегера Жанна Геннадьевна, к.ф.-м.н.

klimenkoevgeniya@mail.ru

В настоящей работе приводятся экспериментальные результаты исследования особенностей структурообразования в тонком слое магнитной жидкости под действием электрического поля. В качестве объекта исследования использовался концентрационный ряд магнитной жидкости (МЖ) типа магнетит в керосине, стабилизированная олеиновой кислотой, с объемной концентрацией дисперсной фазы φ от 0,5 до 17 об.%. Исследуемая жидкость помещалась в ячейку с плоскопараллельными прозрачными электродами с токопроводящим покрытием. Расстояние между электродами $d=50$ мкм.

Проведенные визуальные наблюдения показали, что в исходных образцах МЖ структурообразование во внешнем электрическом поле не происходит. Ранее [1] было высказано предположение, что возникновение лабиринтных структур в МЖ связано с процессами переноса и накопления заряда в приэлектродной области. С целью проверки этого предположения в образцы МЖ был добавлен йод. Йод является электроотрицательной примесью, приводит к значительному усилению диссоциационной ионизации.

В ходе данных исследований было установлено, что добавление йода в МЖ приводит к возникновению в ней лабиринтных структур под воздействием постоянного электрического поля (рис.1). Структурообразование происходит при напряженности внешнего электрического порядка 100 кВ/м. Дальнейшее увеличение напряженности приводит к развитию электрогидродинамических вихревых течений, в результате чего лабиринты приобретают подвижность и в дальнейшем разрушаются. Процессы структурообразования являются обратимыми. При выключении электрического поля структурная решетка растворится в течение нескольких секунд.

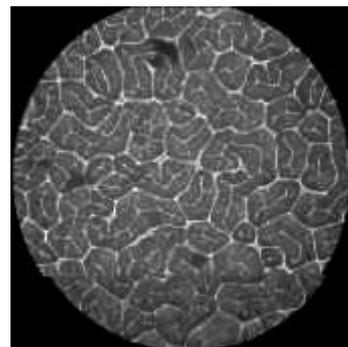


рис.1.

Измерение величины электропроводности, проведенное с помощью стандартной измерительной ячейки с платиновыми электродами, показало, что добавление йода в МЖ приводит к значительному увеличению ее электропроводности.

Таким образом, экспериментально была показана связь процессов структурообразования в тонком слое МЖ с ее электропроводностью.

Список публикаций:

[1] Вегера Ж. Г., Шацкий В. П. // Сборник научных трудов. Всероссийская научная конференция «Физико-химические и прикладные проблемы магнитных дисперсных наносистем». 2007. С.86-90

Нанокompозитные структуры на основе анодных оксидов алюминия и титана

Кокатев Александр Николаевич

Чупахина Елена Ананьевна, Яковлев Александр Николаевич

Карельский государственный педагогический университет

Яковлева Наталья Михайловна, д.ф.-м.н.

E-mail: labnm@kspu.karelia.ru

Самоорганизованные наноструктурированные оксидные пленки и покрытия, формируемые при определенных условиях электрохимического оксидирования (анодирования) алюминия, титана и их сплавов имеют огромный потенциал для использования их в нанотехнологиях. Эти материалы весьма перспективны для конструирования на их основе новых электронных, оптических устройств, сорбентов, катализаторов, биосовместимых материалов. Значительный интерес представляет разработка технологий модификации нанотрубчатых покрытий нанесением дополнительных слоев с бактерицидными свойствами.

Целью настоящей работы являлась разработка технологии создания нанокompозитного материала с антибактериальными свойствами путем модифицирования нанотрубчатой матрицы из анодных оксидов алюминия и титана серебросодержащим слоем. Нанопористые анодно-оксидные покрытия на алюминии формировались в условиях самоорганизованного роста в водных растворах щавелевой, серной кислот. Для получения нанотрубчатых оксидов проводилось анодирование титана в электролитах на основе глицерина и этиленгликоля с добавкой фтористого аммония.

Автоматизированная экспериментальная установка позволяет проводить анодирование как в гальваностатическом, так и вольтстатическом режимах с регистрацией кинетических зависимостей роста оксидов. Для нанесения серебросодержащего слоя были использованы слабые растворы азотнокислого серебра. Контроль за формированием покрытий осуществлялся методами рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопии.

Для установления антибактериального действия образцов оксидных покрытий, были использованы культуры факультативных анаэробных бактерий, относящихся к отделам *Firmacutes* и *Gracilicutes*, в исходной концентрации 5000 и 10000 кое /мл. Для приготовления данной концентрации микробных клеток использовались суточные тестовые культуры *Staphylococcus epidermidis* (стафилококка эпидермального) и *Escherihia coli* (кишечной палочки). Изучение антибактериального действия проводилось на нескольких сериях образцов, включающих (1) неанодированный металл, (2) металл, покрытый плотной оксидной пленкой, (3)

металл с нанотрубчатым оксидным покрытием, (4) металл с нанотрубчатым покрытием, модифицированным серебром.

Оценка интенсивности размножения бактерий показала, что наноструктурированные оксидные покрытия на алюминии и титане замедляют размножение эпидермального стафилококка более чем в 10 раз, а кишечной палочки – в 2,5 раза. При исследовании покрытий, модифицированных серебром, жизнеспособных бактерий обнаружено не было. Разработанные нанокompозитные покрытия могут послужить основой для устройств, применяемых для дезинфекции воздуха в помещениях путем подавления патогенной микрофлоры в воздухе.

Эпитаксиальный рост кластеров Co на поверхности Cu(100)

Колесников Сергей Владимирович

Клавсюк Андрей Леонидович

Салецкий Александр Михайлович

Московский государственный университет

Салецкий Александр Михайлович

kolesnikov_s_v@mail.ru

В связи с бурным развитием нанотехнологий, особый интерес представляет собой возможность создания носителей информации наномасштабов. Как было показано в работе [1], атомы кобальта на немагнитной металлической подложке обладают большим магнитным моментом, причем, для создания стабильного при температуре 350 К бита достаточно 400 атомов. Плотность размещения информации можно увеличить, используя в качестве носителей многослойные кластеры. Наиболее экономичным методом создания таких наноструктур является самоорганизация при эпитаксиальном росте.

Поскольку методы *ab initio* в настоящее время неприменимы для исследования больших систем, особый интерес представляют собой метод молекулярной динамики (МД) [2] и кинетический метод Монте-Карло (КМК) [3]. Совместное использование этих двух методов позволяет изучать эволюцию системы на временных масштабах вплоть до нескольких суток.

В результате моделирования эпитаксиального роста кластеров Co на поверхности Cu(100) при температурах 200 К и 300 К мы получили следующие результаты. Во-первых, при эпитаксиальном росте образуются преимущественно двухслойные острова. При этом острова Co (как в первом, так и во втором слое) эволюционируют так, чтобы принять наиболее компактную форму. Однако если при комнатной температуре острова прямоугольной формы формируются достаточно быстро (в течение 10 секунд после окончания напыления), то при температуре 200 К формирования прямоугольных островов не происходит. Во-вторых, можно выделить две стадии роста кластера Co на поверхности Cu(100): на первой стадии число атомов Co во втором слое уменьшается со временем, а на второй увеличивается до тех пор, пока второй слой полностью не покроет первый. Причем, переход от первой стадии роста ко второй происходит вследствие формирования прямоугольных островов в первом слое кластера. В-третьих, мы исследовали эффекты, связанные с изменением скорости напыления атомов Co в процессе самоорганизации.

Список публикаций

[1] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S. S. Dhesi, C. Grazioli, A Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P. H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone and H. Brune. // *Science*. 2003. 16. 1130-1133.

[2] D. W. Heerman, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer. 1990.

[3] K. A. Fichthorn and W. H. Weinberg, // *J. Chem. Phys.* 1991. 95, 1090.

Электронные свойства поверхности оксианионных кристаллов

Корабельников Дмитрий Васильевич

Кемеровский государственный университет

Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

dKorabelnikov@yandex.ru

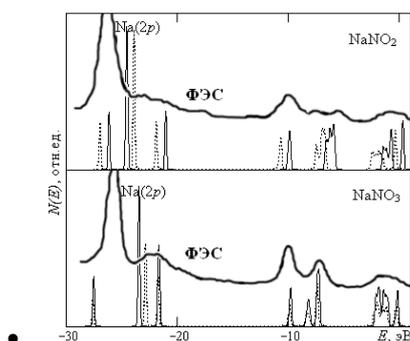
Оксианионные кристаллы обладают разнообразными физико-химическими свойствами и используются в качестве источников кислорода в твердоотопивных установках, компонентов горючих и взрывчатых смесей, технологических материалов в энергетических установках. Электронное строение оксианионных кристаллов изучалось как экспериментальными, так и теоретическими методами. Большая часть этих исследований относится к NaNO_2 и NaNO_3 . Так, в [1] они изучались методами рентгеновской и ультрафиолетовой

фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС и УФЭС). Зонная структура и поляризованные спектры отражения NaNO_2 вычислены в [2]. Спектры отражения рядов нитратов измерены и приведены в [3].

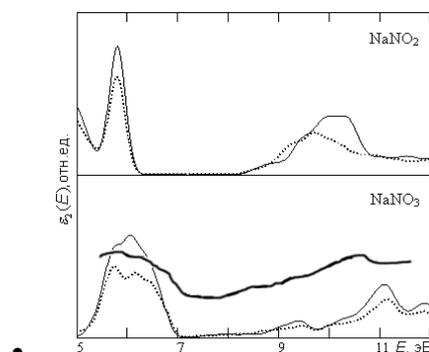
Электронные свойства поверхности изучены недостаточно, несмотря на то, что они отличаются от объёмных и могут проявлять себя в экспериментальных измерениях. Поверхность здесь определяется, как совокупность атомных слоёв, свойства которых отличны от объёмных. В данной работе приводятся результаты расчётов электронно-энергетических характеристик для поверхности и объёма нитрита и нитрата натрия.

Кристаллическая структура рассматриваемых кристаллов различна. Нитрит натрия имеет орторомбическую структуру, а нитрат относится к ромбоэдрической сингонии. Расчёты электронной структуры кристаллов выполнены с помощью пакета CRYSTAL06 [4]. Валентные электронные состояния изучались гибридным методом B3LYP [5], а оптические свойства методом функционала локальной электронной плотности LDA-DFT. Базис выбирался в виде линейных комбинаций атомных орбиталей для натрия Na_8-511G, для азота и кислорода в случае валентных состояний стандартный 6-21G [4], а для оптических функций N_6-21G* и O_8-411G [6]. Мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости вычислялась в приближении постоянного матричного элемента оператора импульса, а интегрирование по зоне Бриллюэна заменялось суммированием по равномерной сетке $8 \times 8 \times 8 = 512$ k -точек. Электронная структура поверхности рассчитывалась в приближении фиксированной геометрии кристалла, поскольку её релаксация приводит к несущественным изменениям электронных свойств [7]. Количество атомных слоёв поверхности выбиралось таким образом, что сходимость по поверхностной энергии составляла $\sim 1\%$.

На (рис.1) для NaNO_2 и NaNO_3 приведены рассчитанные плотности состояний $N(E)$ в сравнении с экспериментальными РФЭС (жирная) [1]. При этом объёмная $N(E)$, верхнее заполненное состояние, для которой принято за нуль энергии, отмечена пунктиром, а поверхностная – тонкой линией. Энергия поверхности (010) для NaNO_2 составила 0.77 Дж/м^2 , а (104) для NaNO_3 - 0.35 Дж/м^2 . Очевидно, что объёмная и поверхностная плотности состояний имеют аналогичную структуру. Однако последняя смещена в сторону больших энергий, за исключением $\text{Na}(2p)$ - состояний. Такие смещения приводят к появлению поверхностных состояний в запрещённой зоне, поэтому для полноты анализа экспериментальных спектров следует рассматривать как объёмные расчёты, так и поверхностные.



• рис.1.



• рис.2

Атомные заряды для поверхностных слоёв также различны. Так, для NaNO_2 изменение атомного заряда натрия составляет $+0.03 |e|$, атомный заряд азота уменьшается на $0.04 |e|$, а заряд кислорода увеличивается на $0.06 |e|$ (верхний слой) и изменяется на $-0.05 |e|$ (нижний слой). Для NaNO_3 изменение атомного заряда натрия составляет $+0.02 |e|$, атомный заряд азота уменьшается на $0.01 |e|$, а заряд кислорода увеличивается на $0.02 |e|$ (верхний слой) и изменяется на $-0.02 |e|$, $-0.016 |e|$ (средний и нижний слой соответственно).

На (рис.2) для NaNO_2 и NaNO_3 представлены спектральные зависимости мнимой части диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(E)$ всех соединений в сравнении с экспериментальным спектром отражения (жирная) [3]. При этом аналогично рис.1 объёмная $\varepsilon_2(E)$ отмечена пунктиром, а поверхностная – тонкой линией. Очевидно, что объёмная и поверхностная $\varepsilon_2(E)$ имеют аналогичную структуру. Однако положение второй полосы, отвечающей существенным вкладам $\text{Na}(3s)$ - состояний, несколько смещается.

Список публикаций:

- [1] Bandis C., Scudiero L., et al., *Surface Science*, 199, **422**, P.413.
- [2] Ravindran P., Delin A., et al., *Phys. Rev. B*, 1999, **59**, P.1776.
- [3] Дзюбенко Ф. А., Автореф. дисс. канд. физ.-мат. наук. Кемерово, 1986. 24 с.
- [4] Dovesi R., Saunders V. R., et al., *CRYSTAL06 User's Manual*. Torino: University of Torino. 2006. P.258
- [5] Becke A. D., *Chem J. Phys.*, **98**, 5648 (1993).
- [6] Интернет-ресурс http://crystal.unito.it/Basis_Sets/ptable.html
- [7] McCarthy M. I, Peterson K. A., Hess W. P., *J. Phys. Chem.*, 1996. **100**, P.6708.

О неравновесной кристаллизации быстрозакаленных стержней Ni-B

Корякина Дарья Сергеевна

Удмуртский государственный университет

Камаева Лариса Вячеславовна, к.ф.-м.н.

las@pti.udm.ru

Сплавы Ni-B являются основой легкоаморфизирующихся сплавов и часто используются в качестве модельных для исследования процессов затвердевания с различной степенью отклонения от состояния равновесия. Изучение особенностей кристаллизации сплавов системы Ni-B при небольших скоростях охлаждения ($<100^\circ\text{C}/\text{мин}$) показало возможность образования метастабильной фазы вблизи эвтектического состава (Ni_{23}B_6 [1], Ni_4B [2]). Метастабильная фаза Ni_{23}B_6 является изоморфной тройному соединению $(\text{Fe},\text{Ni})_{23}\text{B}_6$ и распадается при нагреве по перитектоидной реакции на Ni и фазу, обогащенную бором, Ni_2B [1]. По данным работы [2] в сплавах системы Ni-B (с содержанием 21,8; 22,4 и 22,95 ат.% B) непосредственно из расплава образуется метастабильная фаза Ni_4B в процессе охлаждения эта фаза распадается на равновесные фазы уже через $200\text{-}300^\circ\text{C}$ после ее образования. По мнению авторов [2], образование метастабильной фазы на первых этапах кристаллизации является следствием особого структурного состояния расплава исследуемой системы – реализацией в области концентраций 15-20 ат.%B в жидкой фазе локального порядка с химическим упорядочением типа Ni_4B [3]. Однако, проведенные исследования процессов затвердевания сплавов Ni-B при высоких скоростях охлаждения показали, что при увеличении скорости охлаждения расплава до $10^4\text{-}10^5^\circ\text{C}/\text{с}$ концентрационная область образования метастабильной фазы резко снижается. Продукты распада метастабильной фазы наблюдаются только в лентах $\text{Ni}_{81}\text{B}_{19}$. В связи с этим возникает задача исследования температурно-концентрационных условий образования метастабильной фазы при скоростях от 10^2 до $10^3^\circ\text{C}/\text{с}$.

В данной работе методами РСА и металлографии проведены исследования особенностей кристаллизации быстрозакаленных стержней сплавов системы Ni-B (составов 8,6; 17,7; 19,2; 20,7; 27,7 ат.%B). Стержни получали насыщением расплава в кварцевые капилляры с внутренним диаметром 4мм и последующей закалкой в холодную воду. Один конец капилляра был свободным, а на другом располагался медный стержень – холодильник. Таким образом, в процессе закалки расплава, скорость охлаждения варьировалась от $10^3^\circ\text{C}/\text{с}$ - у медного охладителя до $10^2^\circ\text{C}/\text{с}$ - на противоположном конце.

Проведенный рентгеноструктурный анализ исследованных сплавов Ni-B показывает, что при комнатной температуре фазовый состав является равновесным: $\alpha\text{-Ni}$ и Ni_3B . Однако исследования микроструктуры стержней Ni-B указывают на существенно неравновесный характер кристаллизации сплавов в выбранных условиях охлаждения. В области концентраций 17,7-20,75 ат.%B наблюдается образование метастабильной фазы. В сплаве с содержанием бора 17,7 ат.%B метастабильная фаза образуется после образования первичных дендритов $\alpha\text{-Ni}$ по перитектической реакции с ними, затем образуется равновесная эвтектика $\alpha\text{-Ni} + \text{Ni}_3\text{B}$ при последующем охлаждении метастабильная фаза распадается. Причем, металлографические исследования по длине стержня показывают, что в непосредственной близости от охладителя ($V_{\text{охл}} \div 10^3^\circ\text{C}/\text{с}$) областей со структурой распада метастабильной фазы не наблюдается. Максимальное количество таких областей наблюдается на противоположном конце стержня, где скорость охлаждения составляла $10^2^\circ\text{C}/\text{с}$. В сплавах с содержанием бора 19,2 и 20,75 ат.% метастабильная фаза образуется после выделения первичных кристаллов Ni_3B , как вторая составляющая метастабильной эвтектики и при дальнейшем охлаждении распадается. В сплаве $\text{Ni}_{80,8}\text{B}_{19,2}$ ат.%B метастабильная фаза образуется по всей длине стержня т.е. во всем диапазоне скоростей охлаждения. В сплаве с содержанием бора 20,75 ат.% метастабильная фаза не образуется в непосредственной близости от охладителя, т.е. при максимальной скорости охлаждения.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что наблюдаемая в системе Ni-B метастабильная фаза уже при скорости $10^3^\circ\text{C}/\text{с}$ образуется только в сплаве с содержанием бора 19,2 ат.%, в других сплавах при таких скоростях охлаждения наблюдается равновесная структура, уменьшение скорости охлаждения до $10^2^\circ\text{C}/\text{с}$ приводит к расширению концентрационного интервала существования метастабильной фазы. По-видимому, область существования метастабильной фазы находится при высоких температурах в очень узком температурном интервале. Поэтому увеличение скорости охлаждения, а как следствие и переохлаждения, в условиях которого начинается кристаллизация приводит к смещению начала кристаллизации ниже области существования метастабильной фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 08-03-00609-а.

Список публикаций:

[1] Battezzati L., Antonione C., Baricco M. *Undercooling of Ni-B and Fe-B alloys and their metastable phase diagrams – Journal of Alloys and Compounds* 247,164-171(1997)

[2] Волков В.А., Ладынов В.И., Зайцев А.В., Ерочкина С.А., Волкова Л.Ю. *Расплавы*, №1 с. 26-30 (1997)

[3] Ладынов В.И., Лозунов С.В., Бельтюков А.Л. *Расплавы*, №2 С. 90-96 (2003)

Поверхностные образования в ионных кристаллах при термоэлектрическом воздействии

Кочергина Юлия Алексеевна
Карьев Леонид Геннадьевич, Зайцев Сергей Анатольевич
Тамбовский государственный университет
Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.
feodorov@tsu.tmb.ru

Экспериментально установлено, что под действием электрического поля и нагрева происходит изменение поверхностей ионных кристаллов [1].

Цель работы – исследование морфологии поверхностей ионных кристаллов легированных металлами при воздействии электрического поля и одновременного нагрева.

Исследовали образцы NaCl, LiF размером $20 \times 8 \times (2-3)$ мм, которые выкалывались из крупных кристаллов по плоскостям спайности. В образцах искусственно зарождали трещину по плоскости (100) длиной ≈ 15 мм, в которую вводили металлическую фольгу из алюминия или сплава на основе Fe (73,5%) толщиной ≈ 20 мкм, перекрывающую $\approx 20\%$ поверхности трещины от вершины проволоку из золота диаметром ≈ 30 мкм. Затем образец помещался между электродами с напряжением 400 В, электрическое поле было ориентировано нормально к плоскости (100). Комплекс «кристалл-металл» помещался в печь, где осуществлялся его нагрев до 873 К со скоростью 200 К/ч. После чего образец в течение часа выдерживали при заданной температуре и напряжении между электродами 400 В. Сила тока при этом составляла 10-20 мА. Охлаждали образцы со скоростью 50 К/ч вместе с печью. Напряжение на образце и температуру контролировали прибором «Н 307/2».

После охлаждения в образцах NaCl наблюдали трещины по плоскости (010). Растрескивание кристалла происходило по все длине независимо от расположения металлической фольги. На поверхностях, образующихся при растрескивании обнаружены множественные ступени скола.

Появление трещин связано с тем, что Fe и Al имеют размеры радиусов ионов меньше чем Na. В результате диффузии под действием электрического поля и одновременного нагрева происходит замещение ионов Na, что приводит к смещению ионов Cl и как следствие возникновению растягивающих напряжений.

При исследовании поверхности трещины (100) в NaCl наблюдали внутрикристаллические поры, расположенные симметрично на противоположных поверхностях трещины. Наблюдается преимущественное расположение пор в направлении 45° к ориентации силовых линий прикладываемого электрического поля. Кроме того, обнаружена некоторая самоорганизация в расположении пор, образующих сотовую структуру.

Автором [2] было обнаружено появление изменений поверхностей щелочногалоидных кристаллов под влиянием поверхностных токов в виде капель вязкого вещества, а также кристаллизация вещества новообразований в процессе вылеживания при комнатной температуре (рис. 1.а).

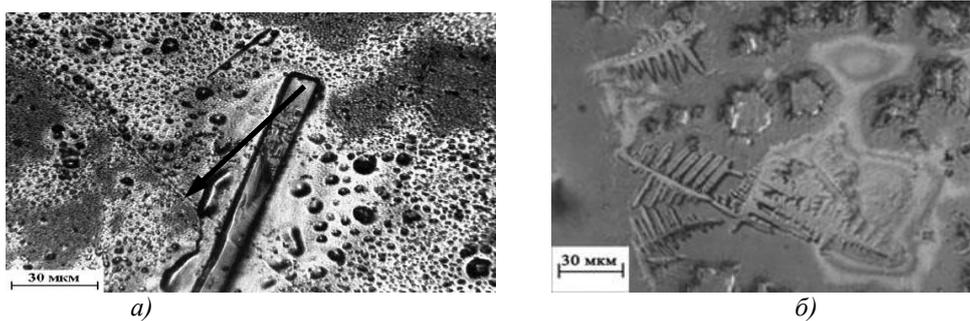


рис. 1. Материал LiF а) содержащий микрокристаллы в области существования «капель» (отмечено стрелкой), б) дендритная кристаллизация.

В образцах LiF (при выдерживании их при температуре 873 К и напряжении 400 В в течение часа) наблюдали рост кристаллов на поверхности искусственно вводимой трещины (рис. 1.б), что связано с локальным разогревом приповерхностных областей в ходе эксперимента и последующей кристаллизацией при остывании образца.

Список публикаций:

- [1] Карьев Л.Г., Федоров В.А., Мексичев О.А. Аккумуляция электрического заряда у поверхности ионных кристаллов при нагреве в электрическом поле, *Физика и химия обработки материалов*, 5, 87-89(2002).
[2] Мексичев О. А. Поведение поверхностей скола щелочногалоидных кристаллов при воздействии электрического поля в области предплавления температур, *Дис. канд. физ.-мат. наук 01.04.07. ТГУ им.Г.Р. Державина*, 42 (2004).

Об особенностях вязкости и процессах кристаллизации расплавов Al-Y (до 10 ат.%Y)

Кравец Екатерина Михайловна
Удмуртский государственный университет
Меньшикова Светлана Геннадьевна
svetlmensh@mail.ru

Большой интерес в последние годы привлекают сплавы на основе алюминия (80-90 ат.% Al) с ПМ и РЗМ металлами в аморфном или аморфно-кристаллическом состояниях, эксплуатационные свойства (прочность, пластичность, сопротивление коррозии) которых выше свойств их кристаллических аналогов [1]. Одним из основных методов получения аморфных сплавов является сверхбыстрая закалка расплава. Температурно-временная обработка (ТВО) последнего позволяет дополнительно улучшать служебные свойства сплава. При выборе оптимальных условий ТВО расплава часто используются данные о температурных и временных зависимостях их структурно-чувствительных свойств, в частности, кинематической вязкости (ν).

Ранее нами было обнаружено немонотонное поведение политерм ν жидкого модельного стеклообразующего сплава Al87Ni8Y5 [2] в режиме нагрева и гистерезис этих политерм при последующем охлаждении. Временные зависимости ν также имеют немонотонный характер. Вблизи ликвидуса время релаксации расплавов (установление стабильных значений ν) составляет порядка 3 часов и уменьшается с увеличением температуры расплава. Предполагалось [2], что немонотонное изменение вязкости обусловлено разрушением микрогетерогенного состояния расплава, унаследованного от многофазного твердого образца. Микрогетерогенное состояние расплава после плавления обусловлено наличием в нем неравновесных микрогруппировок атомов на основе тугоплавких химических соединений Al3Ni и Al3Y, которые со временем распадаются.

С целью подтверждения высказанного предположения о природе аномалий на политермах и временных зависимостях вязкости тройного сплава Al87Ni8Y5 были исследованы более простые системы: Al-Ni и Al-Y с содержанием второго элемента до 10 ат.%. В работе [3] показано, что температурные зависимости ν расплавов бинарной системы Al-Ni не отличаются особенностями: значения и характер зависимости политерм ν , полученные в режимах нагрева и охлаждения, совпадают (гистерезис отсутствует). На временных зависимостях ν расплавов Al-Ni какие-либо аномалии также отсутствуют.

В настоящей работе методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом [4] исследованы температурные и временные зависимости ν расплавов системы Al-Y (до 10 ат.%Y). На политермах всех исследованных расплавов наблюдается гистерезис: значения ν , полученные в режиме нагрева, выше значений, полученных при последующем охлаждении. Температура начала гистерезиса повышается с увеличением содержания Y в сплаве. Значения вязкости и характер зависимости $\nu(t_0)$, полученные в режиме нагрева, хорошо воспроизводятся при повторном нагреве образца. Все временные зависимости получены после нагрева от комнатной температуры и имеют немонотонный характер. Равновесие в расплавах устанавливается в течение длительного времени (t_g), которое уменьшается с увеличением температуры расплава. В частности, для состава Al99Y1 при 730oC t_g составляет ~ 150 минут, существенно уменьшается при 900oC и составляет ~ 40 минут.

На основании характера полученной временной зависимости вязкости ν методом закалки образцов в воду и с помощью дифференциального термического анализа (ДТА) были получены твердые образцы Al99Y1. Образцы получали охлаждением от 730oC со скоростями ~100 град/с (закалка в воду) и 100 град/мин (ДТА) после 5 - , 30 - , 60 - и 180 - и минутной изотермических выдержек. Микроструктура полученных образцов наблюдалась в микроскопах Neophot 21и Eriquant и фотографировалась с помощью цифрового фотоаппарата.

Рентгеноструктурный анализ показал, что структуры всех полученных твердых образцов Al99Y1 содержат две фазы: α -Al и Al3Y. На термограммах ДТА образцов Al99Y1, полученных при охлаждении со скоростью 100 град/мин, независимо от времени изотермической выдержки и температуры расплава, зафиксированы два пика тепловыделения, что соответствует диаграмме фазовых равновесий [5]. Все образцы, полученные при охлаждении со скоростью 100 град/мин, кристаллизуются по однотипному механизму: в две стадии. Кристаллизация начинается с образования и роста первичных кристаллов α -Al, чему соответствует первый пик на термограмме охлаждения. На микроснимках фиксируются крупные округлые сечения первичных кристаллов. Второй пик на термограмме охлаждения сплава Al99Y1 соответствует кристаллизации эвтектики, составляющими которой, согласно рентгенофазовому анализу, являются фазы α -Al и Al3Y. При достаточно больших увеличениях видно, что эвтектика имеет нормальную ячеистую структуру. Каких-либо дополнительных особенностей в микроструктуре этих образцов металлографическим анализом не обнаружено.

Ситуация изменяется при увеличении скорости охлаждения расплава до 100 град/с. Слиток после 5-и минутной изотермической выдержки, отличается от слитков с другим временем выдержки при 730oC более крупной структурой первичных кристаллов α -Al. Кристаллизация осуществляется по принципу гетерогенного

зародышеобразования. Остатки микрогетерогенных группировок, распределенные по всему объему расплава, по-видимому, служат дополнительными центрами кристаллизации. Происходит множественное зарождение первичных кристаллов α -Al, кристаллы ветвятся, их рост тормозится. В междендритных промежутках кристаллизуется фаза Al₃Y. Согласно нашим предположениям, увеличение времени изотермической выдержки до 30-ти или 60-ти минут должно приводить к уменьшению концентрации остаточной микрогетерогенности, т.е. к более однородному состоянию расплава. По-видимому, за счет этого возрастает переохлаждение расплава, что приводит к более тонкоразветвленной форме дендритов первичного алюминия и измельчению микроструктуры в целом. Таким образом, структура получаемых в результате быстрого охлаждения (закалкой в воду) слитков зависит от времени изотермической выдержки, что может служить подтверждением нашего предположения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 08-03-90415-Укр_а.

Список публикаций

- [1] Inoue A, Ohtera K, Masumoto T. *Jpn J Appl Phys*, 27:L736 (1988).
 [2] Меньшикова С.Г., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И., Маслов В.В. Об особенностях вязкости расплавов Al-Ni-Y. В сб.: Труды XII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов» - Т.2. Экспериментальное изучение жидких и аморфных металлических систем и их взаимосвязь с кристаллическим строением. Екатеринбург.: УрО РАН, 44-47 (2008).
 [3] Lad'yanov V.I., Men'shikova S.G., Bel'tyukov A.L. On viscosity features of the Al-Ni melts // Book of Abstracts of the 4-th Noclams Workshop «New Opportunities and Challenges for Liquid and Amorphous Material Science», Grenoble, France, 46-47 (2008).
 [4] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // Приборы и техника эксперимент, № 2,155-161 (2008).
 [5] Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3 т.: Т.1 / Под общей ред. Н.П. Лякишева.-М.: Машиностроение, 992с. (1996).

Сравнительная характеристика карбонизирующего действия на поливинилиденфторида рентгеновского облучения и бомбардировки ионами

Кувшинов Алексей Михайлович

Грибов Игорь Васильевич, Москвина Наталья Анатольевна, Кузнецов Вадим Львович, Евсюков Сергей Евгеньевич
 Челябинский государственный педагогический университет

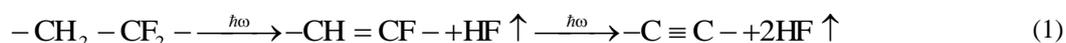
Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.

kuvshinov_am@list.ru

Сравнение различных способов карбонизации ПВДФ актуально для решения научной проблемы синтеза карбиноидов и практического использования ПВДФ и его модифицированных производных, например, для создания элементной базы для микро- и нанoeлектроники, получения функциональных материалов, в частности – молекулярных магнетиков и материалов эмиссионной электроники, в медицинских целях. ПВДФ как исходный материал для карбиноидов ценен устойчивостью углеродных цепей к ионизирующим и химическим воздействиям. В данной работе выбраны радиационные способы карбонизации, преимуществом которых является возможность мониторинга процесса *in situ* с помощью фотоэлектронной спектроскопии и возможность управления степенью карбонизации изменением поглощенной дозы.

Проведены эксперименты по карбонизации поверхности частично кристаллической пленки ПВДФ ((CH₂-CF₂)_n), марки Кунаг под воздействием рентгеновского облучения Al K α _{1,2} совместно с потоком электронов различных энергий (5-1200 эВ) и ионов Ag⁺ с энергией 600 и 720 эВ и дозой 2·10¹⁴-1·10¹⁸ ион/см². Эксперименты проводились в вакуумной камере спектрометра ЭС ИФМ-4 (ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург) при давлении порядка 10⁻⁷ Па. Электроны эмитировались алюминиевой фольгой, фильтрующей немонахроматическое излучение Al K α _{1,2}, используемое для возбуждения фотоэлектронных спектров. Образец находился под положительным потенциалом, что вызывало бомбардировку его электронами. Одновременно с электронной бомбардировкой измерялись фотоэлектронные спектры образца в различных диапазонах энергий связи (в частности – спектры C1s и F1s электронов). Источником ионов служила ионная пушка, установленная в вакуумной камере. В серии экспериментов с ионами Ag⁺ бомбардировка чередовалась с измерением спектров.

Для каждого образца производился по методике, подобной примененной ранее в [1], компонентный анализ спектров C1s электронов, результаты которого указывают на последовательный характер процесса карбонизации:



Степень карбонизации поверхности характеризовалась отношением F/C числа атомов фтора и углерода, рассчитанным для различных моментов времени исходя из обнаруженного числа CF- и CF₂-групп. Образцы, подвергавшиеся различным видам радиационного воздействия, сравнивались при равных величинах F/C. Как отмечалось ранее [2], рентгеновское облучение и бомбардировка ионами приводят к близким результатам по химическому составу образца (фтор распределен между CF₂- и CF-группами практически одинаково) и по распределению остаточного фтора по глубине образца.

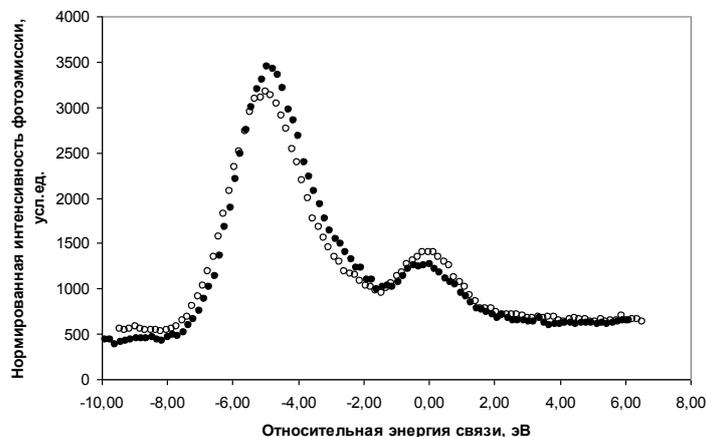


рис. 1. Спектры C1s-электронов при карбонизации образца рентгеновским облучением (○) и ионной бомбардировкой (●). Приведены спектры для F/C = 0,45. Шкала энергий связи нормирована по положению CF₂-компонента

Сравнительный анализ спектров C1s-электронов (рис. 1) при равных F/C показывает существенное различие в структуре продуктов при различных способах радиационной карбонизации. Наиболее явно указывает на указанные отличия разное энергетическое положение пика с меньшей энергией связи в спектрах частично карбонизованных образцов. Данный пик образуется при наложении, по крайней мере, трех энергетических состояний атомов углерода (в порядке убывания энергии связи): атомов, находящихся в СН₂- и СН-группах в полимерных цепях (1), «чистых» атомов углерода, находящихся в полимерных цепях (2) и атомов, находящихся вне цепочек исходного полимера (3). Различие энергетических положений в данном случае обусловлено различной величиной вторичного химического сдвига, возникающего при связи с атомами углерода, связанными с более электроотрицательным фтором. В случае ионной бомбардировки атомов, находящихся в последнем состоянии существенно меньше, чем при рентгеновском облучении, а при F/C < 0,5 такое состояние вообще не обнаруживается. Это позволяет сделать предположение о том, что вследствие ионной бомбардировки происходит объединение исходных полимерных цепей с внецепочечными углеродными образованиями. При воздействии на образец рентгеновского излучения и потока вторичных электронов такой эффект отсутствует. Предположительно объединение происходит по механизму сшивки, что приводит к образованию углеродных структур с sp²-гибридизацией.

Список публикаций:

- [1] Alexey Kuvshinov, Leonid Pesin, Sergey Chebotaryov, Mikhail Kuznetsov, Sergey Evsuykov, Tatiana Sapozhnikova and Alexander Mirzoev. Kinetics of Radiation-induced Carbonization of Poly (vinylidene fluoride) Film Surface, *Polymer Degradation and Stability*, 93 (2008) p. 1952–1955;
- [2] Кувшинов А.М., Евсюков С.Е., Грибов И.В., Москвина Н.А., Кузнецов В.Л. Карбонизация поверхности поливиниленфторида (ПВДФ) бомбардировкой заряженными частицами, *Материалы и тезисы докладов Четырнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-14)*, с. 116–117

Оптические свойства и морфология гетерогенных сред на основе полиакрилонитрила и наночастиц серебра

Кудряшов Михаил Александрович

Машин Александр Иванович, Джузеппе Кидикимо, Джованни Де Филло

Нижегородский государственный университет

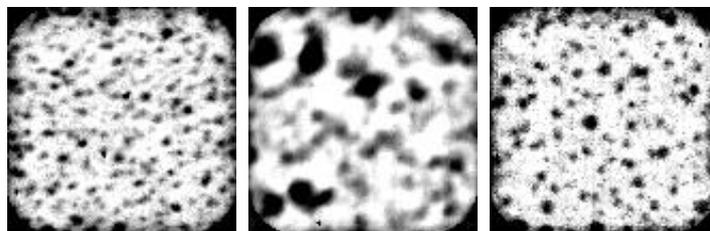
Машин Александр Иванович, д.ф.-м.н.

Kudryashov@phys.unn.ru

Гетерогенные среды с наночастицами благородных металлов представляют большой практический интерес из-за их необычных оптических и электронных свойств. Эти наноматериалы нашли возможные применения в электронике, нелинейной оптике, химических и биохимических преобразователях, и в катализе. Из-за возбуждения поверхностных плазмонов наночастицы серебра, золота и меди могут показать сильные полосы электронного поглощения в видимой области спектра. Размер, форма и структура наночастиц определяют свойства гетерогенных сред и, поэтому, разработка новых способов синтеза наноматериалов с определенной морфологией является очень важной целью исследований. Учитывая, что наночастицы в растворе имеют тенденцию формировать кластеры в течение процесса получения, если должна быть получена стабильная дисперсия, то важен контроль взаимодействий частица - частица. Полимеры в растворе признаны превосходными связующими материалами для формирования устойчивой коллоидной дисперсии металлов, таких как Pd, Pt, Ag и Au. Существует много различных методов получения данных систем. В последнее время, значительное внимание было обращено к синтезу наночастиц металла в матрицах полимера методом поликонденсации, который включает растворение и восстановление солей/или комплексов металлов одновременно с полимеризацией исходного мономера.

Исследуемые в данной работе композиты наночастицы серебра/полиакрилонитрил (НЧ-Ag/ПАН) были получены методом разделения фаз, индуцированного полимеризацией в присутствии фотоинициатора Irgacure 651. Полимеризация осуществлялась при помощи ультрафиолетовой (УФ) лампы с длиной волны $\lambda = 365$ нм. Для получения полимерной матрицы использовался мономер акрилонитрил. В качестве соли металла применялся нитрат серебра (AgNO_3). Размеры наночастиц (НЧ) серебра и их плотность рассчитывались с помощью программного пакета SpmLab из снимков образцов, полученные на просвечивающем электронном микроскопе. Спектральные характеристики пленок в диапазоне $0.3 \div 0.8$ мкм исследовались на спектрофотометре Cary 5000. Инфракрасные спектры на пропускание снимались на ИК-Фурье спектрометре Spectrum BX II.

На *рис. 1* показаны изображения просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), которые отображают эволюцию размера и дисперсии частиц от количества AgNO_3 и фотоинициатора. При увеличении содержания нитрата серебра от 10 до 15% (при концентрации инициатора 2%) диаметр частиц возрастал (от ~ 5 до ~ 10 нм), а их плотность падала (от $\sim 6 \times 10^{16}$ до $\sim 10^{16}$ см^{-3}). По-видимому, здесь имеет место коалесценция наночастиц, поэтому с ростом концентрации AgNO_3 возникают более крупные частицы, имеющие меньшую плотность распределения. Напротив, при увеличении содержания фотоинициатора в диапазоне $0 \div 25$ % частицы серебра уменьшались в диаметре (от ~ 12 до ~ 2 нм), а их плотность росла (от $\sim 10^{16}$ до $\sim 5 \times 10^{17}$ см^{-3}). Это можно связать с зародышеобразованием новых наночастиц, что в свою очередь ведет к уменьшению размеров частиц в процессе роста. Из исследований морфологии также обнаружено, что данные композитные среды имеют однородную дисперсию и малый разброс по размерам наночастиц серебра.



a

б

в

рис. 1. Изображения ПЭМ (150 x 150 нм) от композитов НЧ-Ag/ПАН при различных концентрациях AgNO_3 и фотоинициатора в исходной смеси: а) 10% AgNO_3 , 2% фотоинициатора, б) 15% AgNO_3 , 2% фотоинициатора и в) 15% AgNO_3 , 5% фотоинициатора.

Спектры пропускания от структур, полученных при различных интенсивностях УФ-лампы (*рис. 2*), показали наличие минимума в области 420 нм, характерного для плазмонного резонанса от наночастиц серебра. Выявлено, что интенсивность УФ-лампы влияет на спектры пропускания. Минимум на спектре отсутствует при интенсивности 2450 $\text{мВт}/\text{м}^2$, а при 1550 $\text{мВт}/\text{м}^2$ он наиболее ярко-выражен.

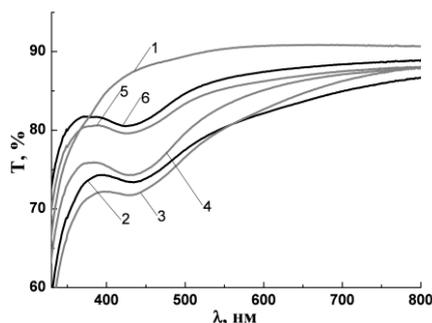


рис. 2. Спектры пропускания от композитов НЧ-Аг/ПАН, полученных при различных интенсивностях УФ-лампы, mWt/m^2 : 1 - 2450, 2 - 2100, 3 - 1800, 4 - 1550, 5 - 1350 и 6 - 1150.

Обнаружена также зависимость спектров пропускания наших нанокompозитов от времени полимеризации. Изменение спектров, можно соотнести с незаконченной полимеризацией при меньших временах воздействия УФ, а также старением структур при более продолжительном облучении. Спектры отражения от данных структур особенностей не проявили.

ИК-спектр от акрилонитрила показал наличие узкого глубокого минимума в диапазоне $1420\text{-}1410\text{ см}^{-1}$, связанного с колебаниями двойной связи -CH=CH_2 . На спектре полиакрилонитрила, полученного фотополимеризацией при времени воздействия УФ 90 мин, этот минимум отсутствует, что говорит о законченной полимеризации исходного мономера за данное время экспозиции. Однако на ИК-спектрах композитов НЧ-Аг/ПАН выявлены характерные минимумы, свойственные акрилонитрилу, что может быть связано с частичной полимеризацией данного мономера в присутствии нитрата серебра.

Синтез композитных сред методом поликонденсации позволяет контролировать размер и плотность частиц, а также получать структуры с малым разбросом по размерам и однородной дисперсией частиц. Контроль размера частиц может быть достигнут посредством изменения содержания соли металла и фотоинициатора в исходной смеси. Кроме того, необходимо учитывать такие параметры получения, как температуру, интенсивность УФ-лампы и время экспозиции. Поскольку ПАН является важным конструкционным полимером, нанокompозиты ПАН, возможно, легко найдут новые промышленные применения.

Анализ оптического спектра иона Tm^{3+} в эльпасолите в приближении сильного конфигурационного взаимодействия

Ларионова Наталья Николаевна

Витебский государственный технологический университет

Корниенко Алексей Александрович, д.ф.-м.н.

a_a_kornienko@mail.ru

В последнее время исследование оптических свойств высоко симметричных систем привлекло пристальное внимание экспериментаторов и теоретиков. Это объясняется тем, что методами двухфотонной спектроскопии удалось надежно выделить и измерить положение без фонные линии. По результатам этих измерений можно затем определить энергии штарковских компонент мультиплетов, расщепленных статическим кристаллическим полем. Даже для ионов с конфигурацией $f^2(f^{12})$ количество экспериментально измеренных штарковских компонент больше 29, что существенно превышает количество независимых параметров (для кубической симметрии 2) в классическом гамильтониане кристаллического поля.

Наличие достоверных экспериментальных данных и всего два свободно варьируемых параметра в гамильтониане создают благоприятную ситуацию для проверки адекватности классического гамильтониана кристаллического поля. Расчеты показали, что классический гамильтониан кристаллического поля не обеспечивает удовлетворительной точности описания. Было предложено несколько методов улучшения описания [1,2]. Однако для иона Tm^{3+} в эльпасолите $\text{Cs}_2\text{NaTmF}_6$ эти методы не приводят к лучшему описанию, чем классический гамильтониан кристаллического поля.

В связи с этим в данной работе для описания штарковского расщепления мультиплетов иона Tm^{3+} в эльпасолите $\text{Cs}_2\text{NaTmF}_6$ применяется гамильтониан кристаллического поля в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [3].

$$\begin{aligned}
H_{cf} = & E_{\gamma J} \delta_{\gamma J m, \gamma' J' M'} + \\
& + \sum_k \sum_{q=-k}^k \left\{ B_q^k + \left(\frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{\gamma J}} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{\gamma' J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \right. \\
& \left. + \sum_i \left(\frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{\gamma J}} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{\gamma' J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $E_{\gamma J}$ – энергия мультиплетов, Δ_d – энергия возбужденной конфигурации $5f^{N-1}6d$ (для лантаноидов – $4f^{N-1}5d$); Δ_{ci} – энергия конфигураций с переносом заряда, \tilde{G}_q^k – параметры, обусловленные возбужденной конфигурацией.

Установлено, что аномальное расщепление мультиплетов 1D_2 , 1G_4 , 3F_2 и 3F_4 обусловлено влиянием конфигураций с переносом заряда. Учет этого влияния позволяет существенно улучшить описание штарковского расщепления мультиплетов.

Список публикаций:

- [1] Thorne J.R.G., Jones M., McCaw C.S., Murdoch K.M., Denning R.G., Khaidukov N.M., *J. Phys.: Condens. Matter* 11, 7851–7866 (1999)
[2] Tanner P.A., Faucher M.D., *Chemical Physics Letters* 445, 183–187 (2007)
[3]. Dunina E.B., Kornienko A.A., Fomicheva L.A., *Cent. Eur. J. Phys.* 6(3), 407-414 (2008)

Первопринципная динамика решетки азидов металлов

Лукьяненко Юлия Владимировна

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович

lukjuanenkova@hotmail.ru

К настоящему времени электронная структура азидов металлов достаточно хорошо исследована и это является основой перехода к рассмотрению и динамических свойств данного класса соединений с использованием первопринципных методов расчета. В данной работе рассмотрены основные типы этих соединений, которые включают азиды щелочных металлов – азиды лития и натрия (LiN_3 , $\alpha\text{-NaN}_3$, $\beta\text{-NaN}_3$).

Кристаллы LiN_3 и $\alpha\text{-NaN}_3$ кристаллизуются в моноклинной системе. Элементарная ячейка имеет одну формульную единицу. Как и во всех азидах, анион представляет собой линейную молекулу, построенную из трех атомов азота, с эквивалентными по симметрии концевыми атомами. В структуре азидов лития и натрия линейный анион занимает симметричную позицию, и положение центрального атома совпадает с центром инверсии. Пространственная группа симметрии моноклинных кристаллов C_{2h}^3 . β -фаза азиды натрия принадлежит к ромбоэдрической системе и также имеет одну формульную единицу в элементарной ячейке. Молекулярный анион расположен точно вдоль тригональной оси, пространственная группа симметрии D_{3d}^5 .

В расчете динамики решетки первым шагом является вычисление электронной структуры. Для азидов металлов эти расчеты выполнялись ранее. Расчеты динамики решетки азидов металлов проводились на основе метода линейного отклика в базисе плоских волн.

На рисунке 1 (слева) показана низкочастотная часть фононного спектра LiN_3 . Данная область расположена в интервале частот до 600 см^{-1} [1], за которой расположена область частот шириной порядка 250 см^{-1} с максимумом при 400 см^{-1} . Далее наблюдается малодисперсная зона частот со значениями немного превышающими 600 см^{-1} . Выше располагаются зоны частот внутренних колебаний – $1350\text{-}1400 \text{ см}^{-1}$ и $2000\text{-}2100 \text{ см}^{-1}$, которые соответствуют симметричным и ассиметричным растяжениям азид-иона N_3^- . Подобная картина наблюдается для $\alpha\text{-NaN}_3$ (рис.1 (справа)).

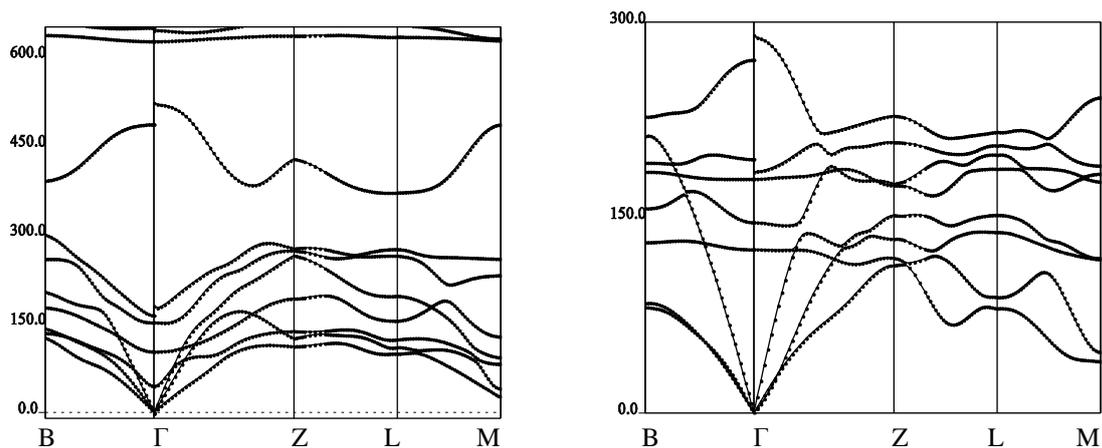


рис.1 Фононные спектры азидов LiN_3 (слева) и $\alpha\text{-NaN}_3$

На рисунке 2 показаны результаты для ромбоэдрической модификации азида натрия $\beta\text{-NaN}_3$. Слева приведен полный спектр частот, включающий все типы колебаний. Здесь наблюдаются 4 хорошо разделенные группы зон частот. Нижние полосы внутримолекулярных колебаний практически не имеют дисперсии в отличие от ассиметричных колебаний N_3^- , которая имеет ширину около 100 cm^{-1} . Как и для моноклинных азидов лития и натрия, значительная дисперсия в самой высокочастотной полосе также наблюдается и для ромбоэдрических кристаллов. В ранних работах по динамике решетки азидов металлов высказывалось предположение о том, что дисперсия частот этого типа колебаний может быть довольно значительной, однако подтверждающих результатов не было. Для LiN_3 и NaN_3 эта особенность проявляется достаточно стабильно. На рисунке 2 (справа) более подробно показана фононная зонная структура для области частот до 300 cm^{-1} .

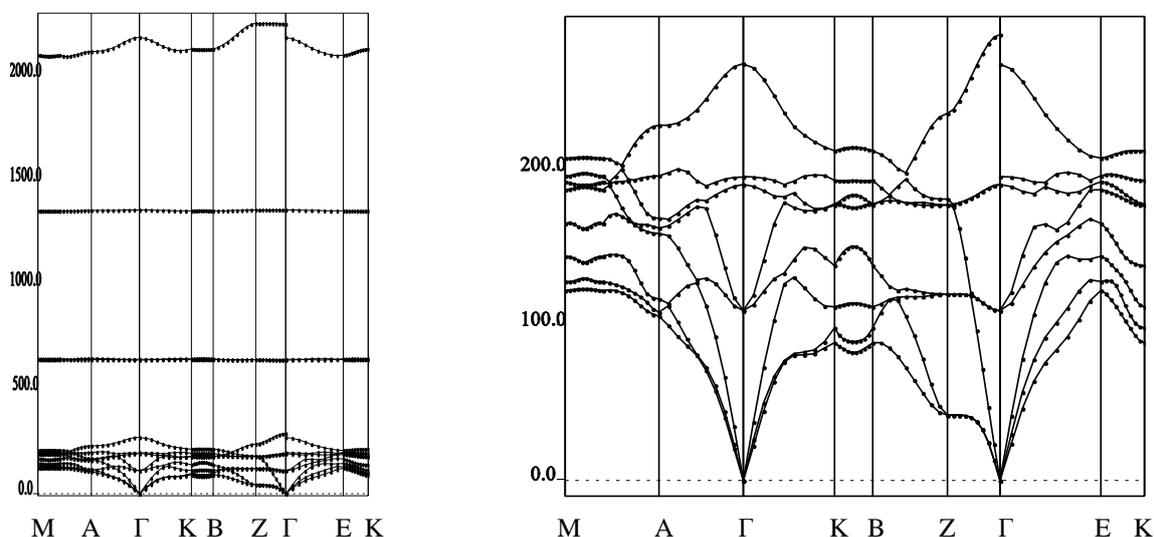


рис.2 Спектр частот (слева) и фононная зонная структура (справа) ромбоэдрического азида натрия $\beta\text{-NaN}_3$

В работе впервые выполнены первопринципные расчеты динамики решетки азидов LiN_3 и NaN_3 , получена дисперсионная зависимость во всей зоне Бриллюэна, плотность состояний. Результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Список публикаций:

[1] Fair H.D., Walker R.F. // *Energetic Materials*. 1977 V 1, p.1347-1363.

Определение степени кристалличности и областей когерентного рассеяния образцов древесной массы, полученных методом механического дефибрирования

Люханова Инна Владимировна

Алешина Людмила Александровна

Петрозаводский государственный университет

Алешина Людмила Александровна, к.ф.-м.н.

Luhanova@yandex.ru

Целью данной работы являлось установление зависимости между параметрами, характеризующими кристаллическую составляющую древесной массы и ее физико-химическими свойствами.

В ходе работы исследовались образцы древесной массы (Кондопожский ЦБК) различной степени помола, полученные методом механического дефибрирования. Рентгенограммы образцов были получены на автоматическом дифрактометре ДРОН-6, излучение $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda=1,54178 \text{ \AA}$), в геометрии на отражение. Исследуемые образцы отличались между собой степенью помола, разрывной длиной, сопротивлением раздиранию и удельной энергией поглощения. Информация о механических характеристиках образцов (табл. 1, рис.1) предоставлена ОАО Кондопожский ЦБК.

Таблица 1. Механические характеристики образцов древесной массы.

Группа образцов	Степень помола (%)	Разрывная длина (м)	Сопротивление раздиранию (мН)	Удел. энергия поглощения (Дж/м^2)
I	76	3405 ± 25	291 ± 1	156 ± 1
II	75	3222 ± 54	309 ± 5	152 ± 3
III	74	3260 ± 40	322 ± 2	157 ± 7
IV	73	3170	317	155
V	72	3107 ± 10	315 ± 5	142 ± 5

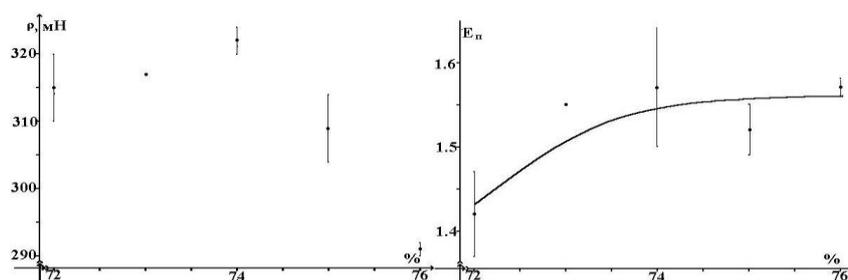


рис. 1. Зависимости сопротивления раздиранию ρ и удельной энергии поглощения от степени помола.

Из данных таблицы 1 следует, что с уменьшением степени помола разрывная длина образцов падает. Сопротивление раздиранию проходит через максимум при степени помола 74 % (рис. 1), а удельная энергия поглощения выходит на насыщение (рис. 1).

Современная концепция о строении целлюлоз предполагает, что целлюлоза является полимером, стоящим из двух фаз: кристаллической и аморфной. К параметрам, характеризующим кристаллическую составляющую целлюлозы, относят степень кристалличности и область когерентного рассеяния. Степень кристалличности характеризует долю регулярно упакованных молекул по отношению к неупорядоченным молекулам, а область когерентного рассеяния позволяет оценить размер областей, в которых молекулы расположены упорядоченно.

По рентгенограммам, полученным от образцов в высушенном состоянии, были определены степень кристалличности и размеры ОКР, рассчитанные из ширины отражения (200) (кристаллографическое направление [100]). Показано, что степень кристалличности и размеры ОКР для всех исследованных образцов древесной массы одинаковы в пределах погрешности и составляют $(63 \pm 5) \%$, $(40 \pm 7) \text{ \AA}$ соответственно. Поскольку период элементарной ячейки a – это величина, равная $\approx 8 \text{ \AA}$, то, следовательно, толщина упорядоченных участков элементарных фибрилл древесной массы составляет 5 элементарных ячеек.

Таким образом, в ходе данных исследований, было установлено, что характеристики кристаллической составляющей древесной массы оказались недостаточно чувствительны к условиям приготовления.

Работа поддержана грантом РФФИ “Север” № 08-02-98802.

Роль толщины в самоорганизации полосовой доменной структуры в наноразмерных антиферромагнетиках

Мавлютов Альмир Айдарович
Бакирский государственный университет
Сагаткиреева Минигуль Байгужевна
almir_m@mail.ru

В настоящее время в области современной техники интересны следующие направления развития, такие как увеличение быстродействия, минимизация потребляемой мощности, уменьшение габаритов и веса. Поиски путей решения этих задач привели к созданию новых материалов, среди которых важное место занимают магнитные пленки. Физика пленочного состояния вещества представляет интерес в первую очередь благодаря тому, что в пленках возможны новые специфические эффекты, не наблюдаемые в массивных образцах.

Целью данной работы является исследование роли толщины пленки в самоорганизации полосовой доменной структуры в наноразмерных ромбоэдрических антиферромагнетиках ($\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3$) с произвольной осью антиферромагнетизма относительно нормали к плоскости образца с переходом к эффективной оси антиферромагнетизма с результирующей константой анизотропии

$$c_1^A \left(1 + \frac{m_1^A}{2c_1^A} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4m_1^A}{m_1^A}} \right) \right), \text{ где}$$

$$c_1^A = \left(\frac{1}{2}a + q + \lambda_{[111]} \right) \cos^2 \alpha \cos^2 \psi - N_{\varphi z} \sin^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta \cdot \cos^2 \psi - 2\lambda_{[111]} \cos^2 \alpha,$$

$$m_1^A = N_{\varphi z} \sin^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta \cdot \cos 2\psi - \left(\frac{1}{2}a + q + \lambda_{[111]} \right) \cos^2 \alpha \cdot \cos 2\psi,$$

$$m_1'^A = \frac{1}{2} \left(N_{\varphi z} \sin^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta \cdot \sin 2\psi - \left(\frac{1}{2}a + q + \lambda_{[111]} \right) \cos^2 \alpha \cdot \sin 2\psi \right),$$

здесь a, q – константы анизотропии второго порядка, $\lambda_{[111]}$ – константа магнитострикции в направлении $[111]$, $N_{\varphi z}$ – размагничивающий фактор по направлению $[111]$, ψ – угол наклона оси антиферромагнетизма (от 0 до $\pi/2$) в кососрезанных квантовых ямах, при постоянной температуре T – параметры задачи.

Установлено, что изменение толщины (D) в области наноразмеров в наноантиферромагнетике типа ($\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3$) сопровождается изменением вида полосовой доменной структуры (ДС) от ДС вида Широбокова до отрицательной полосовой регулярной периодичности, сильной полосовой (360° ДС) и нерегулярной периодичности полосовой ДС, а также изменением типа доменных границ.

Расчеты производились на основе гамильтониана, учитывающего обменную энергию, энергию анизотропии, упругую, магнитоупругую и магнитостатическую энергий.

Численные расчеты произведены программным приложением, разработанным в среде Delphi7.

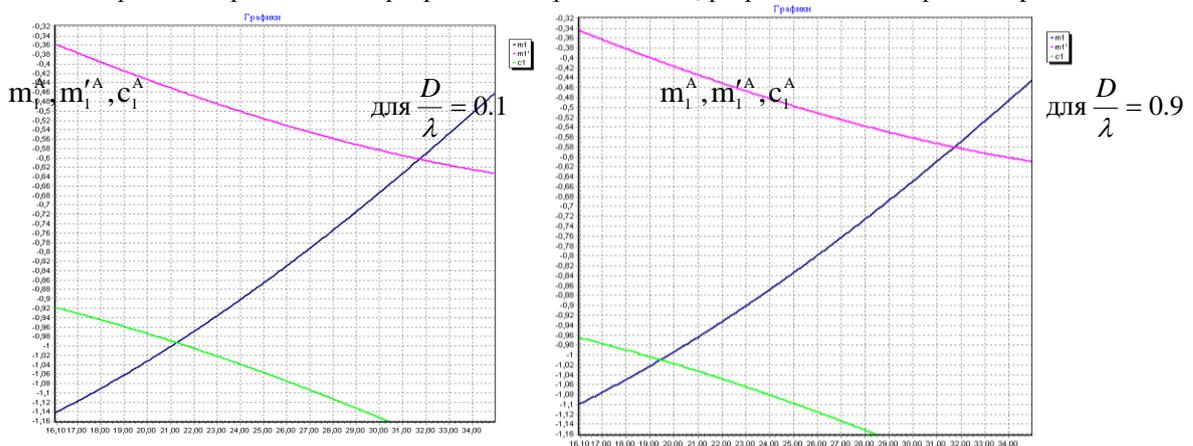


рис 1. График зависимости эффективных констант m_1, m_1^A, c_1^A от угла наклона оси антиферромагнетизма при изменении толщины, где λ – ширина домена.

Моделирование Н-центра в ЩГК на основе расчетов из первых принципов

Макаров Андрей Сергеевич

Ботов Михаил Алексеевич

Уральский государственный технический университет – УПИ

Кузнецов Алексей Юрьевич, к.ф.-м.н.

mas@dpt.ustu.ru

Н-центр является фундаментальным собственным дефектом и создается в паре с F-центром при облучении щелочно-галогидных кристаллов. Н-центр представляет собой междоузельный атом галогена, образовавший химическую связь с одним из ближайших анионов в форме квазимолекулы X_2^- с центром масс в анионном узле. В кристаллах LiF, NaCl дефект ориентирован вдоль направления [111], а в KCl – [110]. До настоящего времени фактически отсутствуют результаты теоретических исследований Н-центров в LiF, выполненных в рамках современных методов квантовой химии, а имеющиеся данные моделирования по ориентации Н-центров в KCl противоречат экспериментальным результатам.

В данном исследовании выполнен расчет парамагнитных и структурных параметров Н-центра. Расчеты проводились гибридным функционалом в рамках *ab initio* метода линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО), реализованного в комплексе программ CRYSTAL06 [1]. Для взаимной компенсации неучета электронной корреляции HF-методом и ошибок самовзаимодействия DFT-метода использовалась нестандартная гибридная схема B3LYP с 40% HF-обмена.

Для расчета дефекта в периодической модели использовалась суперячейка (SC) с 128 ионами. В результате полной релаксации была определена равновесная геометрическая конфигурация Н-центра. В кристаллах LiF, NaCl ориентация вдоль направления [111] была подтверждена. В отличие от предыдущих результатов для кристаллов KCl [6] гибридный метод B3LYP40 показал ориентацию Н-центра вдоль [110] как более выгодную (полная энергия SC на 0,08 eV меньше, чем энергия SC с ориентацией дефекта вдоль [111]), что полностью согласуется с экспериментом. Расстояние между атомами дефекта составило в LiF – 1,77 Å, в NaCl – 2,53 Å и в KCl – 2,61 Å; экспериментальные значения равны для LiF – 1,90 Å, для KCl – 2,51 Å. В целом картина релаксации выглядит следующим образом. В кристаллах LiF и NaCl катионы смещаются по направлениям от дефекта. Анионы, лежащие в плоскости (111), перпендикулярной оси Н-центра сдвигаются в его сторону, остальные анионы релаксируют в направлении от дефекта. В кристалле KCl, ввиду другой направленности дефекта, ближайшие катионы, лежащие по направлению [001] от узла Н-центра, смещаются в его сторону. Остальные катионы и анионы в целом смещаются от дефекта.

Парамагнитные свойства Н-центра обусловлены наличием неспаренного электрона, сверхтонкое взаимодействие спина которого со спинами соседних ядер может быть изучено экспериментально методом двойного электронно-ядерного резонанса. Рассчитанные значения постоянной сверхтонкого взаимодействия для атомов ближайшего окружения дефекта в кристалле LiF представлены в Таблице в МГц. Атомы обозначены в соответствии с Рисунком 1.

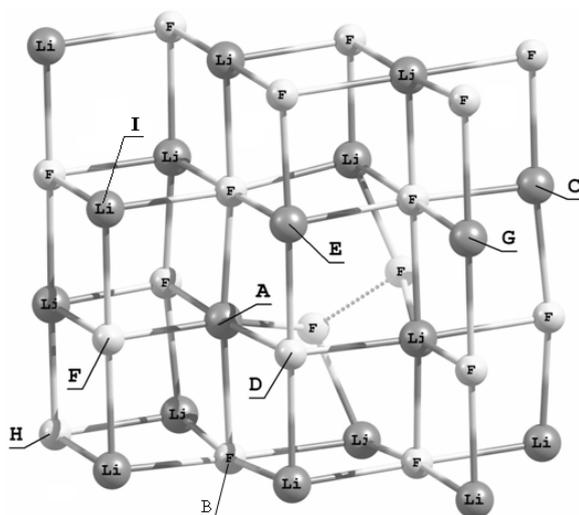


рис. 1. Н-центр с атомами окружения.

атом	Метод	A	B_x	B_y	B_z
A(Li)	B3LYP40	-2,61	-3,06	5,15	-2,09
	Exp.[5]	-1,89	-2,98	4,96	-1,99
B(F)	B3LYP40	26,83	-17,12	33,69	-16,57
	Exp. [5]	27,7	-18,20	35,00	-16,90
C(Li)	B3LYP40	-0,63	-1,13	-1,13	2,26
	Exp. [5]	-0,43	-1,11	-1,11	2,23
D(F)	B3LYP40	-3,94	3,10	-2,01	-1,10
	Exp. [5]	-2,44	3,56	-2,21	-1,36
E(Li)	B3LYP40	-0,01	-0,71	1,22	-0,51
	Exp. [5]	-0,01	-0,70	1,21	-0,50
F(F)	B3LYP40	-0,23	-1,04	2,00	-0,97
	Exp. [5]	-0,13	-1,12	2,13	-1,01
G(Li)	B3LYP40	0,00	0,77	-0,39	-0,38
	Exp. [5]	0,00	0,76	-0,38	-0,37
H(F)	B3LYP40	-0,13	-0,88	-0,51	1,38
	Exp. [5]	-0,09	-0,77	-0,74	1,50
I(Li)	B3LYP40	0,00	-0,33	0,60	-0,28
	Exp. [5]	-0,01	-0,31	0,58	-0,27

Наличие Н-центра в идеальном кристалле приводит к появлению полосы оптического поглощения, соответствующей π -переходу ($\pi_g - \sigma_u$), которая и была рассчитана в работе. Для этого были смоделированы начальное и конечное состояние системы и найдена разница в их энергиях. Значения энергий переходов составили: в LiF – 2,92 eV, в NaCl – 2,18 eV и в KCl – 2,05 eV; экспериментальные значения равны для NaCl – 2,38 eV, для KCl – 2,38 eV [4].

Таким образом, в данной работе представлены результаты комплексных теоретических исследований Н-центра, в том числе впервые выполненных для кристалла LiF в рамках современных методов квантовой химии. Примененная нестандартная гибридная схема B3LYP40 в целом адекватно описывает структурную релаксацию, парамагнитные и оптические свойства Н-центра в кристаллах. К тому же с помощью этого метода была получена верная ориентация Н-центра в KCl. Все это показывает перспективы использования данной схемы в будущем для моделирования как идеальных, так и дефектных систем.

Список публикаций:

- [1] Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Pascale F., Civalleri B., Doll K., Harrison N.M., Bush I.J., D'Arco Ph., Llunell M. *CRYSTAL06 User's Manual*, University of Torino. (2006).
 [2] Стоунхэм А.М. *Теория дефектов в твердых телах*. В 2-х т. Пер. с англ. М.: Мир., 1978. Т. 1. 570 с.; Т. 2. 358 с.
 [3] Эварестов Р.А., Котомкин Е.А., Ермошкин А.Н. *Молекулярные модели точечных дефектов в широкоцелевых твердых телах*. Рига: Зинатне, 1983. – 287с.
 [4] A. L. Shluger, V. E. Puchin, T. Suzuki, K. Tanimura, and N. Itoh // *Phys.Rev B*, 1995, v. 52, p. 4017
 [5] Y. Hou Chu and Robert Lee Miehler // *Phys.Rev. B*, 1971, v. 3 p. 488
 [6] A. Svane, E.A. Kotomin, N. E. Christensen // *Phys.Rev B*, 1996, v. 53, p. 24

Электродинамические исследования тонких многослойных структур

Макаров Павел Андреевич

Сыктывкарский государственный университет

Котов Леонид Нафанаилович, д.ф.-м.н.

istok86@mail.ru

В настоящее время широко исследуются электродинамические свойства тонких многослойных пленок, в частности отражение, прохождение и поглощение электромагнитных волн. Это связано с тем, что различные металлические, диэлектрические и полупроводниковые слои находят применение во многих областях науки и техники. Различные наноструктуры используются, например, в интегральной электронике, оптическом приборостроении, в электротехнике СВЧ, а так же в устройствах сверхбыстрой обработки и хранения информации.

В связи с огромным интересом, который представляют собой тонкопленочные системы, возникает необходимость описания их свойств. В данной работе на основе граничных условий импедансного типа [1] методом усреднения [2] были получены коэффициенты отражения и прохождения электромагнитной волны для геометрии задачи, показанной на рис. 1.

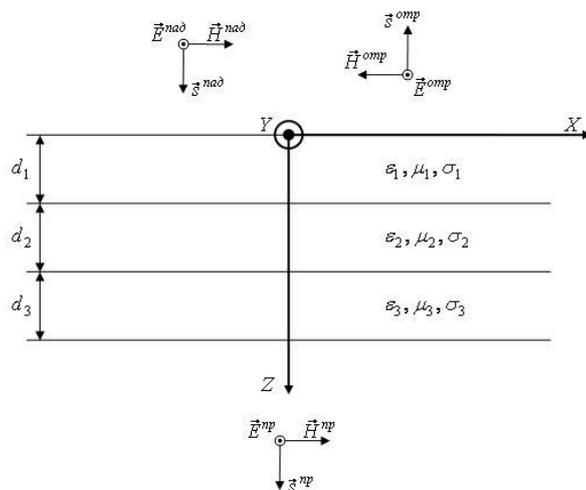


рис.1. Геометрия задачи

$$R = \frac{\left| (a_1 - a_2)Z_0 - b_2 Z_0^2 + b_1 \right|^2}{\left| (a_1 + a_2)Z_0 + b_2 Z_0^2 + b_1 \right|^2}, \quad (1)$$

$$T = \frac{\left| 2pZ_0 e^{i(\sum_{m=1}^3 k_m d_m)} \right|^2}{\left| (a_1 + a_2)Z_0 + b_2 Z_0^2 + b_1 \right|^2}. \quad (2)$$

При этом в выражениях (1) и (2) a_l, b_l, p - коэффициенты, определяемые параметрами слоев структуры и частотой волны, Z_0 - импеданс свободного пространства, а k_l - волновое число волны в слое l .

Таким образом, в данной работе были получены следующие результаты:

1. Методом усреднения на основе граничных условий импедансного типа получены энергетические коэффициенты отражения и прохождения для произвольной тонкой трехслойной структуры.

2. Теоретически исследовано отражение, прохождение и поглощение трехслойных металлодиэлектрических систем при различных параметрах.

Список публикаций:

[1] Каплан А. Е. // РЭ. 1964. Т. 10. С. 1781.

[2] Хасс Г. // Физика тонких пленок. Москва: Мир. 1967. № 1.

Высокоразрешающие рентгеновские исследования пористых материалов

Мамонтов Александр Иванович

Сыктывкарский государственный университет

Петраков Анатолий Павлович, д.ф.-м.н.

snowchek@mail.ru

В настоящее время интенсивно развивается физика и технические применения фрактальных структур. После открытия Канхэмом фотолюминесценции пористого кремния в видимой области постоянно растет число физических и химических методов превращения Si в эффективный излучатель света. В то же время перспективным представляется получение наноразмерных кристаллитов Si путем заполнения пустот в циолитах и опаловых решетках. Непрекращающийся интерес к исследованию свойств пористого кремния и его приборному применению приводит к неизбежному исследованию пористых слоев и других полупроводниковых материалов (например, интересен из-за своих свойств карбид кремния).

Часто используемые методы газовой и жидкостной порометрии имеют существенные недостатки, такие как загрязнение образцов при измерении, необходимость больших затрат времени, получении информации лишь об открытых порах. Использование рентгеновских методов исследования позволяет избежать этих недостатков и получить больше информации.

Оценка пористости может проводиться методом рентгеновской абсорбционной порометрии. Метод реализован на стандартном источнике монохроматического излучения ДРОН-2.0. Коллимация пучка рентгеновских лучей щелями (0.05x0.5 mm) позволяет проводить локальные измерения пористости по образцу. Пористость вычисляется из измеряемой экспериментально плотности ρ^T при известных значениях плотности аморфного без пор образца ρ^3 по следующей формуле:

$$P, \% = \frac{\rho^T - \rho^3}{\rho^T} \cdot 100 \quad (1)$$

Значения ρ^3 определяются по поглощению рентгеновских лучей при прохождении через слой t вещества:

$$\rho^3 = \frac{\ln(I_0 / I)}{(\mu / \rho)^T (t / \cos \varphi)} \quad (2)$$

где I_0 и I – падающая и прошедшая интенсивности (в имп/с), $(\mu/\rho)^T$ ($\text{см}^2/\text{г}$) – массовый коэффициент поглощения рентгеновских лучей веществом с плотностью ρ^T ($\text{г}/\text{см}^3$), φ – угол между нормалью к поверхности образца и падающим пучком рентгеновских лучей.

Рентгеновские измерения на трехкристальном дифрактометре позволяют достаточно точно оценить макронапряжения в образцах. Для этого используется измеренный радиус изгиба образцов R и формула Стоуни. Методика измерения радиуса изгиба основана на регистрации углового смещения пика отражения от образца при его линейном сканировании в пучке рентгеновских лучей. По формуле Стоуни можно рассчитать биаксиальные тангенциальные напряжения в образце σ_a , а по ним рассчитать деформацию вдоль нормали к поверхности образца ε_z .

Структурное совершенство слоев может контролироваться по поведению угловой ширины дифракционной кривой на половине максимума (FWHM) для симметричного брэгговского отражения.

Этим методом измерена деформация в пленках PbTe, выращенных на поверхности кремния. Деформация составляла порядка $\Delta d/d=10^{-4}$. Определен тип дефектов в пленках. Дефектами являются дислокации.

Работа выполнена в рамках программы “Развитие научного потенциала высшей школы 2009-2010 гг”.

Структурно-фазовые состояния в сплавах с эффектами памяти формы в области квазибинарного разреза TiNi–TiCu

Марченко Екатерина Сергеевна

Калачева Екатерина Викторовна, Грищенко Юлия Евгеньевна

Томский государственный университет

Гюнтер Виктор Эдуардович, д.ф.-м.н., Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н.

Marchenko_Katya@mail.ru

Сплавы на основе никелида титана с эффектом памяти формы являются перспективным материалам в технике и медицине. В этих сплавах проявляются уникальные физико-механические свойства. Это находит отражение в широком практическом применении эффектов сверхэластичности и памяти формы. Эти свойства обусловлены протекающими в них структурными фазовыми переходами (ФП). В ряду сплавов на основе никелида титана, легированных третьим компонентом особое место занимают сплавы, легированные медью TiNi–TiCu. Это обусловлено несколькими факторами. Во-первых, в сплавах TiNi–TiCu слабо меняется область ФП с изменением концентрации легирующего элемента, но зато в этих сплавах наблюдается эволюция последовательностей превращений с изменением состава без участия R-фазы: B2–B19, B2–B19', B2–B19–B19' и B2–B19'–B19'' [0]. Во-вторых, с ростом концентрации легирующего элемента, начиная с 4 ат.% микрокинетика медленного роста мартенситных кристаллов при термоупругих мартенситных превращениях (МП) сменяется на микрокинетiku микровзрывного появления или исчезновения мартенситных кристаллов [0,3]. В-третьих, сплавы с 9–12 ат.% Cu характеризуются двумя МП при большой величине неупругой деформации и низких напряжениях мартенситного сдвига [4].

Целью представленной здесь работы является исследование структурно-фазовых состояний сплавов квазибинарного разреза TiN–TiCu, дополнительно легированных молибденом (0,3 ат. % Mo).

Для исследования были получены сплавы следующего состава: $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{49,7-x}\text{Mo}_{0,3}\text{Cu}_x$ ($0 \leq x \leq 25$). Концентрация Mo постоянная и равнялась 0,3 ат%.

Рентгеноструктурные исследования образцов проводили на дифрактометре “XRD-6000” Shumadzu при комнатной температуре. Для определения температур МП были получены стандартным методом температурные зависимости удельного электросопротивления [0].

На основе рентгенофазового анализа установлено, что сплавы $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{49,7-x}\text{Mo}_{0,3}\text{Cu}_x$ при комнатной температуре находятся в двухфазном состоянии. На дифрактограммах исследуемых сплавов обнаружены пики от аустенитной фазы B2 и от вторичной фазы $\text{Ti}_2(\text{Ni,Cu})$. Причем объемная доля фазы $\text{Ti}_2(\text{Ni,Cu})$ практически не превышает 5% во всех исследуемых сплавах.

Получены концентрационные зависимости параметра решетки фазы B2 в сплавах $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{49,7-x}\text{Mo}_{0,3}\text{Cu}_x$ (рис.1, б). На рисунке 1, б видно три разных характерных зависимости параметра решетки от концентрации.

Это позволяет разбить сплавы на три группы. В первую группу входят сплавы с концентрацией меди от 0 до 5 ат.%. Вторая группа содержит сплавы от 5 до 14 ат.% Cu и третья группа это сплавы с высоким содержанием меди от 14 до 25 ат.%.

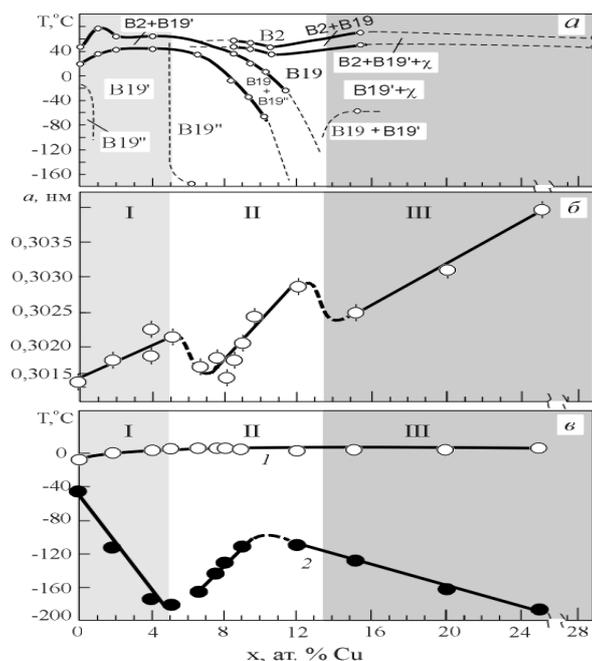


рис.1. Диаграмма мартенситных превращений в сплавах квазибинарного разреза TiNi–TiCu [0](а), концентрационные зависимости параметра решетки фазы В2 в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Cu_x$ (б) и температуры начала (1) и конца (2) мартенситных превращений (в)

Такое закономерное изменение параметров решетки от концентрации коррелирует с диаграммой мартенситных превращений в тройных сплавах TiNi–TiCu (рис.1, а). На диаграмме МП также можно выделить три области, в которых существует разная последовательность мартенситных превращений в зависимости от концентрации. Температуры начала МП в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Cu_x$, полученные по температурным зависимостям кривых электросопротивления, практически не зависят от концентрации легирующего элемента. Тогда как, температура конца МП в этих же сплавах имеет не монотонный характер от концентрации (рис.1, в). Разный характер изменения окончания температуры МП от концентрации связан с особенностями изменения параметра решетки в В2 фазе от концентрации легирующего элемента (рис.1, б). Такое не монотонное изменение параметра решетки от концентрации может свидетельствовать о включении разных механизмов в изменение сил межатомного взаимодействия и как следствие изменение энергии смешения в четырехкомпонентном сплаве.

Среди исследуемых многокомпонентных сплавов были обнаружены сплавы с очень узким температурным гистерезисом (не более 20 К). Подобные необычные МП были получены в работе [5] при исследовании четырехкомпонентных сплавов $Ti_{50}Ni_{44-x}Co_6Cu_x$ и $Ti_{50}Ni_{47,5-x}Fe_{2,5}Cu_x$.

Таким образом, анализируя известные экспериментальные данные о диаграммах мартенситных превращений трех- и четырехкомпонентных сплавов на основе никелида титана можно констатировать, что существует общая закономерность. Температурная область существования МП в сплавах $Ti_{50}Ni_{50-x}Cu_x$, $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Cu_x$, $Ti_{50}Ni_{44-x}Co_6Cu_x$ и $Ti_{50}Ni_{47,5-x}Fe_{2,5}Cu_x$ в основном изменяется за счет снижения температуры окончания мартенситных превращений. В то время как на температуру начала МП замена атомов Ni на атомы Cu не оказывает такого влияния.

В заключении необходимо отметить, что сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Cu_x$ существует концентрационная область, внутри которой сплавы имеют очень узкий гистерезис мартенситного превращения.

Список публикаций:

- [1] Гюнтер В.Э., Домбаев Г.Ц., Сысолятин П.Г. и др. *Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы*. Томск: ТГУ. 1998. С. 86.
- [2] Ерофеев В.Я., Паскаль Ю.И., Павская В.А. *Кинетика мартенситных превращений и морфология образующихся фаз в сплавах $Ti_{0,5}Ni_{0,5-x}Cu_x$* . Рукопись Деп. ВИНТИ. №3583-85. С. 30.
- [3] Ерофеев В.Я., Паскаль Ю.И. / *Кинетические и морфологические закономерности мартенситных превращений в сплавах TiNi(Cu)* // ДАН СССР. 1986. Т.290. №1. С. 110-114.
- [4] Беляев С.П., Волков А.Е., Ермолаев В.А и др. *Материалы с эффектом памяти формы*. Санкт-Петербург: НИИХ СПбГУ. 1998. Т.1, Т.2, Т.3. С. 474.
- [5] Пушин В.Г., Куранова Н.Н., Юрченко Л.И. *Синтез нанокристаллических многокомпонентных сплавов с ЭПФ на основе никелида титана* // Проблемы нанокристаллических материалов. Екатеринбург: Уро РАН. 2002. С. 557-564.

Оценка топографии плёнок алюминия и графита с подслоем из алюминия на оптическом и атомно-силовом микроскопах

Медведева Валерия Сергеевна

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Шляхова Галина Витальевна, к.т.н, ИФПМ СО РАН

Бродский Владимир Маркович, к.т.н, СГТА

perchik6@mail.ru

В настоящее время практически ни одно исследование в области физики поверхности и тонкопленочных технологий не обходится без применения методов СЗМ. Развитие сканирующей зондовой микроскопии послужило также основой для развития новых методов в нанотехнологии – технологии создания структур с нанометровыми масштабами. За последние 10 лет сканирующая зондовая микроскопия превратилась из экзотической методики, доступной лишь ограниченному числу исследовательских групп, в широко распространенный и успешно применяемый инструмент для исследования свойств поверхности. Проблема нанесения тонкопленочных покрытий, в которой переплетаются научные аспекты, относящиеся к физике, химии, механике является едва ли не самой обширной среди современных актуальных направлений технологии и материаловедения. Высокие темпы развития этих наукоемких отраслей промышленности требуют непрерывного повышения качества, и эксплуатационных свойств покрытий. Реализация этих требований напрямую зависит от достижений в конструировании оборудования и совершенствования технологий получения тонких пленок. В настоящее время наиболее перспективными методами нанесения покрытий являются вакуумные ионно-плазменные методы.

Работа выполнялась поэтапно:

Вначале исследовались плёнки алюминия и графита с подслоем из алюминия, напылённых на стеклянную подложку с помощью микроскопа отражённого света Neophot-21. Выявлено, что плёнка графита с подслоем из алюминия имеют в основном сферические включения тёмного цвета. Размеры включений от 2 мкм до 5 мкм, их количество составляет 2%. Плёнка графита имеет также в основном включения сферической формы и редко овальной, цвет включений светлый. Размеры включений от 2 мкм до 10 мкм, их количество составляет 5%. Однако, представленная картина не позволила чётко определить характер найденной составляющей. Было предположено, что выявленная составляющая может относиться к числу дефектов плёнки (несплошностям) или включениям, лежащих на поверхности плёнки.

Для этого поверхности плёнок были просканированы на атомно-силовом микроскопе Solver PRO-47H контактными и полуконтактными методами. Размер включения на поверхности плёнки графита с подслоем из алюминия составляет 0,88 мкм. Практически все частицы в плёнке располагаются в параллельных плоскостях, расположенных под углом примерно 50 градусов относительно оси Ох. Высота включений составляет 60 мкм.

На последнем этапе проводилось измерение толщины плёнок. Для получения требуемых результатов исследования проводились постепенно по всей плёнке, начиная от чистого стекла, для того чтобы найти границу и измерить толщину плёнки. Толщина плёнки графита с подслоем из алюминия составляет 0,4 мкм, плёнки графита – 100 нм.

Примером важности применения тонкопленочных покрытий являются полупроводниковая и оптическая промышленности. Поэтому данная работа позволяет расширить область применения данных плёнок в рентгеновских волноводах и снятие реплик с помощью электронных микроскопов.

Рост кристаллов сульфида цинка в расплаве хлоридов металлов

Минаков Александр Владимирович

Челябинский государственный университет

Мамаев Николай Александрович, к.ф.-м.н.

minakov140586@mail.ru

Сульфид цинка находит все более широкое применение в различных отраслях народного хозяйства.

В качестве люминофоров сульфид цинка используется в люминесцентных лампах, экранах телевизоров, осциллографов, электронно-люминесцентных панелях.

В технологическом и экономическом плане представляет определенный интерес использования в качестве белого пигмента 100-процентного сульфида цинка. Не уступая по белизне оксиду цинка, сульфид

цинка в несколько раз превосходит его по укрупненности, приближаясь по этому показателю к диоксиду титана. В отличие от последнего сульфид цинка относится к мягким, неабразивным материалам и его измельчение и диспергирование не требует больших энергетических затрат и времени.

В данной работе был рассмотрен рост кристаллов сульфида цинка, а также было исследовано влияние объемной доли при различном времени термообработки на процесс коалесценции [1] кристаллов сульфида цинка.

Задачей работы явилось экспериментальное исследование процесса коалесценции при различных объемных долях, определить средние размеры частиц, построить гистограммы распределения частиц по размерам, определить показатели степени диффузионного уравнения и сравнить полученные экспериментальные данные с теорией Лифшица – Слэзова – Вагнера [2, 3].

В работе использовали сульфид цинка, полученный путем взаимодействия водных растворов хлорида цинка и сульфида бария, взятых в соотношении 1/0,4 соответственно, при постоянных рН (3,5) и температуре (35 °С). Перед проведением термообработки образцы загружались в платиновые тигли и высушивались при температуре 120 °С. Термообработку образцов проводили в специально изготовленной печи при температурах $T = 450\text{ °C}$ $T = 500\text{ °C}$ для объемных долей 0,155 и 0,5. Каждый образец извлекали из печи через определенное количество времени: 10, 30, 60, 120, 180 и 240 минут для каждой объемной доли. После проведения термообработки образцы предварительно отмывали от хлоридов металлов. Полученные образцы помещались в электронный микроскоп ЭВМ 100 ЛМ для проведения электронно-микроскопических исследований. С полученных микрофотографий отсчитывали не менее 500 частиц. С помощью этих данных определяли средние размеры частиц, строили гистограммы и рассчитывали показатели степени диффузионного уравнения.

Анализ построенных гистограмм показал, что при малых временах прокаливания гистограммы лежат ниже теоретической функции распределения. А также было показано, что гистограммы распределения по размерам для объемной доли 0,5 лежат правее универсальной функции распределения. Кинетика увеличения среднего размера представлена в таблице.

	T = 450 °C		T = 500 °C	
	После 10 минут	После 180 минут	После 10 минут	После 180 минут
При объемной доле 0,155	10,2 нм	34,2 нм	7,2 нм	65,1 нм
При объемной доле 0,5	36,2 нм	112 нм	32,6 нм	112 нм

Это связано с тем, что с увеличением времени термообработки увеличивается и средний размер частиц.

Расчёт экспериментальных данных показал значения показателей степени $n \sim 3$ для объемной доли 0,155 и $n \sim 4$ для объемной доли 0,5. Таким образом, получили прямо пропорциональную зависимость показателя степени n от объемной доли. Для объемной доли 0,5 показатель степени не совпадает с теоретическим показателем. Таким образом, использование большой объемной доли не дает результатов, предсказанных теорией Лифшица–Слэзова–Вагнера.

Список публикаций:

- [1] Слэзов В. В., Сагалович В. В. // Успехи физических наук, 1987, **151**, 67-110.
 [2] Лифшиц И. М., Слэзов В. В. // Физика твёрдого тела. 1959, **1**, **6**, **9**.
 [3] Лодиз Р. А., Паркер Р. Л. Рост монокристаллов. Мир. 1974.

Исследование особенностей образования и роста частиц серебра на поверхности микрокристаллов AgBr

Морозова Татьяна Владимировна

Романчук Ирина Анатольевна

Кемеровский государственный университет

Колесников Лев Васильевич, профессор, д.ф.-м.н.

morozova-tania@mail.ru

Поверхность твердых тел, как монокристалльных, так и аморфных, имеет важнейшее значение при фундаментальных исследованиях в области физики, химии, биологии и в различных разделах техники. Особый интерес представляет проблема активной поверхности. Природа активных элементов поверхности, взаимодействие этих элементов с основной атомной структурой твердых тел, роль основной бездефектной поверхности, связь свойств локальных активных элементов с макроскопическими свойствами твердых тел,

значение матричных принципов в поверхностных явлениях - являются в настоящее время центральными вопросами проблемы активной поверхности твердых тел. Несмотря на многочисленные исследования, до сих пор остается до конца не решенным вопрос о том, происходит ли зародышеобразование исключительно на дефектах, всегда присутствующих на реальной поверхности твердых тел или же возможно и флуктуационное зародышеобразование на идеальной поверхности.

В представленной работе изложены результаты исследований состояния поверхности микрокристаллов (МК) AgBr октаэдрического габитуса (111) и закономерностей формирования кластеров серебра на поверхности в зависимости от условий синтеза, размеров МК, а также в процессе выдерживания МК в условиях обработки (*) и хранения. Установленные закономерности будут сопоставляться с физическими свойствами МК.

Синтез МК проводился методом контролируемой двухструйной кристаллизации. Приготовление образцов МК AgBr (111) для исследований включало следующие этапы: синтез МК и обработка (выдерживание) МК в растворах с заданным значением рВг (рВг=3;1,6;3,8) при T=60°C в течение 3 часов (в дальнейшем будем использовать термин обработка (выдерживание) в условиях (*)). Обработка проводится с целью определения на поверхности эффективных центров концентрирования серебра. Результаты для образцов прошедших обработку в условиях (*) будут сравниваться с необработанными (исходными) образцами. Хранение дисперсий МК AgBr проводили при T=6°C и рВг=1,6÷3,8.

Для электронно-микроскопического анализа МК AgBr (111) освобождали от желатины путём ферментативного расщепления в водном растворе протеазы при рН=10. Для окончательного освобождения от желатины проводили центрифугирование. Далее проводилось напыление углерода на лабораторной установке ВУП-4. Просмотр углеродных реплик осуществлялся на просвечивающем электронном микроскопе ЭМ-125.

Известно, что скорость восстановления кластеров на поверхности МК AgBr зависит от исходных размеров центров и максимальна для Ag_n-центров с n≈10. При n<10 скорость восстановления уменьшается, а при n≥10 практически постоянна. Таким образом, на поверхности МК AgBr, в зависимости от условий синтеза, последующих обработок МК и восстановления образовавшихся центров концентрирования, можно выделить предельное число центров концентрирования серебра, количество и локализацию наиболее активных центров концентрирования. В условиях низкой освещенности все выявляемые методом электронной микроскопии Ag_n-центры имеют повышенную активность к процессу концентрирования серебра. В случае значительного различия по размерам наблюдаемых Ag_n-частиц можно утверждать, что мелкие и крупные Ag_n-частицы формируются при восстановлении центров с разной исходной активностью. При высокой освещенности избыточная концентрация электронов будет захватываться на всех потенциально возможных центрах (независимо от их энергии) концентрирования с последующим присоединением ионов серебра. В этом случае можно ожидать, что количество наблюдаемых центров будет соответствовать предельно возможному для МК AgBr.

Если МК AgBr были предварительно обработаны в растворах для создания на поверхности глубоких ловушек захвата электронов; эффективных центров концентрирования Ag_n, то для выявления этих центров на фоне остальных, необходимо использовать режим дискретного восстановления. Для выявления предельного числа центров роста частиц на поверхности МК как исходных, так и после обработки в условиях (*), перед нанесением реплики на поверхность МК, их засвечивали одиночным импульсом света высокой интенсивности с длительностью 10⁻³ сек, после этого МК обрабатывали в восстанавливающем растворе.

Полученные результаты по исследованию влияния условий синтеза, обработки и препарирования на состояние поверхности МК AgBr (111) показали, что на поверхности МК, находившихся в дисперсионной среде при рВг=1,6, частицы серебра методом просвечивающей электронной микроскопии, не выявляются. В процессе выдерживания МК при рВг=3, происходит модификация поверхности и формы МК, при этом на гранях (111) в условиях препарирования (малый уровень засветки) может формироваться до нескольких десятков частиц Ag_n.

В условиях слабого воздействия света (в процессе препарирования), на гранях исходных МК AgBr(111) может формироваться, в зависимости от условий восстановления и размеров МК, от 1 до нескольких десятков центров концентрирования серебра. Обработка МК AgBr (111) в течение 2 часов приводит к уменьшению числа Ag_n-центров. Это позволяет утверждать, что в условиях слабого воздействия света при препарировании центры концентрирования серебра формируются практически в одинаковом количестве, около- 10¹⁰ шт/см², что позволяет отнести их к центрам с повышенной активностью к концентрированию серебра. Число способных к восстановлению частиц меняется в пределах одного порядка в зависимости от степени модификации поверхности МК, и уменьшается при изменении формы МК от октаэдрической до сферической. При восстановлении МК AgBr (111) формирование частиц серебра происходит преимущественно на некотором расстоянии от границ граней.

В условиях высокой освещенности на поверхности МК AgBr (111), как исходных, так и после обработки в условиях (*) может формироваться более 10^{10} см⁻² серебряных центров, способных к восстановлению. Уменьшение числа Ag_n частиц при длительных временах обработки МК AgBr (111) следует связать с изменением формы МК от октаэдрической к сферической. Формирование центров концентрирования на поверхности засвеченных МК происходит преимущественно на гранях (111) на расстоянии около 500 Å от их границ.

После хранения МК AgBr (111), при pBr=1,6÷3,8 до и после обработки в условиях (*) число центров концентрирования на поверхности МК AgBr (111) немонотонно меняется, однако остается в пределах значения 10^{10} шт/см². Предельное число центров, способных к концентрированию серебра, выявляемых на поверхности МК (111) достигает величины 7×10^{10} см⁻². В зависимости от величины экспозиции, число Ag_n-частиц на поверхности МК AgBr (111) может меняться в пределах порядка величины 10^{10} шт/см².

Таким образом, созданные в результате засветки Ag_n-центры декорируют поверхность и границы граней (111). Количество серебряных центров, способных к восстановлению, близко к значению плотности поверхностных состояний в МК AgBr, связанных с Br_s⁻ на дефектах поверхности.

Оценка изменения удельного объёма титана при фазовом превращении

Мухаметишина Ильмира Юлаевна

Ижевский государственный технический университет

Белых Вячеслав Вячеславович, к.т.н.

fizika@istu.ru

Для многих металлов при высоких температурах наблюдаются полиморфные превращения с образованием ОЦК - структуры. Причины её устойчивости при высоких температурах остаются неясными. С точки зрения кристаллографии до сих пор неясно как происходит передвижение атомов вещества без нарушения макроскопической сплошности всего тела, т.е. без разрушения. В работе [1] отмечается, что свойство «самоподобного» деления элементарной ячейки в золотом отношении (соотношение периодов кристаллических решёток модификаций), позволяет новой фазе заполнить весь объём кристаллита без разрушения.

Полиморфные превращения металлов являются следствием постепенного приближения эллипсоидальной формы внешних электронных облаков ионов металлической решётки к сферической при изменении температуры или давления. Повышение температуры сопровождается не только увеличением энергии тепловых колебаний атомов, но и увеличением энергии электронов внешней оболочки ионов. В металлической решётке, где внешние электроны положительных ионов сильно возбуждены вследствие возмущающего действия соседних атомов, сравнительно небольшой прирост температуры может быть достаточным для наступления перекрытия и обменного взаимодействия внешних р⁶ оболочек ионов, не перекрывающихся при низких температурах. Это приводит к переходу плотных низкотемпературных модификаций в высокотемпературные ОЦК структуры у скандия, титана, циркония, гафния [2].

Полиморфное превращение у титана, циркония, гафния сопровождается скачкообразным уменьшением удельного электросопротивления [3], при этом до и выше температуры превращения справедливо соотношение Бриджмена: $\frac{\Delta\rho}{\rho} = C \frac{\Delta V}{V}$

где C – постоянная, зависящая от структурного состояния металла,

$\frac{\Delta\rho}{\rho}$ и $\frac{\Delta V}{V}$ - изменения удельного электросопротивления и объёма.

На основании фрактальных представлений удельное электросопротивление и плотность можно выразить в виде [4]: $\rho = \rho_0 R^{D_f - 1}$, $\gamma = \gamma_0 R^{D_f - 3}$, что позволяет определить величину C. Где : ρ_0, γ_0 - постоянные металла, R, D_f - размер и фрактальная размерность кластера атомов. Оценка уменьшения объёма составила 0,8% и связана с изменением фрактальной размерности D_f от 1,22 до значения 2,44.

Экспериментальные данные уменьшения удельного объёма при фазовом превращении титана составляют (0,09 – 0,24)% при T=1156 K [5].

Для качественной оценки изменения энергии взаимодействия воспользуемся потенциалом Леннарда-Джонса для ГПУ и ОЦК:

$$E = 2N\varepsilon \left[12,13 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - 14,46 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad E = 2N\varepsilon \left[9,16 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - 11,97 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right],$$

где: N- число атомов, σ, ε - параметры.

Сравнение энергий при одинаковых объемах показывает, что с уменьшением плотности ОЦК структура становится энергетически более выгодной.

Список публикаций:

- [1]. В.С. Крапошин *Алгебра и геометрия мартенситных превращений в сплавах железа* // *МиТОМ. №7, 1994, С.2-5.*
- [2]. Григорович В.К. *Периодический закон Менделеева и электронное строение металлов.* М.: Наука. 1966. 288с.
- [3]. Зиновьев В.Е. *Кинетические свойства металлов при высоких температурах.* Справ. Изд. М.: Металлургия. 1984. 200с.
- [4]. Бельх В.В., Ри Хосен, Марьин Б.Н. *Физико-механические свойства железоуглеродистых сплавов. Методы контроля и прогнозирования качества отливов.* Владивосток: Дальнаука. 2003. 312 с.
- [5]. *Теплофизические свойства титана и его сплавов: Справ. изд./ Пелецкий В.Э., Чеховской В.Я., Бельская Э.А. и др. Металлургия, 1985, 103 с.*
- [6]. Киттель И. *Введение в физику твердого тела.* М.: Наука, 1978.

Неустойчивость частицы в лазерной ловушке

Мядзюта Григорий Алексеевич

Дальневосточный государственный университет путей сообщения

Иванов Валерий Иванович д.ф.-м.н.

tmeh@festu.khv.ru

Одним из эффектов, влияющих на энергетические и динамические характеристики термокапиллярной оптической ловушки, является «продольная» неустойчивость микрочастицы в неоднородном тепловом поле. В экспериментах с единственным пузырьком были обнаружены его незатухающие колебания по одной координате при освещении кюветы пучком лазера, имеющим вытянутую вдоль той же координаты форму поперечного распределения интенсивности.

Возникающие колебания связаны с термокапиллярным механизмом неустойчивости положения равновесия частицы в неоднородном тепловом поле. Причину неустойчивости можно описать следующим образом. Частица в максимуме температурного поля находится в состоянии равновесия, поскольку результирующая термокапиллярная сила равна нулю. Небольшое случайное смещение частицы вдоль оси x приводит из-за перетекания жидкости (внутри и вне ее) к появлению градиента поверхностного натяжения, поскольку жидкость теперь имеет разную температуру впереди и сзади частицы (теплопередача инерционна). Смещение частицы из положения равновесия вызывает увеличение градиента поверхностного натяжения, увеличивая снова термокапиллярную силу. Сила вдоль градиента температур появляется из-за того, что лапласовское давление внутри пузырька зависит от коэффициента поверхностного натяжения σ , который

является функцией температуры: $P_L = \frac{2\sigma}{R}$. Поэтому в случае отличного от нуля градиента $\left| \frac{d\sigma}{dx} \right|$

появляется результирующая сила, направленная вдоль градиента температуры. Расчет дает для сферического

пузырька: $F_{\nabla} = \pi R^2 \frac{d\sigma}{dT} \frac{dT}{dx}$, где T - температура, x - поперечная координата.

Описанный механизм положительной обратной связи носит пороговый характер из-за наличия диссипативных потерь и реализуется при достаточно больших градиентах температур и размерах частиц. Если тепловое поле ограничено по оси x, то частица может колебаться вдоль x в пределах существования поля. В эксперименте действие архимедовой силы ограничивалось использованием почти горизонтальной кюветы. Колебания пузырька происходили в плоскости кюветы.

Колебания наблюдаются визуально, частота колебаний 1-5 Гц, амплитуда колебаний составляет 0,1-0,5 радиуса пузырька. Колебания регистрировались по зависимости мощности излучения, прошедшего через кювету, от времени. При этом обычно колебания близки к гармоническим для маленьких пузырьков ($R = 2 \div 3 \text{ мм}$), для больших размеров наблюдаются искажения симметричной формы пузырька: он периодически вытягивается и сокращается, при этом форма колебаний становится сложной. Предполагая, что

колебания пузырька вызваны температурным градиентом, для гауссова распределения температуры, вблизи максимума имеем $\delta T = \delta T_0(1 - x^2 / \theta^2)$, где x – расстояние от центра пучка, δT_0 – температура в центре пучка, θ – полуширина гауссового распределения.

Считая термокапиллярную силу гармонической, получаем для частоты колебаний $\omega \cong \left[\delta T_0 \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) (\rho R d)^{-1} \right]^{\frac{1}{2}}$. Для $d = 2 * 10^{-2}$ см, $\delta T_0 = 10K$, $R = 10^{-1}$ см находим $\omega = 5$ Гц, что соответствует эксперименту. Зависимости периода колебаний от интенсивности падающего излучения и размера пузырька также находятся в согласии с приведенной формулой (Рис.6.5).

Таким образом, интенсивность насыщения нелинейного механизма двухкомпонентной среды в некотором диапазоне параметров может ограничиваться неустойчивостью и автоколебаниями частиц в пространственно-неоднородном световом поле.

О влиянии внешнего термического воздействия на релаксацию алюминия при сжатии

Невский Сергей Андреевич

Коновалов Сергей Валерьевич, Филипьев Роман Анатольевич

Сибирский государственный индустриальный университет

Громов Виктор Евгеньевич, д.ф.-м.н.

nevskiy_sa@physics.sibsiu.ru

Изучение влияния внешних энергетических воздействий на физические и механические свойства металлов и сплавов в настоящее время вызывает повышенный интерес, в плане создания новых технологий обработки металлов. При длительной эксплуатации различных деталей, металлоконструкций под влиянием постоянных нагрузок, происходит изменение физических и механических свойств материала. В реальных условиях на материал действуют различные внешние воздействия. Одним из них является тепловое воздействие, следствием которого является изменение температуры материала и изменение характеристик деформации.

В нашей работе проведено исследование влияния внешнего теплового воздействия на релаксацию механических напряжений в поликристаллическом алюминии, при сжатии, за различные промежутки времени. Выбор поликристаллического алюминия в качестве материала исследований обусловлен тем, что релаксация напряжений, как показывают литературные источники, хорошо изучена в сплавах на основе железа, алюминию же уделяется мало внимания, хотя он и сплавы на его основе применяются в различных областях науки и техники.

Релаксация механических напряжений при повышенных и высоких температурах является тем процессом, который необходимо учитывать при оценке напряженного состояния различных крепежных деталей, дисков и лопаток турбин, в которых при эксплуатации возникают температурные напряжения [1]. Под термином «релаксация напряжений» обычно характеризуют уменьшение напряжений во времени под влиянием ползучести в нагруженном жестком теле (например, при растянутом и сжатом стержне) при постоянных линейных размерах [1]. По мнению авторов [1] для анализа доминирующих механизмов релаксации при различных температурах следует выделить три температурные области:

Низкотемпературная ($T < 0,25 T_{пл}$), где $T_{пл}$ – температура плавления (для Al $T_{пл} = 660^\circ C$), T – температура образца. Релаксация напряжений в этой области контролируется механизмами скольжения и пересечения дислокаций.

Среднетемпературная ($T = (0,25 - 0,5)T_{пл}$). Релаксация напряжений определяется пересечением дислокаций, преодолением ими барьеров Пайерлса и поперечным скольжением. В этой температурной области в действие вступают диффузионные процессы, вызывающие переползание дислокаций из одной (заблокированной) плоскости скольжения в другую. Скорость релаксации зависит от энергии активации экспоненциально.

Высокотемпературная ($T > 0,5 T_{пл}$). В этой области релаксация напряжений контролируется диффузионным механизмом перемещения дислокаций, переползанием дислокаций, движением винтовых дислокаций и вязким перемещением атмосфер Коттрелла.

Проведено исследование процесса релаксации при различных температурах (от 290 до 573 К). Эксперимент продолжался 600 с. В процессе исследования интерес представляли следующие зависимости:

Падение напряжения – величина численно равная изменению напряжения в образце $\Delta\sigma = \sigma_0 - \sigma_1$, где σ_0 – напряжение в момент начала релаксации, а σ_1 – напряжение в данный момент времени.

Средняя скорость релаксации $\nu = \Delta\sigma/\Delta t$, где $\Delta\sigma$ - падение напряжения, а Δt - интервал времени, за который оно произошло.

Для проведения экспериментов использована установка, описанная в [2]. Было изготовлено 100 образцов, представляющих алюминиевые призмы, площадью поперечного сечения $1.7 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$. Величина задаваемой нагрузки во всех опытах равнялась 382 МПа. По результатам опытов были построены релаксационные кривые при различных температурах за разные промежутки времени (рис 1).

Впоследствии была вычислена скорость релаксации за определенные промежутки времени при различных температурах. По усредненным данным построен график зависимости скорости релаксации от температуры (рис 2), по которому, можно сделать выводы о влиянии изменения температуры на скорость релаксации напряжений.

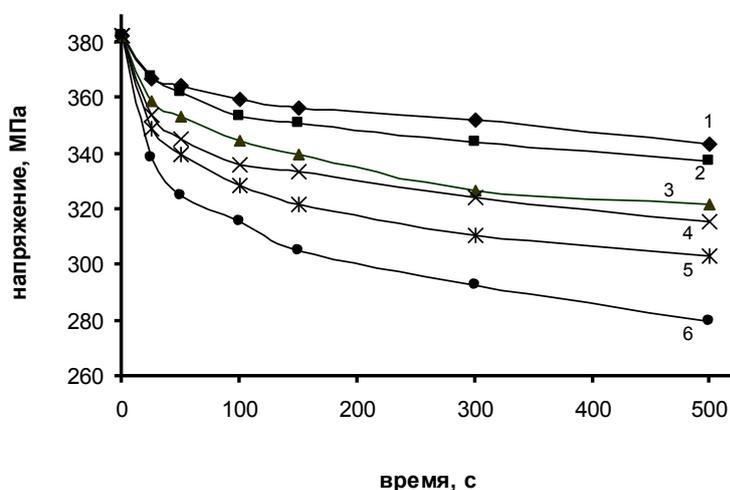


рис.1. Кривые релаксации при различных температурах испытания (1 – 290 К, 2 – 333 К, 3 – 373 К, 4 – 443 К, 5 – 473 К, 6 – 573 К)

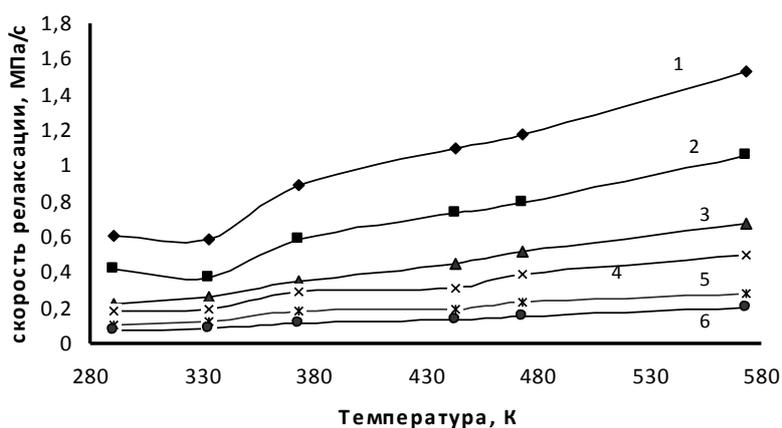


рис. 2. График зависимости средних значений скорости релаксации от температуры испытания (1, 2, 3, 4, 5 – кривые, полученные на основании расчета скорости релаксации за $t=25 \text{ с}$, 50 с , 100 с , 150 с , 300 с , 500 с , соответственно)

Из рисунка 1 видно, что при изменении температуры наклон кривых релаксации изменяется. Это свидетельствует о том, что с увеличением температуры глубина релаксации увеличивается. Нелинейная часть графиков показывает, что на малых временах процесс релаксации является неустановившимся, затем наступает стабилизация процесса релаксации напряжений. Из рисунка 2 следует, что с увеличением температуры

испытания средняя скорость релаксации на малых промежутках времени резко увеличивается, а на больших промежутках меняется незначительно.

Список публикаций:

[1] Борздыка А.М. Релаксация напряжений в металлах и сплавах / А.М. Борздыка, Л.Б. Гецов. – М.: Металлургия, 1978. – 256 с.

[2] Timofeev E.G. Research of stress relaxation in non-ferrous metals/ E.G. Timofeev, O.A. Filip'eva, S.V. Konovalov, V.E. Gromov // Electroplastic effect in metals (Processing of China – Russian Symposium 31th May - 4th June 2007, Graduate School at Shenzhen, Tsinghua University, China). Novokuznetsk: SibSIU, 2007, 319p.

Структурные подрешетки Бравэ в трех модификациях кристалла CaTiO₃

Николаева Елена Владимировна

Силинин Антон Владимирович

Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.

Elena_eruk@mail.ru

Многие сложные кристаллические структуры построены путем вложения друг в друга трансляционно совместимых подрешеток Бравэ одинаковых или различных сингоний [1]. Простейшими классическими примерами кристаллов, состоящих из подрешеток одинакового типа Бравэ, могут служить кристаллы со структурой каменной соли, алмаза, сфалерита, из подрешеток различного типа Бравэ – кристаллы флюорита и антифлюорита, куприта, пирита, рутила и т.д. Представление кристаллов в виде совокупности подрешеток различного типа Бравэ позволяет описать имеющуюся в них дополнительную, «скрытую» симметрию и предсказать вызванные ею особенности некоторых физических и физико-химических свойств, что находит свое подтверждение при анализе зонных спектров данных кристаллов [2], химической связи в них [3] и других физических и физико-химических свойств.

Наибольший интерес представляют кристаллические соединения, имеющие множество фаз различной симметрии, особенно если они содержат подрешетки различного типа Бравэ. Одним из таких кристаллов является CaTiO₃. В базе данных Inorganic Crystal Structure Database [4] было найдено три модификации данного соединения: моноклинная, ромбическая и кубическая; и был проведен анализ имеющихся в них подрешеток.

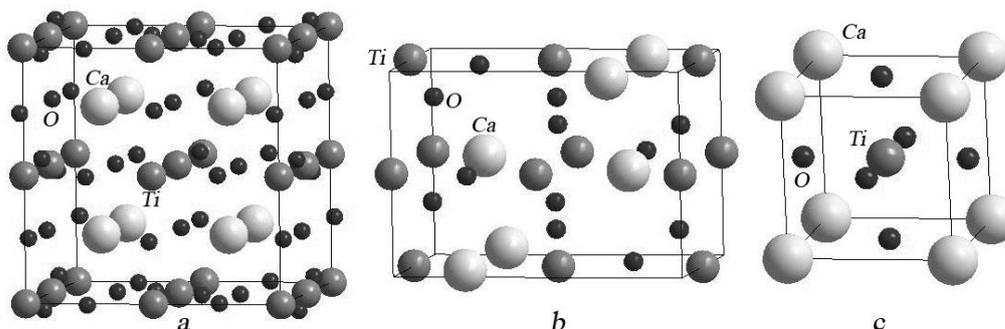


рис 1. Элементарная ячейка модификаций CaTiO₃: а) моноклинная, б) ромбическая, в) кубическая

Моноклинная модификация: кристаллическая решетка – простая моноклинная, параметры кристаллической решетки: $a=b=c=7.6 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, **пространственная группа (ПГ) № 11 (C_{2h}^2)**. Из параметров кристаллической решетки видно, что кристалл фактически обладает трансляционной симметрией простой кубической решетки, однако за счет несимметричного расположения атомов кислорода пространственная симметрия ниже и относится к моноклинной сингонии.

Подрешетки Ca и Ti простые кубические с пространственными периодами вдоль всех осей вдвое меньшими, чем кристаллические. Атомы O расположены таким образом, что их совокупность можно рассматривать одним из двух вариантов: 1) как восемь точных простых кубических подрешеток O с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическим; 2) атомы O можно приблизительно (с точностью не менее 7%) переместить в более симметричные позиции таким образом, что четыре из восьми подрешеток O объединятся в одну простую кубическую подрешетку с пространственными периодами вдвое меньше кристаллических, а две оставшиеся пары – в две аналогичные. Таким образом, получаются три простых кубических подрешетки с пространственными периодами вдвое меньше кристаллических, при этом совокупность любых двух из них можно рассматривать как ромбическую базоцентрированную подрешетку,

обладающую еще большей трансляционной симметрией. В зависимости от того, какие две подрешетки мы выбираем, центрирована будет грань, перпендикулярная той или иной оси.

Ромбическая модификация (перовскит) [5]: кристаллическая решетка – простая ромбическая, параметры кристаллической решетки: $a=5.3881 \text{ \AA}$, $b=5.4471 \text{ \AA}$, $c=7.6541 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ПГ № 62 (D_{2h}^{16}), кристаллические соединения, имеющие такую же структуру: CaTiO_3 , LaMnO_3 , YAlO_3 , RFeO_3 ($R = \text{La, Pr, Nd, Sm, Eu, Y}$). Четыре подрешетки Ti совмещены в одну базоцентрированную ромбическую подрешетку, при этом пространственный период подрешетки вдоль оси z вдвое меньше соответствующего пространственного периода кристаллической решетки, а периоды вдоль осей x и y совпадают с кристаллическими. Атомы Ca расположены таким образом, что их совокупность можно рассматривать следующим образом: 1) как четыре точных простых ромбических подрешеток Ca с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическими; 2) атомы Ca можно приближенно (с точностью не менее 3%) переместить в более симметричные позиции таким образом, что они объединятся в одну базоцентрированную ромбическую подрешетку с пространственным периодом подрешетки вдоль оси z вдвое меньше соответствующего пространственного периода кристаллической решетки, периоды вдоль осей x и y совпадают с кристаллическими. Атомы O расположены таким образом, что их совокупность можно рассматривать одним из двух вариантов: 1) как двенадцать точных простых ромбических подрешеток O с пространственными периодами, совпадающими с кристаллическим; 2) атомы O можно приближенно (с точностью не менее 7%) переместить в более симметричные позиции таким образом, что они объединятся в одну объемноцентрированную ромбическую подрешетку с пространственными периодами вдвое меньше кристаллических.

Возникновение повышенной, по сравнению с кристаллической, симметрии подрешеток кислорода и кальция в кристаллах моноклинной и ромбических систем при малых смещениях этих ионов в более симметричные позиции приводит к вырождению основного состояния этих подрешеток. По этой причине как раз и происходят малые смещения этих ионов в несимметричные позиции и снятие вырождения за счет кооперативного эффекта Яна-Теллера.

Кубическая модификация: кристаллическая решетка – простая кубическая, параметры кристаллической решетки: $a=b=c=3.795 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ПГ № 221 (O_h^1), кристаллические соединения, имеющие такую же структуру: BaTiO_3 , PbTiO_3 , PbZrO_3 . Три простых кубических подрешетки кислорода расположены таким образом, что любые две из них можно рассматривать как ромбическую базоцентрированную подрешетку. В зависимости от того, какие две подрешетки мы выбираем, центрирована будет грань, перпендикулярная той или иной оси. Остальные подрешетки Ca и Ti совпадают по своему типу Бравэ и пространственным периодам с кристаллической решеткой.

Список публикаций:

- [1] Поплавной А.С., Силинин А.В. // Кристаллография. 2005. Т. 50. № 5. С. 782.
- [2] Басалаев Ю.М., Журавлев Ю.Н., Кособуцкий А.В., Поплавной А.С. // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 5. С. 826.
- [3] Журавлев Ю.Н., Поплавной А.С. // Физика твердого тела. 2003. Т. 45. № 1. С. 37.
- [4] База данных Inorganic Crystal Structure Database (<http://www.fiz-karlsruhe.de/ecid/Internet/en/DB/icsd/>).
- [5] Николаева Е.В., Силинин А.В., Поплавной А.С. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. Т. 5. №1. С. 35.

Модификация свойств аморфных и нанокристаллических сплавов под воздействием интенсивного потока β -частиц

Новиков Геннадий Викторович

Мясоедов Дмитрий Сергеевич, Чиванов Андрей Викторович

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.

feodorov@tsu.tmb.ru

В настоящее время большое внимание уделяется всестороннему изучению новых классов материалов – аморфных и нанокристаллических сплавов. Уникальное сочетание высоких магнитных, электрических, механических и др. свойств делает перспективным применение этих сплавов во многих отраслях промышленности.

Цель работы: установить влияние низкоэнергетического β - облучения на изменение механических свойств тонких лент аморфных и нанокристаллических сплавов, путем измерения микротвердости, а также на морфологические особенности их поверхностей.

Для проведения исследований использовали ленты аморфного сплава на основе Co (80%) – АМАГ-180 и нанокристаллического сплава на основе Fe (73,5%) – АМАГ-200, толщиной 20 мкм и шириной 4 мм, из которых вырезались образцы длиной 15 мм. Перед облучением, образцы наносили на подложку толщиной ≈ 1 мм, в качестве которой использовали полиэфирный композит с микротвердостью $H_v \approx 1051$ кг/мм². Образцы облучались в колонне электронного микроскопа ЭМВ-100Л при вакууме $\sim 10^{-4}$ Па, с выдержкой от 10 до 60 минут с интервалом в 10 минут сфокусированным пучком β - частиц диаметром ≈ 2 мм. Энергия β - частиц составляла 75 кэВ. Облучению подвергали обе поверхности лент: контактную и свободную. Микротвердость образцов определяли на приборе ПМТ-3 с использованием пирамидки Виккерса. Изменение морфологии поверхности фиксировали при помощи оптического микроскопа.

В зоне воздействия потока β - частиц, при больших временах облучения наблюдали образование кратера, в ряде случаев разрушение образца. Исследования показали, что микротвердость всех образцов монотонно увеличивается по мере приближения к области воздействия пучка. Увеличение микротвердости, является следствием совместного действия низкоэнергетических β - частиц и нагрева, возникающего при взаимодействии электронов с поверхностью металлических сплавов, и связано с образованием различного рода дефектов в зоне воздействия, таких как зерна, границы зерен, а также со структурными превращениями в сплавах, например рост микрокристаллов на поверхности сплава.

О характере структурных изменений судили по морфологическим особенностям деформации и разрушения сплавов в зоне воздействия индентора. При этом формировались характерные картины разрушения: отпечаток от индентора окруженный трещинами ориентированными параллельно его сторонам, что является следствием процесса охрупчивания аморфных и нанокристаллических сплавов. Чем ближе проводилось микроиндентирование к области воздействия, тем выраженнее характер разрушения образца, увеличивалось количество радиальных прямых трещин, часть из которых может объединяться с кольцевыми трещинами, вплоть до выхода трещин на грани образца.

В данной работе наблюдали зеренную и дендритную кристаллизацию поверхности в нанокристаллическом сплаве на основе Fe на контактной и зеренный тип кристаллизации у аморфного сплава на основе Co с неконтактной стороны. Обнаружен рост микрокристаллов, которые образовывались в зоне действия сфокусированного пучка β - частиц. После облучения на поверхностях контактной и не контактной сторон появляются структурные неоднородности. На неконтактной стороне ленты, после облучения исчезает рельеф в зоне воздействия пучка. На поверхности сплавов в результате воздействия сфокусированного пучка электронов наблюдали образование пленки из твердого вещества, предположительно образующейся в результате поверхностных превращений стимулированных электронным пучком. При исследовании морфологии поверхности образца на оптическом микроскопе, наблюдали интерференционные картины двух видов: картина, образованная в результате воздействия β - частиц, и картина, образованная в результате воздействия индентора.

Установлены морфологические особенности макрокартин деформирования и разрушения ленточных образцов аморфных и нанокристаллических сплавов, подвергнутых воздействию β - частиц, в зависимости от величины прикладываемой нагрузки и времени облучения. По характеру морфологических особенностей, можно судить о температуре в зонах индентирования. Исследование макрокартин деформирования и разрушения аморфных и нанокристаллических сплавов позволяет судить о температурах нагрева и протекающих превращений в тех или иных областях, в силу их подобия картинам разрушения и деформирования, полученных при регламентированном печном отжиге.

Ионно-синтезированные наночастицы Co и Ni в матрице SiO₂

Петров Дмитрий Анатольевич

Иванцов Руслан Дмитриевич

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Эдельман Ирина Самсоновна, д.ф.-м.н.

irbiz@iph.krasn.ru

Потребность в высокоскоростных оптических устройствах записи, обработки и передачи информации стимулирует поиск материалов с высокими значениями магнитооптических (МО) и нелинейно-оптических параметров. Одним из перспективных путей развития этого направления является создание композитных материалов на основе наночастиц переходных металлов в диэлектрических или полупроводниковых матрицах. Особенности возбуждения электронов проводимости в наноразмерных частицах металла в видимом диапазоне приводят к изменению спектральных зависимостей недиагональных компонент тензора оптической проводимости, ответственных за МО эффекты, что может усиливать МО эффекты в необходимых областях спектра.

Настоящая работа посвящена исследованию МО эффектов – Фарадея (ЭФ), полярного и меридионального Керра (ПЭК и МЭК) в ансамбле наночастиц кобальта (никеля), создаваемых в матрице аморфного диоксида кремния с помощью технологии имплантации ионов Co^+ (Ni^+). Имплантация была произведена с энергией 30 кэВ для Co и 40 кэВ для Ni при комнатной температуре подложки с помощью ионно-лучевого ускорителя ИЛУ-3 в контролируемом вакууме 10^{-3} Па. Дозы имплантации для обоих металлов составили: $0.25 \cdot 10^{17}$, $0.5 \cdot 10^{17}$, $0.75 \cdot 10^{17}$, $1 \cdot 10^{17}$ ион/см² (Образцы 1-4 соответственно). Плотность тока ионного луча поддерживалась ниже 4 мкА/см² для Co и ниже 8 мкА/см² для Ni чтобы предотвратить неконтролируемое нагревание стеклянной мишени. Глубина зоны имплантации в стекле составляла около 30 нм.

Магнитные свойства синтезированных материалов исследовались методом индукционной магнитометрии. Зависимость величины магнитного момента от магнитного поля, приложенного либо в плоскости, либо перпендикулярно плоскости образца, регистрировалась при комнатной температуре на магнитометре с развёрткой магнитного поля до 500 мТл. При обработке результатов магнитных измерений диамагнитный вклад подложки был вычтен, а величина регистрируемого магнитного момента была приведена к объёму имплантируемого слоя образца с целью сравнения намагниченности образцов. МО ЭФ для образцов с Co был измерен в нормальной геометрии как функция длины электромагнитной волны в спектральном интервале 500-1000 нм, и внешнего магнитного поля, которое изменялось в пределах от -500 до 500 мТл. ПЭК для образцов с Co был измерен в спектральном диапазоне 400-800 нм в магнитном поле до 1.4 Тл, направленном вдоль нормали к поверхности образцов, а для Ni от 400 до 880 нм в поле до 1.0 Тл. МЭК для Co с р-поляризацией световой волны был измерен при длине волны 550 нм в магнитном поле до 120 мТл, направленном параллельно поверхности образца и плоскости падения света. При измерении МО эффектов использовалась модуляция ориентации плоскости поляризации световой волны по азимуту, которая обеспечила точность измерения МО эффектов ± 0.2 мин.

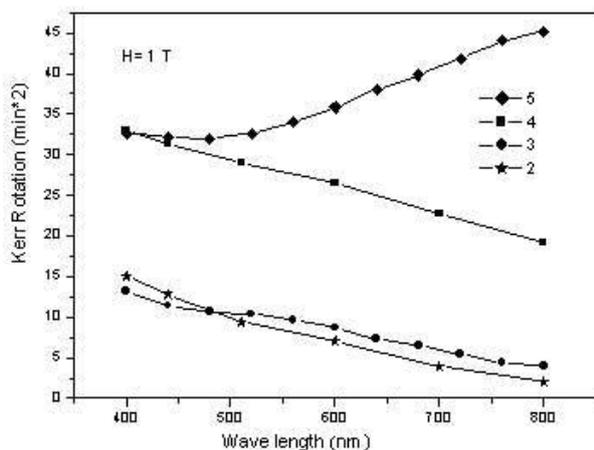


рис.1. Спектральные зависимости ПЭК для образцов 2-4 с наночастицами Co и однородной плёнки (кривая 5) в магнитном поле 1.0 Тл при комнатной температуре

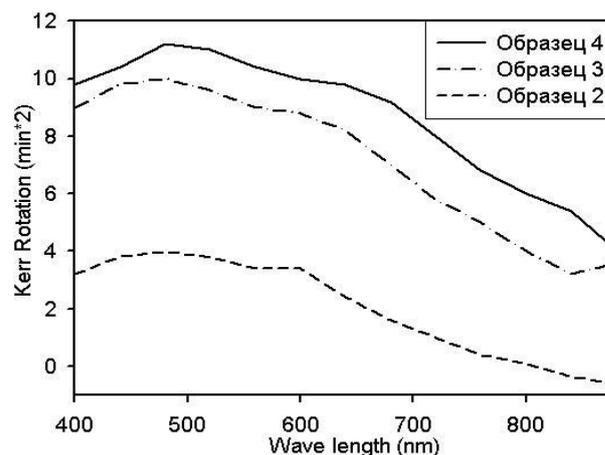


рис.2. Спектральные зависимости ПЭК для образцов 2-4 с наночастицами Ni в магнитном поле 1.0 Тл при комнатной температуре

Полученные при сканировании магнитного поля в плоскости образца кривые намагничивания показали, что при повышении дозы имплантации, магнитный отклик при комнатной температуре изменялся от парамагнитного (при минимальной дозе имплантации), к суперпарамагнитному (при средних дозах) и до ферромагнитного (максимальная доза). Исследование угловой зависимости петли магнитного гистерезиса ферромагнитного образца показало анизотропию типа “лёгкая” плоскость, характерную для тонкой ферромагнитной плёнки. Осью “трудного” намагничивания является нормаль к плоскости образца.

Из исследования полевых зависимостей намагниченности и магнитооптических эффектов, измеренных при двух ориентациях внешнего магнитного поля, оценен средний размер сформированных наночастиц. Он составляет 4-5 нм. Было выяснено, что с ростом дозы имплантации, сначала, преимущественно возрастает концентрация наночастиц в имплантируемом слое, а затем происходит их быстрый рост.

Обнаружено принципиальное отличие спектральных зависимостей МО эффектов Керра и Фарадея для имплантированных образцов от аналогичных зависимостей для однородных образцов (рис.1). Также есть значительные отличия между исследованными образцами с Co и с Ni (рис.2). Для образцов имплантированных Co было проведено моделирование МО эффектов Фарадея и Керра в приближении эффективной среды. Модель качественно описывает эффекты, наблюдаемые для образцов 2-4.

Исследование плазморезонансного поглощения наночастиц серебра и золота

Подлегаева Людмила Николаевна

Звиденцова Надежда Семеновна, Швайко Ирина Львовна, Морозова Татьяна Владимировна

Кемеровский государственный университет

Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.

ludmila.k.06@mail.ru

Когерентное колебание совокупности электронов проводимости, вызванное воздействием электромагнитного поля, приводит к поглощению света металлическими наночастицами. Эти резонансы известны как поверхностные плазмоны. Наличие характерной плазмонной полосы в спектре поглощения наночастиц серебра и золота позволяет использовать спектрофотометрию в качестве метода контроля за формированием частиц металлов.

В работе проведено исследование изменения спектров плазморезонансного поглощения коллоидных растворов серебра и золота в зависимости от основных параметров синтеза этих систем (концентрации реагентов, pH, температуры, среды), а также длительности хранения и концентрации коллоидных частиц.

Частицы серебра получали жидкофазным восстановлением азотнокислого серебра танином в присутствии буферного раствора ($\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 + \text{NaOH}$) с $\text{pH}=9,8$. Гидрозоли золота также получали восстановлением золотохлористоводородной кислоты формальдегидом в присутствии карбоната калия. Во всех случаях получали окрашенные прозрачные растворы с полосой поглощения в области 400-420 нм для серебра и 510-530 нм для золота. Спектры поглощения измеряли на спектрофотометрах СФ-46, СФ-56. Определение основных дисперсионных характеристик осуществляли по микрофотографиям частиц, полученных на просвечивающем электронном микроскопе ЭМВ-100. Анализ микрофотографий частиц металлов показал, что размеры частиц лежат в интервале 15 – 90 нм для частиц серебра и 15 – 30 нм для частиц золота.

На основании проведенных исследований получены закономерности изменения полосы плазмонного поглощения в зависимости от параметров синтеза и свойств получаемых коллоидных систем. Так, при варьировании соотношения концентрации восстанавливаемых ионов металла и восстановителя, качественно меняется оптический спектр системы коллоидных частиц серебра, четко выраженная полоса плазмонного поглощения наблюдается в избытке ионов серебра при синтезе (рис. 1, а). С увеличением pH среды (5,1, 7,1, 8, 9,8) наблюдается рост интенсивности и коротковолновый сдвиг максимума плазмонной полосы (рис. 1, б). Повышение температуры синтеза и увеличение концентрации коллоидных частиц металла также приводит к росту интенсивности поглощения.

Анализ спектров проводили в приближении теории Ми для малых частиц. Из экспериментальных получены значения $\lambda_{\text{рез}}$, рассчитаны значения эффективной концентрации электронов проводимости в частицах металлов, коэффициентов затухания электронной плазмы.

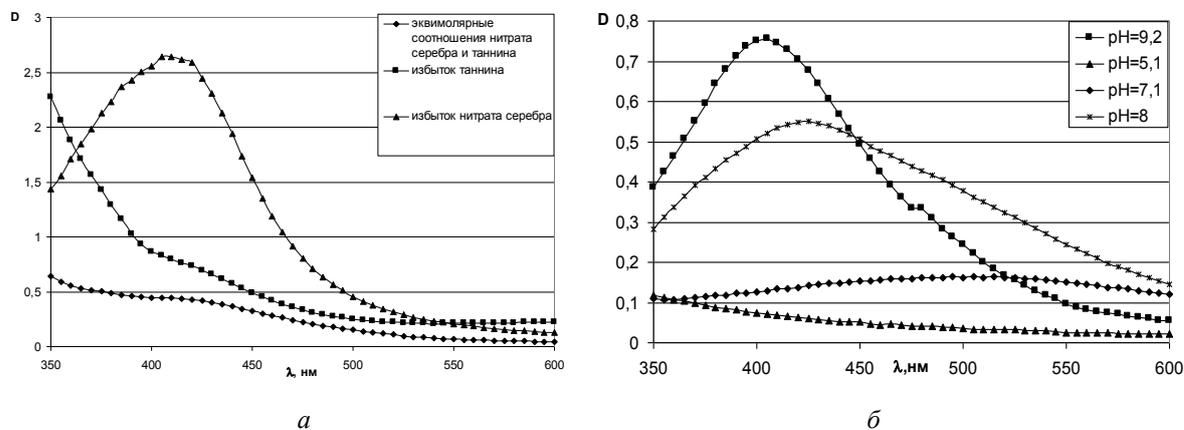


рис. 1. Оптические спектры гидрозолей серебра, полученных: а) в разных соотношениях концентраций восстановителя и восстанавливаемых ионов; б) при разных pH среды.

Установлено, что введение в коллоидные системы адсорбентов, таких как тетраазаинден (ТАИ), фенилмеркаптотетразол (ФМТ) и др., приводит к снижению оптической плотности в максимуме поглощения, что указывает на взаимодействие молекул адсорбентов с поверхностью коллоидных частиц металлов.

Неизменность оптических спектров коллоидных растворов серебра и золота при длительном хранении позволяет сделать вывод об устойчивости полученных систем к агрегации.

Механизм конденсации и мезоструктура сапфиров Приморских месторождений

Полянский Дмитрий Александрович

Баркар Анна Валерьевна

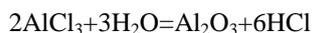
Дальневосточный государственный университет

Дальневосточный геологический институт ДВО РАН

rambo192@mail.ru

Через территорию Приморского и частично Хабаровского края проходит Западнотихоокеанский пояс месторождений сапфиров, связанных с щелочными базальтами. В частности, а Приморье данные месторождения привязаны к территориям Шкотовского, Борисовского и Самаргинского базальтовых плато. Петролого-минералогические индикаторы сапфиросности исследованы и установлены, однако механизм конденсации сапфиров в базальтовых слоях до сих пор не изучен.

В работе проводится анализ структуры и условий осаждения синих и зелёных сапфиров. Согласно выдвигаемой теории формирование сапфиров происходит в пустотах вулканического аппарата щелочно-базальтового вулкана во время прохождения через них горячего (около 200 С) флюида, несущего газообразный хлористый алюминий (AlCl_3). Вступая в пустотах породы во взаимодействие с грунтовыми водами AlCl_3 , как и другие комплексные соединения галогенов с Al, Fe^{3+} , Zr, Hf, Ta, Nb, и др. подвергается гидролизу, приводя к гетерогенному зародышеобразованию и росту на стенках пустот кристаллов Al_2O_3 согласно реакции:



Это согласуется с тем, что в местах таких месторождений обнаружены следы различных хлоридов. Кроме того, при химическом осаждении конденсатов алюминия из газообразной фазы в лабораторных условиях используется метод, при котором Al доставляется к подложке в виде летучих соединений с галогенами. Конденсация сапфиров происходит послойно, каждый слой соответствует прохождению отдельного флюида. При изменении флюидного режима прекращается поступление AlCl_3 . Среда более не пересыщена глинозёмом, поэтому корунд прекращает рост. Поверхностный слой образует соединения с Si, Mg, Na, K и другими элементами. Рост следующего слоя происходит при прохождении очередного флюида. Данная межслойная граница чётко видна на полученных изображениях сколов, сделанных вдоль оси роста, что полностью позволяет исключить теорию конденсации сапфиров из жидких магматических образований (рис.1).

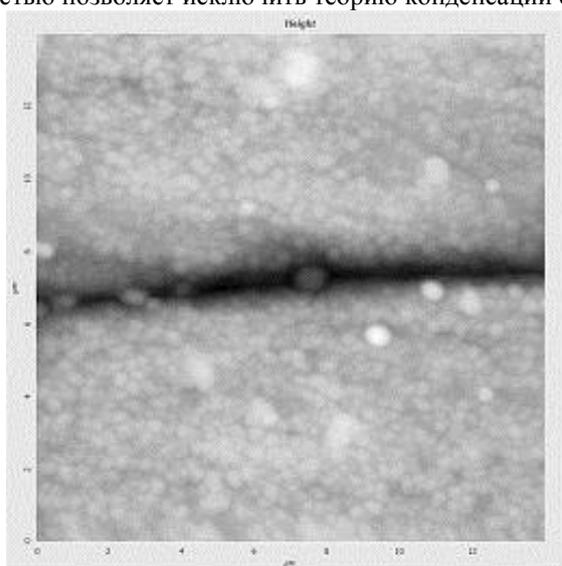


рис. 1. Граница между слоями синего сапфира, скан 15*15 мкм

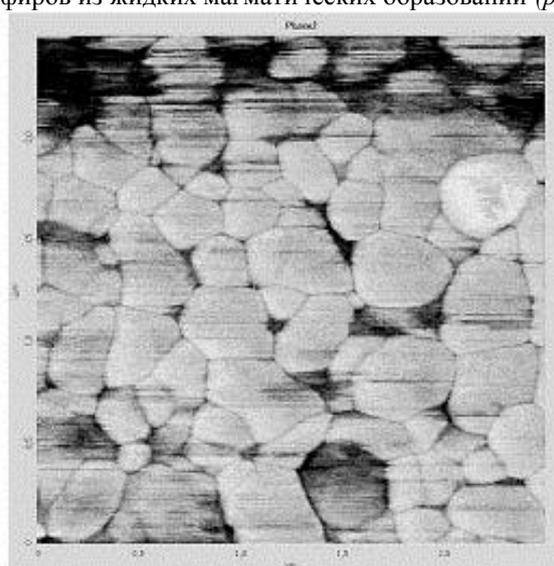


рис. 2. Мезоструктура синего сапфира, скан 2.5*25 мкм

Исследование мезоструктуры сапфиров с помощью атомного силового микроскопа показало, что она состоит из осадков конденсатов, между которыми явно выражены границы стыка. Такая структура характерна для механизма осаждения «пар-кристалл», который имеет место в случаях, когда температура подложки меньше 75% температуры плавления осаждаемого конденсата, что как раз имеет место в данном случае ($T_{пл} \sim 2000$ С, $T_{подл} \sim 30$ С) (1). В составе мезоструктуры можно выделить два типа конденсатов, крупные ($\sim 200-300$ нм, и мелкие, дол 50-70 нм) (рис.2). Так как рассматриваются конденсаты внутри одного слоя, то соответственно время их образования ограничено временем прохождения через породу одного флюида. Следовательно, 2 типа размеров свидетельствуют об их возникновении во время первичного и вторичного зародышеобразования, что так же отмечается в теории образования конденсированных сред из газовой фазы (1).

Отсутствие на дифракционных картинах с исследуемых образцов чётких кристаллических пиков свидетельствует о том, что данная структура является нанокристаллической. Конденсация в такую фазу происходит вследствие того, что осаждение идёт на достаточно холодную подложку, и атомам просто не хватает подвижности чтобы выстроиться в равновесную кристаллическую структуру в больших объёмах. Данная неравновесная структура является весьма устойчивой, и подвергается рекристаллизации при отжиге при температурах, близких к температуре плавления.

Список публикации:

[1] Палатник Л. С., Фукс М. Я., Косевич В. М. Механизм образования конденсированных пленок. М.: Наука, 1972.

Электропроводность монокристаллов сегнетоэлектрика-релаксора SBN с примесями родия и европия

Потёмкин Вячеслав Владимирович
Тверской государственный университет
Иванов Владимир Васильевич
Vladimir.Ivanov@tversu.ru

Монокристаллы твердых растворов ниобата бария-стронция с общей формулой $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$ (SBN) относятся к классу релаксорных сегнетоэлектриков, физические свойства которых могут быть модифицированы в широких пределах как путем изменения соотношения ионов стронция и бария в составе твердого раствора, так и введением в матрицу SBN примесей редкоземельных и переходных металлов. Монокристаллы SBN находят широкое применение в оптике, например в качестве голографической среды для оптической памяти. Применение данных материалов в нелинейной фоторефрактивной оптике требует использования монокристаллов, поляризация которых осуществляется путем приложения к кристаллу постоянного электрического поля.

В настоящей работе проведены исследования электропроводности монокристаллов SBN номинально чистых и с примесями Eu и Rh в температурном интервале 15-80⁰С на постоянном токе, с использованием электрометрического усилителя У5-11. Постоянное напряжение подавалось на образец от источника питания ТЭС-13. Напряженность электрического поля на образце не превышала 150 В/см. Образец термостатировался при фиксированной температуре в течение 30 минут.

Для подтверждения экспоненциальной зависимости электропроводности от температуры построены кривые $\ln \sigma / \sigma_0$ (где $\sigma_0 = 10 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$) от обратного значения температуры ($1/T$) для беспримесного кристалла (рис.1), с примесью европия (рис.2) и родия (рис.3) с различной концентрацией примесей.

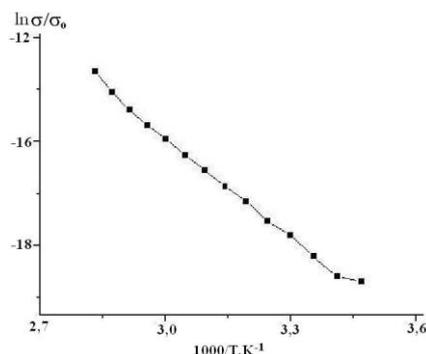


рис.1. Зависимость $\ln \sigma / \sigma_0$ от обратной температуры для номинально чистого монокристалла SBN.

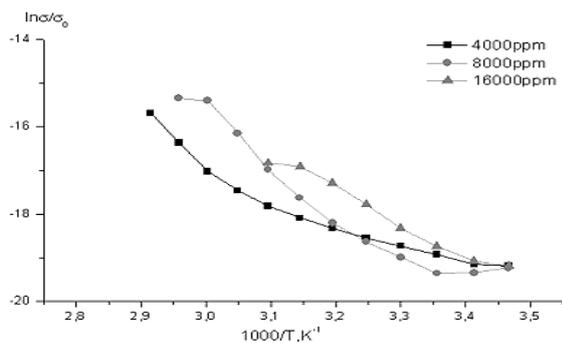


рис.2. Зависимость удельной электропроводности от обратной температуры для монокристалла SBN с примесью европия

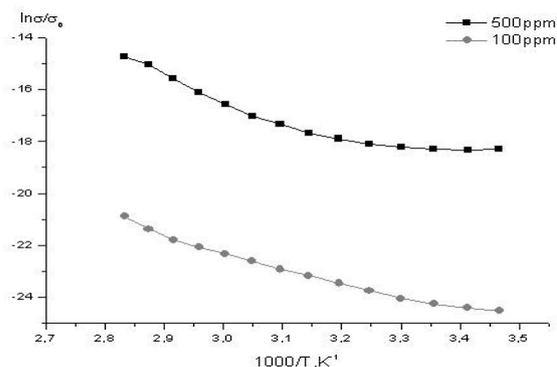


рис.3. Зависимость удельной электропроводности от обратной температуры для монокристалла SBN с примесью родия

Особенностью сегнетоэлектрических кристаллов SBN является установленный характер проводимости в исследованном интервале температур. По-видимому, электронный механизм электропроводности в этих кристаллах обусловлен возбуждением электронов в зону проводимости с уровней в запрещенной зоне, создаваемых примесями.

Редкоземельные ионы и ионы переходных металлов могут, как понижать, так и повышать проводимость данных монокристаллов.

Для монокристаллов SBN с примесью родия увеличение концентрации ведет к увеличению проводимости, а для монокристаллов SBN с примесью европия однозначно сказать о влиянии примеси на проводимость нельзя.

Вычислены значения энергии активации в исследуемом интервале температур и составляют для номинально чистого - 0,75 эВ, с примесью европия с концентрацией 4000 ppm – 0,34 эВ, с концентрацией 8000 ppm – 0,62 эВ, с концентрацией 16000 ppm – 0,78 эВ, с примесью родия с концентрацией 100 ppm – 0,49 эВ, с концентрацией 500 ppm - 0,99 эВ.

Структурные подрешетки в одноэлементных кристаллах кубической сингонии

Прохоров Павел Евгеньевич

Кемеровский государственный университет

Силинин Антон Владимирович, к.ф.-м.н.

propav@mail.ru

В современном материаловедении изучаются все более сложные вещества, что требует создания более эффективных методов исследования кристаллов, соответствующих современной компьютерной технике и прецизионности исследований. Традиционно идеальный кристалл представляют как бесконечно повторяющуюся в пространстве элементарную ячейку, однако структуру кристалла можно представить и как суперпозицию подрешеток, содержащих трансляционно эквивалентные атомы одного сорта [1].

На кафедре теоретической физики при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе “У.М.Н.И.К.” ведется разработка программного комплекса “SubFinder”, осуществляющего поиск подрешеток разного типа Бравэ в кристаллических соединениях произвольной сингонии [2].

SubFinder позволяет выполнять поиск подрешеток в кристаллах в “пакетном” режиме, обрабатывая сразу большой массив записей из кристаллографических баз данных. Ранее в силу отсутствия соответствующего программного обеспечения и трудоемкости этого процесса анализ подрешеток производился в отдельных кристаллах либо группах. Поэтому представляется актуальной задача “сплошного” анализа структурных подрешеток во всех кристаллах из базы данных ICSD (Inorganic Crystal Structure Database). Это позволит получить наиболее полный массив информации по подрешеткам в неорганических кристаллах.

Данная задача разбита на ряд этапов: во-первых, последовательно осуществляется анализ групп одноэлементных, бинарных, тройных и более сложных кристаллов и, во-вторых, внутри каждой из этих групп рассматриваются разные сингонии.

В данной работе выполнен анализ одноэлементных кристаллов кубической сингонии. Были исследованы подрешетки в 17 кристаллах: Ne, Tl, Ce, Ar, D₂ (две модификации), He, Gd, C, Si, H₂, Ga, C₈, N₂ (две

модификации), O, F₂. Среди рассматриваемых кристаллов были найдены кристаллы с различным типом подрешеток Бравэ: O (гамма-кислород), F₂ (бета-дифлюорит). Данные кристаллы обладают одинаковой кристаллической структурой, трансляционная симметрия относится к простому кубическому типу Бравэ, пространственная группа № 223 (O_h³). Минимальный базис кристаллов записывается в соответствующих координатах: $\mathbf{V}_1 = (1/4; 1/2; 0)$ – позиция 6d, $\mathbf{V}_2 = (0; 0; 0)$ – позиция 2a.

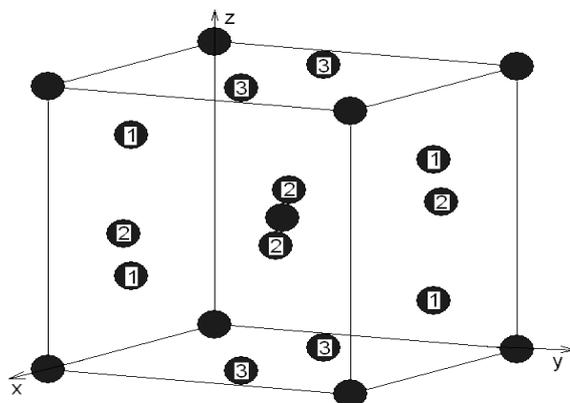


рис.1. Элементарная ячейка кристалла O

Кристаллы можно представить как совокупность либо восьми простых кубических (Γ_c) подрешеток, либо одной объемноцентрированной кубической (Γ_c^v) и трех простых тетрагональных (Γ_q). При этом простые тетрагональные подрешетки будут обладать более высокой трансляционной симметрией, чем кристалл в целом.

Атомы под номерами 1, 2, 3 (рис.1) относятся к разным подрешеткам типа Γ_q , при этом в первой подрешетке пространственный период вдоль оси z вдвое меньше соответствующего пространственного периода кристаллической решетки, а периоды вдоль x и y совпадают. Во второй – вдоль оси y вдвое меньше, а периоды вдоль x и z совпадают. В третьей – вдоль оси x пространственный период вдвое меньше, а вдоль y и z совпадают.

В дальнейшем планируется изучить проявление имеющейся в кристаллах более высокой, “скрытой” симметрии в некоторых их свойствах, в частности, в спектрах элементарных возбуждений и особенностях химической связи.

Список публикаций:

[1] Поплавной А.С, Силинин А.В // Кристаллография. 2005. Т. 50. № 5. С. 782-787.

[2] Силинин А.В. Разработка программного комплекса для выделения высокосимметричных подрешеток в сложных кристаллических соединениях и их визуализации в прямом и обратном кристаллических пространствах / Доклады Десятой международной конференции «Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)». - Кемерово, 2007. - Т. 2, с. 475-476.

Концентрационная зависимость среднего температурного коэффициента модуля всестороннего сжатия железо-никелевых сплавов

Сазонов Андрей Рудольфович

Ситников Габельнур Ахатович

Марийский государственный университет

Леухин Александр Викторович

Ulensigel@mail.ru

Весьма важное значение для развития техники представляют сплавы железа и никеля. Поскольку условия работы изделий на их основе значительно отличаются в разных областях промышленности, необходимы данные о физико-механических свойствах этих материалов в широком температурном интервале. К числу наиболее важных следует отнести упругие характеристики, значения которых используются при теоретических и экспериментальных исследованиях прочности, жесткости и термостойкости элементов изделий на основе подобных сплавов.

В настоящей работе получены упругие модули сплавов Fe-Ni (0÷30%), рассчитанные по измеренным значениям скорости распространения продольного и поперечного звука частотой 5 МГц импульсно-фазовым методом. Для увеличения температурного интервала измерения до 1300 К использовался вывод пьезопреобразователя из зоны нагрева с помощью звукопровода.

Модуль всестороннего сжатия Fe-Ni сплавов зависит от энергии связи, ширины d-полосы и числа d-электронов. Таким образом, эта величина характеризует уровень энергетического взаимодействия между атомами в кристаллической решетке.

На рис. 1 представлена концентрационная зависимость модуля всестороннего сжатия. Полученные нами результаты для концентрации 0÷30% Ni сведены с результатами работ [1, 2] для концентрации 30÷100% Ni.

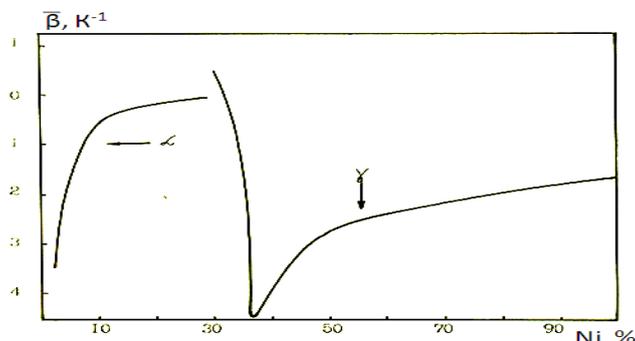


рис. 1. Конц-ная зав-сть среднего темп-го коэфф-та модуля всестороннего сжатия Fe-Ni сплавов.

Согласно результатам работы [2] модуль К ГЦК сплавов незначительно уменьшается при увеличении содержания железа в сплаве до 50 %, затем происходит резкий спад с минимумом в инварной области. Это связано с особенностями электронного строения сплавов Fe-Ni. Известно, что с изменением составов сплавов изменяются их фотоэлектронные спектры и смещается уровень Ферми. При увеличении содержания железа в сплавах происходит заполнение 3d-полосы и уровень Ферми смещается в сторону заполнения, что приводит к увеличению антисвязывающей части полосы, а это ведет к понижению межатомных сил связи, благодаря чему и происходит резкое уменьшение модуля К при концентрации железа более 50 %.

При увеличении содержания железа в сплавах от 70% до 100% происходит рост модуля всестороннего сжатия. Для объяснения данной аномалии сопоставим концентрационные зависимости модуля всестороннего сжатия по нашим данным в интервале концентраций никеля от 0% до 30% и по результатам [2] в интервале концентраций никеля от 30% до 100% со сдвигом спектра валентных электронов относительно уровня Ферми.

Как видно из рисунка температурный коэффициент модуля всестороннего сжатия у сплавов, имеющих ОЦК решетку, резко возрастает в интервале концентраций никеля от 0% до 11% и почти не изменяется у инварных сплавов. Резкое изменение модуля К можно объяснить изменением плотности состояний с температурой в примыкающей к уровню Ферми части 3d-полосы, причем в α-фазе плотность состояний изменяется на гораздо большую величину, чем в γ-фазе.

Малый температурный коэффициент модуля всестороннего сжатия в инварной области можно объяснить тем, что в сплавах, содержащих ~30% Ni, уровень Ферми проходит через максимум пика плотности состояний, образованных Iq-орбиталями.

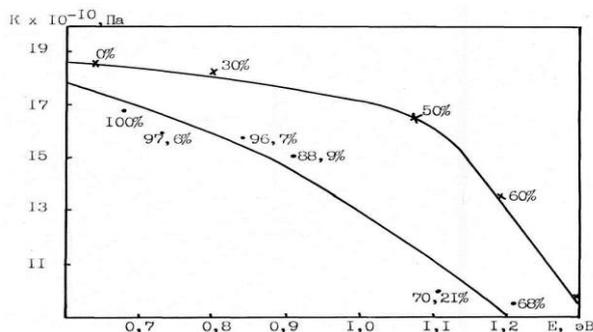


рис. 2. Связь модуля всестороннего сжатия (K) с положением уровня Ферми относительно максимума фотоэлектронного спектра электронов проводимости.

Таким образом, можно констатировать, что существует корреляционная зависимость между концентрационным и температурным поведением упругих модулей и особенностями электронного строения исследованных сплавов.

Список публикаций:

[1] Physics and applications of alloys. Tokio: Manuzen co., 1978, p. 646.

[2] Candron R., Neunier J., Costa P. – Solid State Cmmuns, 1974, v. 14, N 10, p. 975-978.

Сравнительный анализ моделей теплопроводности композиционных систем

Саросек Станислав Иосифович

Бачурина Анна Юрьевна

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы

Никитин Александр Викторович, к.т.н.

sarosek.stas@gmail.com

Выполнен сравнительный анализ моделей теплопроводности композиционной системы. Рассмотрены модели: Максвелла, статистическая, матричная, Максвелла-Бюргера-Эйкена, перколяционная, пропорциональная.

Для определения влияния на эффективный коэффициент теплопроводности теплофизических параметров матрицы и компонентов наполнителя, а также структуры композиционной системы, рассматривается масштабно значимый элемент. В общем случае выбор этого элемента зависит от концентрации компонентов наполнителя, соотношения коэффициентов теплопроводности матрицы и наполнителя, распределения компонентов наполнителя в матрице. Для этого элемента определяется эффективный коэффициент теплопроводности по значениям коэффициентов теплопроводности отдельных компонентов композита. На рис. 1 построены зависимости эффективного коэффициента теплопроводности от концентрации наполнителя: Максвелла (1), статистическая, матричная (2), Максвелла-Бюргера-Эйкена (3), перколяционная модель (5), пропорциональная (6) [1].

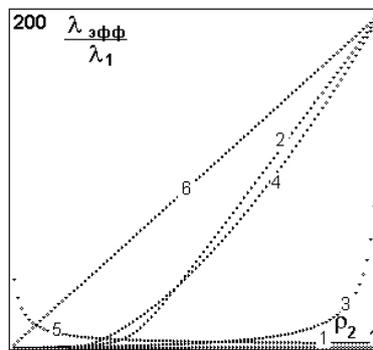


рис.1 Относительные значения эффективного коэффициента теплопроводности при $\lambda_2 / \lambda_1 = 200$

На рис. 1 λ_2, λ_1 соответственно коэффициенты теплопроводности наполнителя и матрицы; ρ_2 - концентрация наполнителя.

Вычислительные эксперименты по расчету эффективного коэффициента теплопроводности композиционных систем показали (рис.2), что применение указанных моделей требует, ограничено и требует серьезного анализа и обоснования. Наиболее надежным методом (помимо экспериментального) определения эффективной теплопроводности является пока метод прямого моделирования [2]. Следует отметить, что ни одна из рассмотренных моделей не учитывает изменение коэффициента теплопроводности наполнителя от размера его частиц. При численном моделировании теплопроводности низкоразмерных компонентов композиционных материалов требуется дополнительное обоснование влияния размерных факторов.

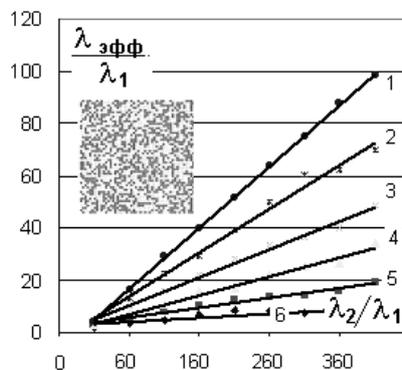


рис. 2 Относительные значения эффективного коэффициента теплопроводности $\lambda_{эфф} / \lambda_1$ бинарного композита при случайном распределении наполнителя: 1 - $\rho_2 = 0,55$, 2 - 0.50, 3 - 0.45, 4 - 0.40, 5 - 0.35, 6 - 0.3.

Решетка 50x50x50

Разработанная компьютерная программа обеспечивает моделирование трехмерной задачи теплопроводности и обеспечивает определение всех необходимых параметров для тепловых расчетов: температурное поле, локальные значения градиентов температур, эффективный коэффициент теплопроводности.

Список публикаций:

- [1]. Д. А. Никитин. Моделирование структуры композиционных систем и расчет их коэффициента теплопроводности / Д. А. Никитин // *Материалы, технологии, инструменты*. – 2004. – Т.9, № 2. – с. 11–15.
 [2]. Барановский В.М., Темникова С.В., Черенков А.В., Зеленева Т.П., Зеленев Ю.В. (2004), Прогнозирование теплофизических свойств полимерных композиционных материалов с учетом модельных представлений. *Пластические массы*, № 4, 13-18.

Первопринципная динамика галогенидов серебра

Седельников Александр Николаевич

Кемеровский государственный университет

Кравченко Наталья Георгиевна, к.ф.-м.н.

bigking@mail.ru

Материалы на основе галогенидов серебра по совокупности фотографических характеристик (чувствительности, разрешающей способности, контрастности, сохранности) не имеют себе равных среди других регистрирующих сред. Важное применение хлорид, бромид и иодид серебра находят при производстве светочувствительных материалов — фотографической бумаги и фотографической плёнки. Кроме того, как показал опыт последних десяти лет, высокочистые кристаллы на основе твердых растворов галогенидов серебра являются наиболее перспективными материалами для изготовления световодов, применяющихся в инфракрасной волоконной оптике.

Несмотря на большое количество работ, посвященных исследованию электронной структуры галогенидов серебра, остается актуальными исследование динамики решетки галогенидов, а так же нанокристаллических материалов на их основе. В данной работе рассматриваются динамика решетки идеальных кристаллов, что в дальнейшем позволит перейти к изучению более сложных объектов.

Первопринципный расчет динамики решетки производился с помощью свободно распространяемого программного обеспечения Quantum-ESPRESSO v4.0.2., собранного из исходного кода компилятором фирмы Intel Fortran 10.1. К программе дополнительно подключены свободно распространяемые библиотеки сторонних производителей (mkl-LAPACK, mkl-BLAS, mkl-FFTW фирмы Intel). Для расчетов использовался метод теории функционала плотности, с нелокальными псевдопотенциалами неэмпирического типа, в базисе плоских волн.

Для вычислений в QE использовались ультра-мягкие (ultrasoft) псевдопотенциалы, что позволило сократить число плоских волн, по сравнению с сохраняющими норму псевдопотенциалами. Благодаря этому существенно повысилась скорость расчета. С помощью программного обеспечения, входящего в Quantum-ESPRESSO, были сгенерированы ультра-мягкие скалярно-релятивистские псевдопотенциалы по схеме Rabe-Rappe-Kaxiras-Joannopoulos для серебра, хлора, брома и йода с электронной конфигурацией $4d^{10}5s^1$, $3s^23p^5$, $4s^24p^5$ и $5s^25p^5$ соответственно. Для всех кристаллов расчет проводился на сетке Monkhorst-Pack [1] $4 \times 4 \times 4$.

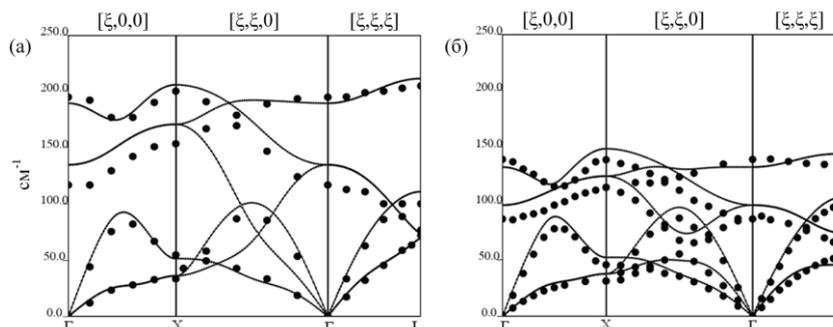


рис. 1. Фононный спектр (а) AgCl и (б) AgBr. Экспериментальные данные взяты из работ [2], [3] соответственно.

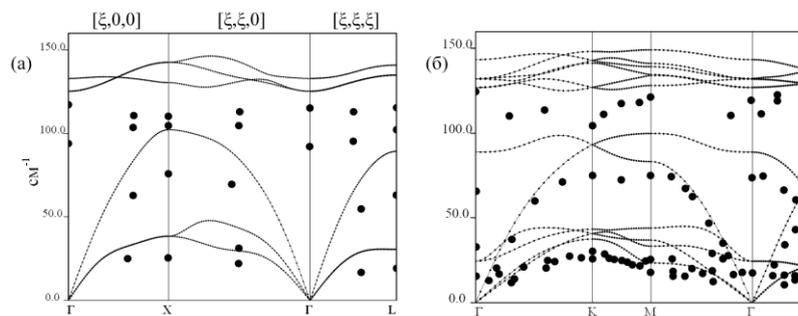


рис. 2. Фононный спектр (а) γ -AgI и (б) β -AgI. Экспериментальные данные взяты из работ [4], [5] соответственно

Вычисленные постоянные решеток составили для AgCl, AgBr, γ -AgI, β -AgI соответственно $a=5.404\text{\AA}$, $a=5.559\text{\AA}$, $a=6.1862\text{\AA}$, $a=4.3577\text{\AA}$ и $c=7.1816\text{\AA}$. Погрешность составляет в среднем 3% по сравнению с экспериментальными данными.

Фононный спектр для кристалла AgCl представлен на рис. 1а. Значения частот приведены в обратных сантиметрах. Точками отмечены экспериментальные данные [2]. Продольная (LO) и поперечная (TO) оптические ветви разделяются в точке Г. Выше лежащая продольная оптическая ветвь (LO) имеет минимум вдоль направления $[\xi 0 0]$, который также хорошо просматриваются в эксперименте [2]. Поперечная оптическая ветвь (TO) разделяется в точке X $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ (в векторах обратной решетки или $(0, 0, 2\pi/a)$ в декартовой системе координат) вдоль направления $[\xi \xi 0]$. В целом, согласие с экспериментом хорошее, однако видно некоторое завышение ветви TO по сравнению с экспериментальным спектром. Подобное завышение этой ветви характерно и для теоретических расчетов и в работе [6]. В точке L $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ каждой частоте соответствуют смещения только одного из двух атомов. Так, в случае акустических мод с большей частотой колеблются атомы более тяжелые атомы серебра (LA мода). В случае оптических мод большая энергия соответствует колебаниям более легкого хлора (TO мода). На рис.1б представлен фононный спектр для бромида серебра. Видно, что структура фононного спектра для бромида серебра топологически не отличается от AgCl, что связано с их одинаковой кристаллической структурой типа NaCl. Также, как и в случае хлорида серебра для AgBr заметно некоторое завышение TO ветви по сравнению с экспериментальной.

На рис.2 представлены фононные спектры для γ -AgI (T_d^2) и β -AgI (C_{6v}^4). В целом полученные фононные спектры топологически соответствуют экспериментально полученным, однако численные значения являются завышенными. Данное обстоятельство может быть связано с тем, что при генерации псевдопотенциала для йода не были учтены релятивистские эффекты.

Список публикаций:

- [1] H. J. Monkhorst and J. D. Pack//Physical Review B – 1976. – V.13 – P. 5188.
- [2] Vijayaraghavan P.R., Nicklow R.M., H.G. Smith, M.K. Wilkison. Lattice Dynamics of Silver Chloride//Physical Review B – 1970. – V.1 – P.4820-4823.
- [3] Fujii Y., Hoshino S., Sakuragi S., Kanzaki H. Neutron scattering study of the lattice dynamics of AgBr at 4.4K//Physical Review B – 1977. – V.15 P.361-364.
- [4] S. Hoshino, Y. Fujii, J. Harada, and J. D. Axe//J. Phys. Soc. Jpn.– 1976. – V. 41 – P. 965.
- [5] W. Buhner, R. M. Nicklow. Lattice dynamics of β -(silver iodide) by neutron scattering//Physical Review B – 1978. – V. 17 – P. 2320-2326.
- [6] Li Yan, Zhang Lijun, Cui Tian, Ma Yanming, Zou Guangtian. Phonon instabilities in rocksalt AgCl and AgBr under pressure studied within density functional theory//Physical Review B - 2006. – V.74 – P.12-13.

Исследование оптических свойств тонких пленок серебра

Седельникова Анна Евгеньевна

Головизина Евгения Игоревна, Терехова Анна Валерьевна, Швайко Ирина Львовна, Морозова Татьяна Владимировна,
Русаков Дмитрий Михайлович

Кемеровский государственный университет

Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.

dm.russakov@gmail.com

В настоящее время разработаны разнообразные методы получения наноразмерных кластеров и наночастиц разных металлов. Визуализация получаемых частиц осуществляется методами сканирующей и просвечивающей микроскопии. Успехи в этом направлении позволили сформировать новое направление в

нанотехнологии – наноплазмонике, которая изучает явления, связанные с колебаниями электронов проводимости в металлических наноструктурах и наночастицах, и взаимодействие этих колебаний со светом, атомами, молекулами с целью создания новых оптических устройств («умные» оптические среды и устройства на их основе: фильтры, волноводы и другие оптически активные элементы на порядок, превосходящие уже ставшие традиционными устройства), прототипы одноэлектронных устройств, материалы с новыми качествами.

Информация по эволюции оптических спектров металлических пленок, нанесенных на подложку методом термического испарения, с изменением их структуры, толщины, температуры и природы подложки и технологической среды, весьма ограничена. В связи с этим, в работе поставлена задача разработать методику и исследовать термически напыленные пленки Ag в зависимости от их толщины.

Тонкие слои Ag были приготовлены методом термического напыления на вакуумном poste ВУП-5. В качестве подложки использовались пластинки из кварцевого стекла марки КУ-2. Эффективная толщина напыленного слоя оценивалась по соотношению:

$$T = \frac{M \sin \theta}{\rho \pi R^2},$$

где T – толщина нанесенного слоя металла, M – масса образца металла, θ – угол напыления (в нашем случае угол $\theta = 90^\circ$), ρ – плотность металла ($\rho_{Ag} = 10.5 \text{ г/см}^3$), $\pi = 3.1415$, R – расстояние от лодочки с металлом до подложки. Расстояния R и масса M варьировались в интервале от 0.1 м до 0.17 м и от 0.1 мг до 1.5 мг, соответственно.

Давление в рабочем объеме ВУП-5 не превышало 10^{-4} Па. Измерение оптических спектров поглощения и пропускания нанесенных пленок Ag производилось в диапазоне от 190 нм до 1100 нм на спектрофотометре СФ-56.

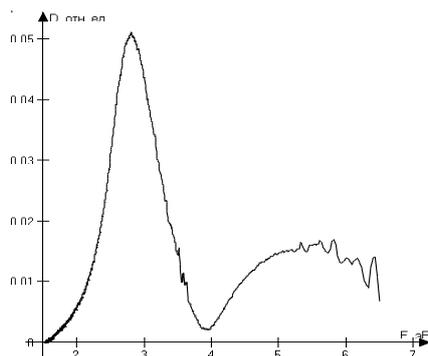


рис. 1 Изменение оптической плотности D от энергии квантов падающего света для образца Ag, $\lambda_{max} = 442 \text{ нм}$.

Анализ оптических спектров (рис. 1) проводился в рамках теории Ми в приближении плазмонного поглощения и модифицированной модели Хампе. Оценены концентрации электронов в наночастицах $N_e = 4.8 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, коэффициент затухания плазмонных колебаний $\gamma = 5.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-1}$, частотные зависимости диэлектрических констант, плазменная частота в зависимости от толщины нанесенного слоя, диэлектрическая постоянная окружающей диполь среды. Степень заполнения кластерами подложки сравнивается с данными электронной микроскопии.

Разработка интеллектуального пожарного газового извещателя на основе тонких пленок металлооксидных полупроводников

Сергейченко Надежда Владимировна

Анисимов Олег Викторович

ООО НПП «Сенсерия»

Максимова Надежда Кузьминична, к.ф.-м.н.

anisimov@senseria.ru

Актуальность обеспечения надежной пожарной безопасности, как на производстве, так и в быту не требует доказательств. По данным МЧС России в 2007 году оперативная обстановка с пожарами в Российской Федерации характеризовалась следующими цифрами: погибли 15924 человека, в том числе 597 детей; прямой

материальный ущерб составил 8551,2 млн. руб. [1]. Данная статистика, в основном, обусловлена неэффективностью используемых средств пожарной безопасности (на основе тепловых, дымовых и оптических пожарных извещателей).

Известно, что пожар, с точки зрения состояния газовой среды, имеет три основные стадии: возникновения, развития и тушения. На стадии возникновения пожара органических веществ и материалов образуются продукты пиролиза, разложения и т. д. Стадия развития пожара характеризуется образованием окислов, свободных радикалов, ионов и продуктов горения. На стадии ликвидации горения появляются химические соединения продуктов горения и огнетушащих веществ, продукты и соединения, образующиеся в результате реакции неполного сгорания. Таким образом, газовая среда защищаемого помещения изменяется до и во время пожара. Именно этот факт лег в основу разработки нового принципа обнаружения пожара – принципа динамического контроля газовой среды. Анализ применения этого принципа показал его исключительную конкурентную способность по сравнению с другими методами обнаружения пожара.

На базе имеющейся в ТГУ микрорезонансной технологии изготовления полупроводниковых газочувствительных элементов (на основе нанокристаллических тонких пленок металлооксидных полупроводников SnO_2 и WO_3) проводились исследования по разработке интеллектуального пожарного газового извещателя. Уникальностью данного вида пожарного извещателя является его принцип действия, который основан на детектировании совокупности молекул газа (CO , C_xH_y , и H_2 в соответствие с НПБ 71-98), выделяющихся на начальной стадии пожара (при тлении, горении различных материалов), когда еще нет процессов дымообразования и повышения температуры. Это обеспечивает высокую вероятность обнаружения и идентификации локальных мест возникновения пожара на самых ранних стадиях.

Для увеличения селективности используемый полупроводниковый газовый сенсор работает в режиме термоциклирования. Ранее было показано [2-3], что сенсор имеет различный профиль проводимости – время для газов CO , H_2 , C_xH_y , поэтому данные, полученные в различные фазы температурного цикла, могут служить для увеличения селективности сенсора, повышения достоверности определения пожара и оценки стадии пожара. Режим термоциклирования сенсора состоит из его нагрева со стабилизацией температуры на уровне $300\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 2 с и охлаждения до температуры $210\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 3 с. Проводимость сенсора измеряется через каждые 0,5 с, т. е. за температурный цикл получается набор данных из десяти значений, однозначно характеризующий газовый состав воздуха в данный момент времени.

Поскольку в тонкопленочных полупроводниковых сенсорах используется платиновый нагреватель, который имеет высокий температурный коэффициент сопротивления (ТКС), постоянный в широком диапазоне температур, то в разрабатываемом пожарном газовом извещателе дополнительно реализован канал измерения температуры окружающей среды. Это также способствует повышению достоверности срабатывания прибора, так как стадия развития пожара всегда сопровождается повышением окружающей температуры.

Проведенные эксперименты показали, что в результате анализа регистрируемых данных возможен непрерывный контроль газовой среды в помещениях производственного и бытового назначения. Таким образом, предлагаемый интеллектуальный пожарный газовый извещатель позволяет проводить мониторинг состояния защищаемого помещения, благодаря чему будет обеспечен качественно более высокий уровень противопожарной защиты объектов.

Список публикаций:

[1] <http://www.mchs.gov.ru/stats/detail.php?ID=7138>

[2] O.V. Anisimov, N.K. Maksimova, S.S. Schogol et al. Study sensing properties to CH_4 of $\text{Pt/SnO}_2\text{:Sb}$ thin films gas sensor in pulsing mode // IEEE Intern. Siberian Conf. on Control and Communications. Russia, Tomsk, October 21–22. – Tomsk, 2005. – P. 63–67.

[3] O.B. Anisimov, N.K. Maksimova, E.Yu. Sevast'yanov, E.B. Chernikov. Исследование отклика тонкопленочного сенсора на основе оксида олова в импульсном режиме для различных газов // Известия вузов. Физика. – 2006. – № 3. – С. 186–187.

Динамические механические напряжения в ионных кристаллах при воздействии импульсного электронного пучка

Степанов Сергей Александрович

Чинков Евгений Петрович

Томский политехнический университет

Штанько Виктор Федорович, д.ф.-м.н.

shtanko@tpu.ru

Специфика воздействия импульсного электронного пучка (ИЭП) заключается в высокой скорости ввода энергии и заряда одновременно, вследствие чего в облучаемом образце возникают динамические механические напряжения разной природы. Релаксация динамических напряжений проявляется в генерации

акустического излучения, возбуждении изгибных волн и пластической деформации [1-3]. Вторым по эффективности каналом диссипации энергии ИЭП является выделение энергии, запасаемой в электрическом поле инжектированного заряда. При низких плотностях тока ИЭП эта энергия выделяется в виде джоулевых потерь вследствие электропроводности. С ростом плотности тока резко неоднородное выделение энергии в диэлектриках и полупроводниках возможно при развитии многоканального электрического пробоя [4], что также является причиной возникновения динамических механических напряжений. Одним из высокоинформативных методов исследования диссипативных процессов при воздействии на диэлектрики и полупроводники мощных импульсных потоков ускоренных электронов является изучение параметров акустического излучения, сопровождающего это воздействие. Если длительность импульса облучения меньше времени акустической релаксации, то объем, в котором поглотилась энергия, не успевает расшириться, что приводит к формированию и распространению акустического импульса сжатия. Область сжатия, образующаяся в результате нагрева вещества, распространяется в положительном (направление падения электронов) и отрицательном направлениях. Импульс сжатия, распространяющийся в отрицательном направлении, отражается от границы раздела твердое тело-вакуум. Так как облучаемая поверхность свободна, то граничные условия определяются как равенство нулю суммы давлений, создаваемых падающим и отраженным импульсами [5]. Следовательно, при отражении импульс не меняет амплитуды и формы, а только меняет знак напряжений. Таким образом, в положительном направлении будет распространяться биполярный импульс сжатия-растяжения, а форма акустических импульсов (АИ) определяется профилем поглощенной энергии. При расчетах распределения термализованных электронов в образце и плотности поглощенной энергии в области торможения пучка применялся один из вариантов "укрупненных" соударений метода Монте-Карло с использованием углового распределения Мольера-Бете [6]. Ионизационные потери определялись по формуле Бете-Блоха, а средний потенциал ионизации - по формуле Штернхаймера [7]. В расчетах толщина образца выбрана равной максимальному пробегу электронов. В связи с тем, что тормозящее действие поля внутри образца значительно ниже тормозной способности вещества [8], эффект торможения электронов в поле объемного заряда учитывался лишь в геометрии с вакуумным зазором (ВЗ).

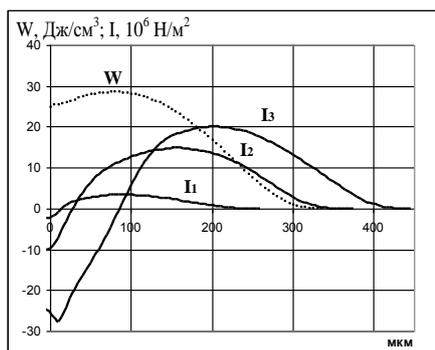


рис.1. Рассчитанные формы АИ в кристалле LiF через 6 нс (I_1), 12 нс (I_2), 24 нс (I_3) от начала импульса облучения в короткозамкнутой геометрии и профиль распределения поглощенной энергии (W) при плотности тока ИЭП 250 А/см^2 .

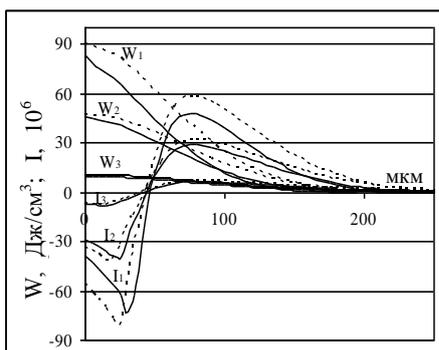


рис.2. Рассчитанные формы распределения плотности поглощенной энергии и АИ в кристалле KI на момент окончания воздействия ИЭП при величине вакуумного зазора 1000 мкм (—) и 250 мкм (.....); плотностях тока, А/см^2 : 1 – 500, 2 – 250, 3 – 50.

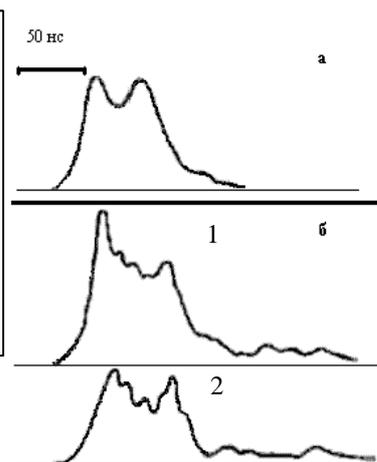


рис.3. Форма АИ в NaCl при различных плотностях энергии ИЭП: а – $0,07 \text{ Дж/см}^2$, б – $0,56 \text{ Дж/см}^2$ (1,2 – импульсы облучения).

Типичная динамика формирования АИ в КЗ геометрии облучения представлена на (рис.1) для LiF. Напряжения растяжения соответствуют отрицательным значениям $I_{\text{ли}}$. Из данных следует, что при длительности импульса тока ИЭП 24 нс форма АИ на момент окончания импульса возбуждения отличается от профиля энерговыведения. Со временем максимум импульса сжатия смещается вглубь кристалла. Между максимумом импульса сжатия и облучаемой поверхностью образуется область нулевых напряжений, которая со временем облучения смещается вглубь кристалла. Координаты области нулевых напряжений и максимумов импульсов сжатия и растяжения на момент окончания ИЭП, рассчитанные для ряда щелочногалоидных кристаллов (ЩГК), определяются тормозной способностью вещества и скоростью звука.

Из результатов расчета, представленных на (рис.2), следует, что при низких значениях тока пучка, порядка 50 А/см^2 , с увеличением ВЗ поглощенная энергия уменьшается не значительно (рис.2. W_3). При увеличении тока пучка выше 200 А/см^2 доля поглощенной энергии уменьшается, а также изменяется профиль распределения плотности поглощенной энергии. Это обусловлено, увеличением торможения электронов в поле

объемного заряда [8]. Увеличение амплитуды АИ с ростом плотности тока носит сублинейный характер (рис.2). Качественно подобные закономерности характерны и для ряда изученных ЦГК.

Для экспериментального изучения динамических механических напряжений, возбуждаемых ИЭП в ЦГК, использовался поляризационно-оптический метод [9]. В экспериментах реализована поперечная схема зондирования облучаемого образца. Для исключения поперечных градиентов напряжений свободная поверхность подвергалась облучению диафрагмированным пучком с сечением, соответствующим сечению образца. Регистрация АИ проводилась при зондировании лазерным излучением области, расположенной на расстоянии превышающим глубину пробега электронов с максимальной энергией. В этих условиях исключается вклад в регистрируемый АИ отраженных волн.

Представленные на (рис.3а) результаты свидетельствуют о том, что при низких плотностях возбуждения $W \leq 0.1$ Дж/см² в ЦГК формируется биполярный АИ. Амплитуда импульса сжатия несколько больше амплитуды импульса растяжения, а расстояние между максимумами импульсов сжатия и растяжения зависит от параметров кристалла (тормозной способности вещества, скорости звука), что соответствует результатам расчетов. При облучении серией импульсов с плотностью энергии больше 0.2 Дж/см² наблюдается появление тонкой структуры в форме АИ, заключающейся в возникновении дополнительных максимумов, наложенных на основной АИ и общее удлинение импульса (рис.3б). Обнаружено, что в первых импульсах облучения возникновение тонкой структуры не сопровождается возникновением трещин или других видов разрушений в области торможения электронов. При этом амплитуда импульса сжатия остается выше амплитуды импульса растяжения. При увеличении количества импульсов облучения в NaCl наблюдается (рис.3б кривая 2) резкое уменьшение амплитуды импульса сжатия АИ и появлением трещин параллельных облучаемой поверхности. Это свидетельствует о том, что нарушение сплошности образца произошло непосредственно во время облучения до времени формирования амплитуды импульса растяжения. Увеличение плотности энергии приводит к увеличению количества максимумов тонкой структуры и росту общей амплитуды АИ в первом импульсе облучения. Как правило, образование трещин в облучаемом объеме при плотности энергии $\approx 0,56$ Дж/см² происходит после нескольких импульсов облучения. Однако в некоторых образцах кристаллов NaCl их образование происходило при однократном облучении, о чем свидетельствует относительное уменьшение амплитуды импульса растяжения.

Отличие результатов теоретического анализа закономерностей формирования АИ от экспериментальных заключается в развитии при плотностях тока пучка выше пороговых тонкой структуры, являющейся следствием развития многоканального электрического пробоя. Таким образом, экспериментальное изучение формы АИ может быть использовано для установления радиационно-механической прочности материалов к воздействию импульсных электронных пучков.

Список публикаций:

- [1] R.M. White. *J.Appl. Phys.* 34, 2123 (1963).
- [2] F.C. Perry. *Appl. Phys. Lett.* 17, 408 (1970)
- [3] R.B. Oswald, J.F.V. McLean, Schallhorn D.R., Buxton L.D. *J.Appl. Phys.* 42, 3463 (1971)
- [4] В.И. Олешко, В.Ф. Штанько. *ФТТ.* 29, 320 (1987)
- [5] М.А. Исакович. *Общая акустика.* -Москва, Наука, 1973, С. 496.
- [6] А.Ф. Аккерман, Ю.М. Никитушев, В.А. Ботвин. *Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе.* Алма-Ата, Наука, 1972, С.163.
- [7] Sternheimer R.M. *Density effect for ionisation loss charged particles.* *Phys.Rev.*, 1966, v.145, No.1, p.247-250.
- [8] Штанько В.Ф., Толмачев В.М., Глыбин В.Г. *Распределение электрического поля в высокоомных материалах при воздействии импульсного электронного пучка. М.: Деп. в ВИНТИ, рег.№3452В95 от 26.12.95, 35 с.*
- [9] Фрохт М. *Фотоупругость.* М.-Л.: ОГИЗ. 1948 -Т.1. –С.432

Радиационные дефекты в кристаллах CaF₂ - CaO

Степанов Сергей Александрович

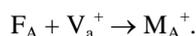
Чинков Евгений Петрович, Штанько Виктор Федорович

Томский политехнический университет

shtanko@tpu.ru

Кристаллы CaF₂ обладают высокой прозрачностью в широком спектральном диапазоне и являются перспективным конструкционным материалом для передачи мощных потоков УФ- и ВУФ-излучения от источников когерентного и некогерентного типа [1]. Наличие «биографической» примеси кислорода приводит к смещению границы прозрачности кристалла в видимую область спектра и появлению дополнительных полос поглощения в ВУФ-области спектра [2].

При низкотемпературном облучении в кристаллах CaF₂-CaO накапливаются возмущенные кислородом F центры (F_A центры), которые при нагреве кристаллов до комнатной температуры участвуют в образовании сложных электронных центров по следующей реакции:



Вопрос о радиационном либо дорадиационном происхождении анионных вакансий в кристаллах $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ остается открытым.

Целью работы является исследование спектральных и кинетических характеристик неустойчивого поглощения в кристаллах $\text{CaF}_2\text{-0,01M\%CaO}$ методом импульсной оптической спектроскопии с наносекундным разрешением. Кристаллы выращены методом Стокбаргера. Источник радиации – ускоритель электронов с параметрами: максимальная энергия 0,28 МэВ, длительность импульса 24 нс.

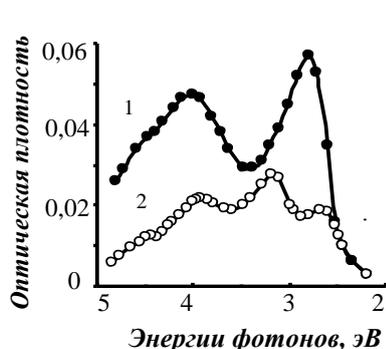


рис. 1. Спектры поглощения кристалла $\text{CaF}_2\text{-CaO}$, измеренные при 80 К спустя 10 нс (1) и 1 мс (2)

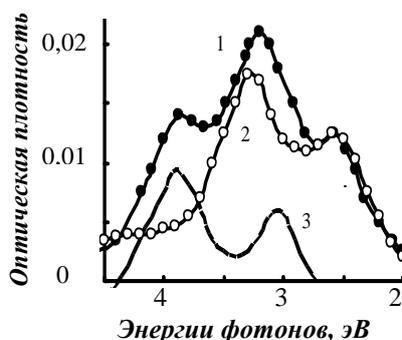


рис. 2. Спектры поглощения $\text{CaF}_2\text{-CaO}$, измеренные при 295 К спустя 4 мкс (1) и 1 с (2) после облучения. 3 – разность

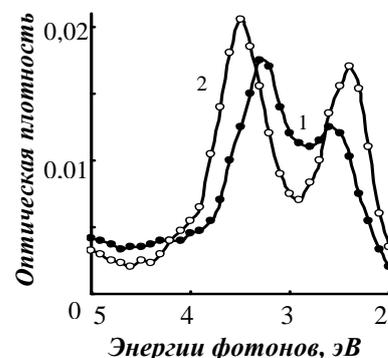


рис. 3. Спектры поглощения $\text{CaF}_2\text{-CaO}$, измеренные при 295 К спустя 1 с (1) и 6 с (2) после окончания облучения

Установлены следующие закономерности.

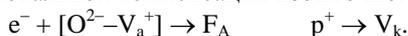
1. Релаксация неустойчивого поглощения в кристаллах $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ (рис. 1) при 80 К описывается экспоненциальной зависимостью с постоянной времени 40 мкс (при 295 К – около 1 мкс). Спектрально-кинетические характеристики неустойчивого поглощения близки к известным из литературы [3] параметрам автолокализованных экситонов в чистых CaF_2 .

Ко времени 1 мс в спектре кристалла $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ (рис. 1, кривая 2) остаются полосы поглощения электронных F_A (на 2,64 и ~3,2 эВ) и дырочных центров окраски [4,5]: V_k на 3,9 эВ и более сложных по структуре типа $(F_2^-)_{ii}$ на 4,6 эВ. Центры окраски при 80 К термически стабильны, но оптически неустойчивы. Полоса на 4,6 эВ наблюдается и при облучении чистых кристаллов CaF_2 . Дефекты, ответственные за данное поглощение, в легированных кристаллах образуются в ненарушенной решетке.

2. Ко времени 4 мкс в спектре $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ при 295 К (рис. 2, кривая 1) доминирует поглощение центров окраски. В интервале от 4 мкс до 1 с практически полностью исчезает поглощение V_k центров и центров, поглощающих на 3,1 эВ (рис. 2, кривая 3). Предполагено, что поглощение на 3,1 эВ обусловлено возмущенными (V_k) F центрами.

Тип и концентрация F_A центров остаются неизменными. В кристаллах $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ имеет место не только локальная (диполь [$O^{2-}-V_a^+$]), но и нелокальная компенсация избыточного заряда.

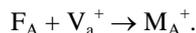
Образование F_A и V_k центров при локальной компенсации избыточного заряда происходит по реакциям:



Образование коррелированных F и V_k центров при нелокальной компенсации по реакциям:



Обратная перезарядка F- V_k пар приводит к появлению свободных анионных вакансий, которые участвуют в образовании электронных центров типа M_A^+ (рис. 3) по реакции:



Таким образом, анионные вакансии в кристалле $\text{CaF}_2\text{-CaO}$ являются дорадиационными дефектами.

Список публикаций:

- [1] Сергеев П.Б., Зворыкин В.Д. и др. *Оптический журнал*. 2005. Т.72. №6. С.85.
 [2] Архангельская В.А., Рейтеров В.М. и др. *ЖПС*. 1980. Т.32. №1. С.103.
 [3] Williams R.T., Kabler M.N. et. al. *Phys. Rev.* 1976. B14. №2. P.725.
 [4] Beaumont J. H., Hayes W. et. al. *Proc. Roy. Soc. Lond.* 1970. V.A315. №1520. P.69.
 [5] Rauch R., Schwotzer R. *Phys. Stat. Sol.* 1982. V.a74. №1. P.123.

Исследование фазового перехода на монокристалле $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$

Степанов Юрий Михайлович

Миколайчук Александр Николаевич, Аносов Евгений Александрович, Лощев Антон Александрович
Стерлитамакская государственная педагогическая академия

Биккулова Нурия Нагимьяновна, д.ф.-м.н.

bickulova@mail.ru

Переход из супернионного состояния в несупернионное был изучен на примере монокристалла состава $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$, который был выращен Горбуновым В.А. методом Бриджмена-Стокбаргера в форме цилиндра диаметром и длиной около 10 мм. Структурные нейтронографические исследования проводились на дифрактометре E2 реактора НМІ (г. Берлин) на монохроматическом излучении с германиевым монохроматором Ge311 при длине волны $\lambda=1,21\text{Å}$. Во время эксперимента кристалл был ориентирован так, что плоскость (110) совпадала с плоскостью эксперимента определяемой векторами волновых векторов падающих и рассеянных нейтронов.

Были получены лауэграммы монокристалла $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при температурах 300 К, 250 К, 200 К, 190 К, 180 К, 150 К (рис. 1) и при обратном нагреве – 200 К, 230 К, 300 К (рис. 2) Время экспозиции составляло 20 часов.

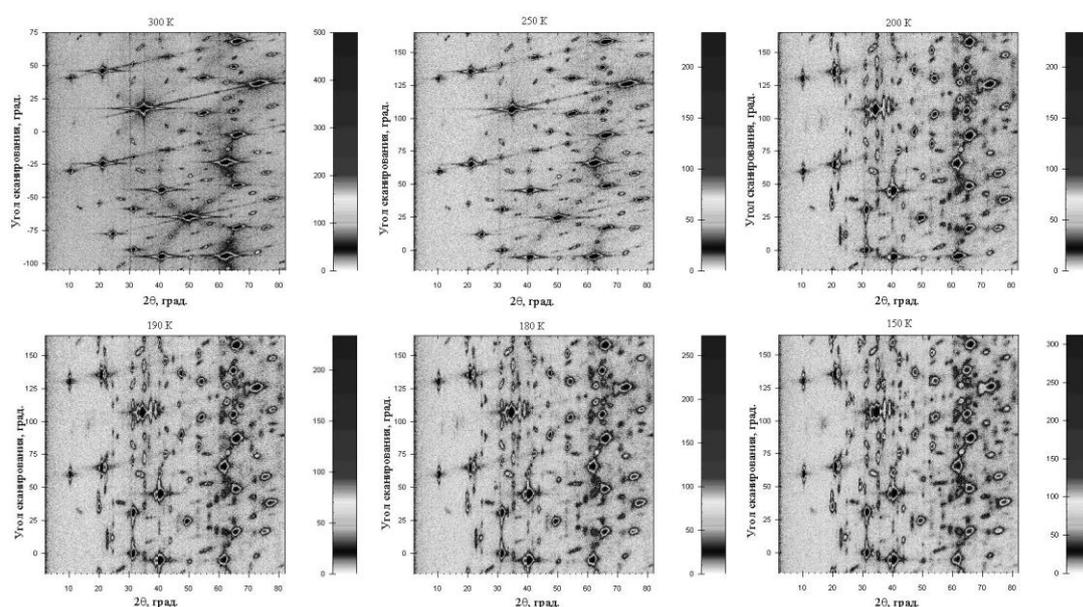


рис. 1 Лауэграмма состава $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при 300 К, 250 К, 200 К, 190 К, 180 К, 150 К

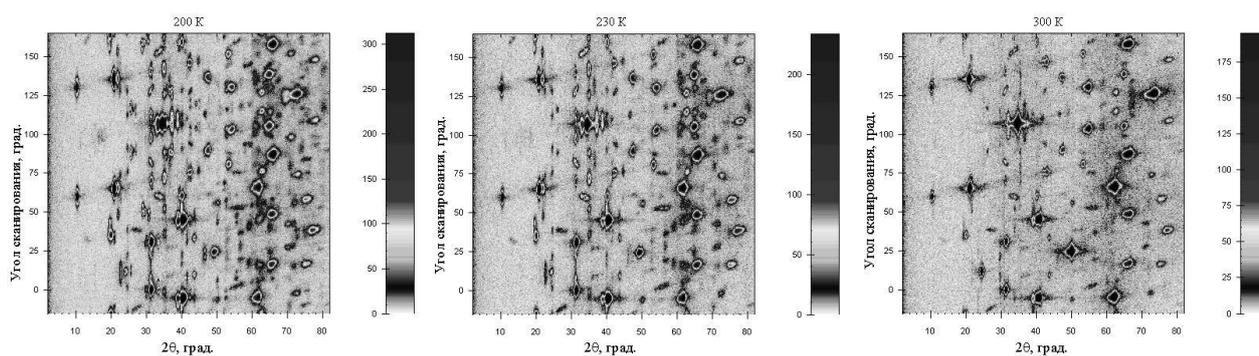


рис. 2 Лауэграмма состава $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при 200 К, 230 К, 300 К (обратный нагрев)

На лауэграммах при температуре 300 К наблюдаются рефлексы ГЦК структуры, сверхструктурные рефлексы и широкие полосы диффузного рассеяния вдоль направлений [111]. Понижение температуры приводит к расщеплению основных дифракционных максимумов ГЦК фазы. В интервале температур 180–250 К наблюдаются рефлексы и несупернионной, и супернионной фазы, что позволяет утверждать, что в этом температурном интервале существует смесь α - и β - фаз. Ниже температуры 180 К дифракционные максимумы, соответствующие кубической фазе, исчезают и появляются вновь при нагреве до 300 К. Переход из несупернионного состояния в супернионное является обратимым, но для восстановления «исходной фазы» требуется больше времени.

Наблюдаемые при 300 К диффузные полосы в ГЦК фазе исчезают при дальнейшем охлаждении и появляются вновь при обратном нагреве. Существование ярко выраженного диффузного гало в суперионной фазе связывается с разупорядочением подсистемы мобильных ионов меди.

Переход из суперионного состояния в несуперионное в селениде меди $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ сопровождается появлением дополнительных рефлексов на лауэграммах, что свидетельствует об образовании «зародышей» новой фазы. Сначала наблюдается образование «зародышей» α -фазы в области температур 180–250 К, с течением времени они полностью охватывают все «пространство» и при температуре 180 К переход в низкосимметричную фазу завершается. Уточнена температура фазового перехода в несуперионное состояние. Она составляет 180 К.

В дальнейшем с целью определения областей когерентного рассеяния суперионной и несуперионной фазы были проведены исследования рефлексов (221) α - и (400) β - фаз в интервале температур 300-150 К. С помощью программы Tv-tueb определены интегральные интенсивности и уширение дифракционных максимумов (400) и (221). Интегральная интенсивность рефлекса (221) растет при охлаждении и при приближении к температуре фазового перехода, а уширение – уменьшается. Для отражения от плоскости (400) кубической модификации при охлаждении наблюдается уменьшение интенсивности и увеличение уширения.

Таким образом, фазовый переход из суперионного в несуперионное состояние представляет собой размытый фазовый переход I рода, происходящий в интервале температур 250-180 К. В суперионной фазе обнаружено диффузное гало, связанное с разупорядочением катионной подсистемы.

Алфавит квазикристаллического паркета Пенроуза

Титов Павел Леонидович

Полянский Дмитрий Александрович, Михалюк Алексей Николаевич

Дальневосточный государственный университет

t-p-l@inbox.ru

С момента открытия квазикристаллов группой Шехтмана появилось большое количество работ, связанных с исследованиями квазикристаллических симметрий. Исследовались вопросы роста квазикристаллов, замощения пространств $R_{2,3}$ ограниченным числом плиток. Также проводились многочисленные экспериментальные исследования структур с квазикристаллической топологией. Например, изучались проводящие свойства таких систем и пр. Решалась задача перколяции по узлам и связям решетки. Был использован широкий арсенал методов, как теоретических, так и экспериментальных.

В работах [1-5] показано применение т.н. информодинамического метода исследования сложных систем с сеточной топологией. Данный подход базируется на отображении сеточных систем в древесные графы Кейли. Одним из характерных его приложений как раз и было исследование характеристик упорядочения квазикристаллических симметрий в древесно-графовом приближении.

Как дополнение упомянутого цикла работ, в данной заметке проводится статистический анализ паркета Пенроуза, который рассматривается как некоторый двумерный текст, подчиняющийся нетьюринговской логике.

Если рассматривать обычный текст (одномерный), и провести статистический анализ встречаемости букв, то при ранжировании полученного распределения образуется статистика гиперболического типа. Такая статистика носит название Ципфа-Парето-Мандельброта (ЦПМ), т.к. была независимо обнаружена в различных системах – экономических, лингвистических, социальных. Главной особенностью такого распределения является т.н. «затянутый» хвост, т.е. для ЦПМ-распределения не существует понятия среднего. Такие распределения описываются показателем степени γ , задающим скорость спадания. Реальные языковые системы характеризуются $\gamma \sim 1$. Если пойти дальше, то можно образовать множество двухбуквенных сочетаний, причем сочетания типа «ан» и «на» будут различными при заданном направлении чтения (важен порядок). Рассматривая 3-, 4-, n-буквенные сочетания, то мы выйдем на словарный, а затем и на фразеологический уровень. Образуется статистическая структура иерархического типа с ЦПМ-распределением на каждом уровне иерархии. Причем статистика низшего уровня иерархии наследуется статистиками более высоких уровней.

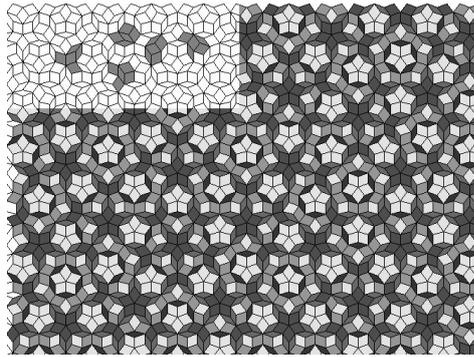


рис.1. Фрагмент паркета Пенроуза с окрашенными ромбами, относящимися к одной из пяти двухплиточных комбинаций. Вверху – все пять возможных двухплиточных конфигураций (всего их семьдесят при учете поворотов для всех фигур и учете отражений для несимметричных фигур).

Перейдем к паркету Пенроуза (рис.1). Сам способ его построения, основанный на «золотом» сечении (и ряде Фибоначчи), достаточно нетривиален. Процедура построения нерекурсивная, иногда требующая переопределения всего покрытия с самого начала для присоединения одной-единственной плитки. Структура покрытия такова, что в нем доля «толстых» ромбов – $\alpha \approx 0,618$, а «тонких» – $\alpha^2 \approx 0,382$. Таким образом, первый уровень «алфавита» Пенроуза насчитывает всего два элемента, находящихся в «золотой» пропорции. Дальнейший анализ двухплиточных сочетаний резко усложняется. Необходимо выделить все возможные двухплиточные соединения и набрать их статистику, для чего нужно провести анализ достаточно большого фрагмента паркета Пенроуза. В нашем случае фрагмент насчитывал более $6 \cdot 10^3$ плиток. Были образованы пять двухплиточных сочетаний (рис.1, сверху), которые могут быть ориентированы в десяти направлениях (следствие пентасимметрии паркета Пенроуза) и также зеркально отражены. Три на основе «толстого» ромба и два – на основе «тонкого». Предполагалась образование (чтение) двухплиточных фрагментов (слов) по ребрам. Т.о., каждое сочетание образует 5 плиток: 1 центральная и 4 присоединенных. Пройдя по всем плиткам и полагая их центральными, мы определяем, к какому сочетанию каждая из них относится и окрашиваем в определенный цвет (рис.1). Результаты подсчета конфигураций: на основе «толстого» ромба – 1784, 1112, 914; на основе «тонкого» ромба – 1798 и 545.

После численного анализа было установлено, что с высокой достоверностью эти числа представляют собой производные «золотой» пропорции от общего числа рассмотренных плиток (6153): $(2,5+1,5\alpha)^{-1}$, $\alpha/(2,5+1,5\alpha)$, $(5+3\alpha)^{-1}$, $(2,5+1,5\alpha)^{-1}$, $\alpha/(5+3\alpha)$. По количеству плиток эти значения эквивалентны: 1795, 1110, 898, 1795, 555.

Как видно из таблицы, на первом уровне «алфавит» Пенроуза распадается на 2 символа в «золотой» пропорции 1:0,618 (0,618:0,382), на втором уровне «толстый» ромб распадается на 3 конфигурации в отношении 1:0,618:0,5 (0,472:0,292:0,236), а «тонкий» – на 2 с отношением 1:0,309 (0,764:0,236):

Уровень алфавита	Пропорция разбиения (относительно исходной плоскости)					Число элементов разбиения
0	1 (плоскость)					1 (нет разбиения)
1	α (относительное число «толстых» ромбов)		α^2 (относительное число «тонких» ромбов)			2
2	$\alpha/(3/2+\alpha)$	$\alpha^2/(3/2+\alpha)$	$\alpha/(3+2\alpha)$	$\alpha^2/(1+\alpha/2)$	$\alpha^3/(2+\alpha)$	5

Такой статистический анализ позволяет установить структуру планарного «языка» Пенроуза, по крайней мере, до второго уровня алфавита. Также стоит обратить внимание на то, что числа разбиения оказываются подчинены ряду Фибоначчи: 1,1,2,3,5,8, ...

Сказанное позволяет утверждать, что принцип «золотизны», помимо геометрии самих ромбов, проявляется следующим образом в мозаике Пенроуза:

- 1) Алфавит мозаики разбивается либо строго в «золотом» отношении, либо на его основе;
- 2) Количество элементов более высокого уровня, образующихся из элементов низшего уровня, подчиняется ряду Фибоначчи;
- 3) Суммарное количество элементов разбиения на каждом уровне алфавита представляет собой «прореженный» ряд Фибоначчи.

Таким образом, паркет Пенроуза можно считать своеобразным «языком», имеющим иерархическую алфавитную структуру на основе ряда Фибоначчи и «золотого» сечения, а также обладающим нетьюринговской логикой параллельного типа.

Список публикаций:

- [1] Юдин В.В., Титов П.Л., Старцев Е.С., Щеголева С.А., Полянский Д.А. // X Всероссийская НТК «Нейроинформатика-2008». Москва, 2008. Сб. науч.тр. ч.2. С. 50-59.
- [2] Титов П.Л. // Сб. тез. 14-й Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, Уфа, 2008.
- [3] Юдин В.В., Титов П.Л., Михалюк А.Н. // Материалы 9-й Международной конференции «Распознавание образов и анализ изображений: новые информационные технологии», Нижний Новгород, 2008., т.2, с.327-330.
- [4] Юдин В.В., Титов П.Л., Михалюк А.Н. // Сб. материалов XVIII Петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов, Санкт-Петербург, 2008., ч.2, с.156-158.
- [5] Юдин В.В., Титов П.Л., Михалюк А.Н. // Сб. тезисов 5-й Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов», Черногоровка, 2008., с.148.

Внутреннее трение в оценке корреляции процессов деградации и деструкции углеродистых сплавов

Трегубов Кирилл Александрович

Тульский государственный университет

Чуканов Александр Николаевич, д.т.н.

kiril430341@rambler.ru

К основным деструктивным видам внешних воздействий при эксплуатации деталей машин и элементам конструкций относят силовое и коррозионное воздействия. Именно они определяют развитие деградации и последующего разрушения (деструкции) материала на различных масштабных уровнях.

В работе методами статистического анализа (регрессионного и корреляционного) определяли наличие и тесноту связи между развитием процессов деградации и деструкции. В работе рассмотрен типичный случай возникновения деградации свойств углеродистых сплавов входе предварительной деформации и коррозионного воздействия водородсодержащей среды, а также процессы, ведущие к развитию деградации и переходу в предельное состояние. Под деградацией (концептуальной деградацией) понимали – изменение концентрации основного твердого раствора вследствие диффузии, дислокационно-примесного взаимодействия, а также изменение состава и морфологии фазовых включений. Под деструкцией (деструктивной деградацией) понимали – образование субмикро-, микро- и макроскопических несплошностей [1,2]. Именно эти процессы контролируют создание и перераспределение полей микронапряжений, достаточных для возникновения и развития макроразрушения в кристалле. Параметры этих процессов во многом определяют вероятность последующего разрушения.

Одним из наиболее информативных и физически обоснованных методов наблюдения за указанными процессами является метод внутреннего трения (ВТ). Особенно эффективным может быть комплексный анализ параметров нескольких неупругих эффектов, наблюдаемых в спектре ВТ [3].

В данной работе статистическому анализу подвергали термоактивационные параметры (ТАП) комплекса неупругих эффектов, сопровождающих развитие деградации и деструкции. Получили обобщенные регрессионные модели, связывающие ТАП диффузии и молекулярной диффузии водорода в коллекторах с развитием коррозионных субмикротрещин вблизи концентраторов напряжений. Выявили наличие тесной корреляции между ТАП указанных процессов

Список публикаций:

- [1] Матвеев В. И. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 5(11). С. 1023.
- [2] Есеев М. К., Матвеев В. И // Физический вестник Поморского университета. Архангельск: Изд-во Поморского ун-та. 2006. № 4. С.35.

Соединение углеродных нанотрубок с помощью топологических дефектов и фуллеренов

Усова Мария Викторовна

Али-Паши Виталий Альбертович, Андреева Анна Алексеевна

Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Каркасные углеродные наноструктуры фуллерены и нанотрубки сформированы из фрагментов графеновых слоев, в которые добавлены топологические дефекты – т.е. часть гексагонов, образующих графеновый слой, заменена на пентагоны. Углеродные нанотрубки обладают уникальными свойствами – могут изменять проводимость от металлической до полупроводниковой в зависимости от диаметра и хиральности. Поэтому соединения углеродных нанотрубок с различным типом проводимости могут быть использованы в нанoeлектронных устройствах. В данной работе была исследована структура соединений углеродных нанотрубок при помощи топологических дефектов и фуллеренов.

Расчет структуры соединений был выполнен при помощи методов молекулярной механики. В результате расчета структуры соединений многослойных углеродных нанотрубок при помощи топологических дефектов 5-7 было установлено, что возможны соединения многослойных нанотрубок, если отдельные нанотрубки в каждой и соединяемых многослойных нанотрубок имеет одинаковую хиральность, так как в этом случае углы образующихся локтевых сгибов внешней и внутренней трубок совпадают (рис.1.а). Всего возможно пять разновидностей многослойных УНТ из трубок одинаковой хиральности: зигзаг ($k=0$), кресло ($k=1$), хиральные ($k=0.4, 0.6, 0.8$), где $k=m/n$ коэффициент хиральности (n,m) УНТ. Поэтому возможные соединения многослойных нанотрубок – это всевозможные комбинации соединений УНТ пяти типов. Таких соединений всего 15. Из этих комбинаций соединения металлических многослойных нанотрубок с полупроводниковыми получаются только в двух случаях: когда хиральность одной из многослойных нанотрубок креслообразная, а второй зигзагообразная или когда хиральности обеих многослойных нанотрубок зигзагообразные.

В результате расчета структуры углеродных наноторов на основе соединений однослойных углеродных нанотрубок при помощи топологических дефектов 5-7 установлено, что количество граней в наноторах определяется углом “локтевого сгиба” в парных соединениях углеродных нанотрубок. Для топологического дефекта 5-7 диапазон углов сгиба варьируется от 144° до 180° . Поэтому минимальное число граней в наноторе на основе такого дефекта равно 10. Если же соединения формируются на основе дефекта 4-8, то диапазон углов в этом случае от 112° до 180° и минимальное число граней тора составляет 6. На рис.1.б приведено изображение нанотора на основе дефекта 5-7, состоящего из фрагментов различных нанотрубок. Однако, как установлено в данной работе возможно также образование наноторов, состоящих из фрагментов одних и тех же углеродных нанотрубок (в случае дефекта 5-7 такие наноторы можно получить из любых хиральных нанотрубок).

В результате расчета структуры соединений однослойных углеродных нанотрубок при помощи фуллеренов C_{20} и C_{60} установлено, что возможны соединения фуллеренов и графитовых листов двух типов: во-первых, в результате перехода части углеродных атомов из состояния sp^2 гибридизации в sp^3 состояние (рис.1. в), во-вторых, при помощи только sp^2 гибридизованных атомов. Важной особенностью соединений нанотрубок при помощи фуллеренов является то, что таким способом можно соединить любые нанотрубки и что, в отличие от соединений при помощи топологических дефектов, угол между осями нанотрубок одной и той же соединенной пары можно изменять в широком диапазоне.

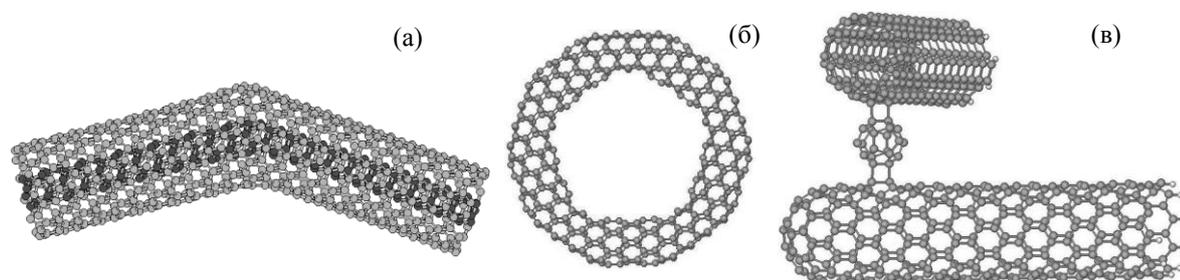


рис.1. Примеры различных соединений углеродных нанотрубок: (а) соединение двух многослойных УНТ (4,0)-(13,0) и (2,2)-(7,7) с помощью топологического дефекта 5-7; (б) нанотор на основе соединений углеродных нанотрубок (2,2) и (6,0) при помощи топологических дефектов 5-7; (в) соединение металлической (5,5) и полупроводниковой (10,0) углеродных нанотрубок при помощи фуллерена C_{20} .

Фононные спектры кристалла бромида серебра и его подрешёток

Уфимцев Максим Константинович

Кириенко Татьяна Петровна

Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.

ufimcevmk@rambler.ru

Кристалл бромида серебра имеет структуру хлорида натрия. Данный кристалл относится к кубической сингонии; тип решетки C_f ; группа симметрии O_h^5 (Fm3m) [1]. Бромид серебра применяется в фотоэмульсиях, его растворы используют в нефтедобыче и создании антипиренов, также широко применяется в органическом синтезе. Этот кристалл относится к суперионным проводникам [2].

Периоды прямой решетки: $a_1 = (0 \ \tau \ \tau)$, $a_2 = (\tau \ 0 \ \tau)$, $a_3 = (\tau \ \tau \ 0)$; обратной: $b_1 = \frac{\pi}{\tau}(-1 \ 1 \ 1)$, $b_2 = \frac{\pi}{\tau}(1 \ -1 \ 1)$, $b_3 = \frac{\pi}{\tau}(1 \ 1 \ -1)$, где $\tau = \frac{a}{2}$; $a = 5,78 \text{ \AA}$ [1].

Для координационной сферы первого порядка, взаимодействие Ag-Br (12), расстояние между атомами $d = 0,5a$ положение центрального атома относительно шести атомов окружения, в единицах «а» имеет вид:

$\mathbf{h} = \left(\pm \frac{1}{2} \ 0 \ 0 \right)_c$, матрица силовых констант: $\Phi_{12}^h = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}_c$. Для второго порядка, взаимодействие Ag-Ag (11)

и Br-Br (22) учитывается с двенадцатью соседями, при $d = \frac{a\sqrt{2}}{2} \approx 0,7a$: $\mathbf{h} = \left(\pm \frac{1}{2} \ \pm \frac{1}{2} \ 0 \right)_c$, $\Phi_{11}^h = \begin{pmatrix} \chi & \theta & 0 \\ \theta & \chi & 0 \\ 0 & 0 & \psi \end{pmatrix}_c$,

$\Phi_{22}^h = \begin{pmatrix} \chi' & \theta' & 0 \\ \theta' & \chi' & 0 \\ 0 & 0 & \psi' \end{pmatrix}_c$ [3].

В данной работе получены фононные спектры для модели жёстких ионов [4]. Динамическая матрица строится из двух частей: матрицы короткодействия (метод Борна-Кармана) и матрицы кулоновских сил (метод Эвальда) [5].

В точке $\Gamma(000)$ динамическая матрица имеет аналитическое решение:

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 &= \frac{(M_{Ag} + M_{Br})}{M_{Ag} M_{Br}} \left((\lambda + 2\gamma) - \frac{32\pi Z^2 e^2}{3a^3} \right), \\ \omega_{TO}^2 &= \frac{(M_{Ag} + M_{Br})}{M_{Ag} M_{Br}} \left((\lambda + 2\gamma) + \frac{16\pi Z^2 e^2}{3a^3} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

Частоты ω_{LO} и ω_{TO} известны из эксперимента и равны 132 см^{-1} и 140 см^{-1} соответственно [6]. Из решения (1) в точке Γ можно найти эффективный заряд Z .

Из значений упругих постоянных C_{11}, C_{12}, C_{44} [2] были выбраны значения констант, входящих в динамическую матрицу короткодействия. $\lambda = -7,6$; $\gamma = -4,1$; $\chi = -0,3$; $\psi = -0,15$; $\theta = -0,1$; $\chi' = -0,2$; $\psi' = -0,2$; $\theta' = -0,1$.

Для этих параметров получены спектры кристалла показанные на (рис.1). Анализ векторов поляризации показывает, что оптические ветви фононного спектра в основном отвечают колебаниям подрешётки ионов брома, в то время как акустические более тяжелым ионам серебра.

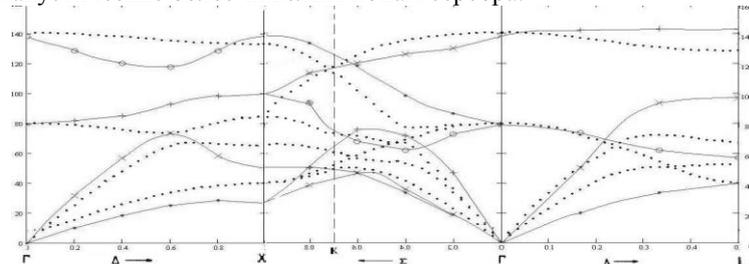


рис. 1. Фононный спектр AgBr: Сплошные линии – данные нейтронного рассеяния [3], пунктирные линии - рассчитанный спектр

Список публикаций:

- [1] Пенкаля Т. // *Очерки кристаллохимии. Польша, 1974.* – с. 95.
[2] Cain L.S, Gang H. // *Phys. Rev. B, 2001.* – V. 64. – № 5. – P. 104104-1 – 104104-5
[3] Лейбфрид Г. // *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристалла, Москва, 1963.* – с. 99-107.
[4] Поплавной А.С. // *Теория твердого тела, 1977.* - Часть 1, - с. 22-44.
[5] Bruesh P. // *Phonons: Theory and Experiments, Berlin, 1982.* - p. 109-115.
[6] Fischer K., Bilz H. Haberkorn R. // *Phy. Stat. Sol, 1972.* – V. 54. - №25. – p. 285-294.

Электронная и магнитная структура низкоразмерной системы со спиновой щелью CuTe_2O_5

Ушаков Алексей Вячеславович

Стрельцов Сергей Владимирович

Уральский государственный технический университет

Стрельцов Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

alexushv@mail.ru

Изучение электронных и магнитных свойств магнетиков малой размерности является значительной и быстро развивающейся областью физики конденсированного состояния. Одно из основных направлений – исследование состояний систем со спиновой щелью.

Вопрос о природе появления спиновой щели в CuTe_2O_5 был поставлен при анализе исследования этого соединения методом электронного парамагнитного резонанса (ESR) [1]. Для того, чтобы понять, каким образом магнитная структура соответствует кристаллической структуре CuTe_2O_5 , авторы [1], используя метод сильной связи, провели оценку возможных обменных интегралов и получили, что сильнейшим является обмен между шестью ближайшими соседними ионами Cu^{2+} (J_6). Для проверки результатов [1] был проведен первопринципный расчет электронной структуры в рамках приближения локальной электронной плотности (LDA) [2]. Вычисляя интегралы перескока, авторы [2] также оценили величины парциальных обменов. Самым сильным оказалось обменное взаимодействие между четвертыми ближайшими соседями Cu^{2+} (J_4). Обе модели, предложенные в [1] и [2] для описания магнитных свойств CuTe_2O_5 , достаточно точно повторяют экспериментальные данные для магнитной восприимчивости благодаря большому числу обменных констант.

В данной работе представлены прямые расчеты обменных констант в рамках приближения LSDA+U и показано, что сильнейшим является обменное взаимодействие между четвертыми ближайшими ионами меди (J_4). Соединение CuTe_2O_5 имеет двумерную магнитную систему, состоящую из выделенных магнитных димерных структур. При расчете учитывались сильные кулоновские корреляции на ионах Cu^{2+} . Электронная структура кристалла, полученная в этой работе, может напрямую сопоставляться с результатами спектроскопических исследований данного соединения.

Соединение CuTe_2O_5 имеет моноклинную симметрию группы P21/c и состоит из изолированных пар магнитных ионов Cu^{2+} [3], образующих димерные структуры. Каждый ион меди окружен шестью ионами кислорода, которые образуют октаэдры CuO_6 . Димеры выстраиваются в цепочки параллельно кристаллографической оси c . Между димерами располагаются ионы Te.

В данной работе проводился первопринципный расчет в рамках приближения LSDA+U в пакете TBLMTO (методом линеаризованных маффин-тин орбиталей) [4], в котором использовался обменно-корреляционный потенциал Барта-Хедина [5]. Значения параметра кулоновского отталкивания (U) и обменного параметра Хунда (J_H) были выбраны равными $U=8$ эВ и $J_H=1$ эВ. Обменные константы были рассчитаны для гамильтониана Гейзенберга:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j, \quad (1)$$

где суммирование проходит дважды по каждой паре i, j . Для расчета J_{ij} использовался формализм обменных параметров Лихтенштейна (LEIP) [6]. В приближении LSDA+U CuTe_2O_5 является изолятором с размером щели 2.74 эВ. Плотность электронных состояний приведена на *рис. 1*:

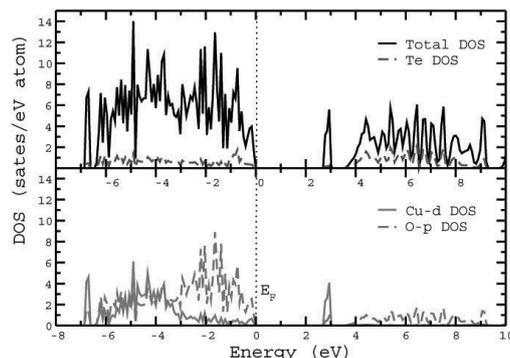


рис.1 Плотность электронных состояний CuTe_2O_5 , полученная в приближении $\text{LSDA}+U$.

Зону проводимости формируют гибридные $\text{O-}2p$ и $\text{Te-}d$ состояния. Благодаря гибридизации этих орбиталей осуществляется обменное взаимодействие между ионами меди через O и Te.

Валентная зона в основном определяется $3d$ -уровнями меди. Анализ зонной структуры показывает, что ближе всего к уровню Ферми находятся x^2-y^2 орбитали. Удлинение октаэдров CuO_6 вдоль оси z приводит к расщеплению e_g -оболочки под действием кристаллического поля, когда энергия x^2-y^2 орбитали увеличивается, а сильное кулоновское отталкивание стабилизирует дырку на данной орбитали.

В нашем расчете была использована антиферромагнитная конфигурация ионов Cu^{2+} . С помощью векторов трансляции $a' = a - c$, $b' = -(b + c)$, $c' = b - (a + c)$ была получена сверхячейка, содержащая 12 магнитных ионов Cu^{2+} и позволяющая напрямую вычислить обменные интегралы J_1 , J_4 и J_6 . Магнитный момент на ионах меди оказался равным $0.79 \mu_B$. Параметры обменного взаимодействия Лихтенштейна: $J_1 = 0.43 \text{ мЭВ} = 5 \text{ К}$, $J_6 = 1.67 \text{ мЭВ} = 19 \text{ К}$, $J_4 = 5.52 \text{ мЭВ} = 64 \text{ К}$. Полученные результаты хорошо согласуются с данными статьи [2] и опровергают оценку обменных интегралов экспериментальной работы [1].

Используя полученные константы, можно вычислить абсолютное значение температуры Кюри-Вейсса в приближении среднего поля:

$$\theta = \rho_s \sum_k J_k z_k, \quad (2)$$

где ρ_s – весовая функция (при $S=1/2$ $\rho_s=1/2$), z_k – число обменных констант J_k для данного иона Cu^{2+} . Результат $\theta = 107/2 \text{ К} = 53.5 \text{ К}$ хорошо согласуется с экспериментальной температурой Кюри-Вейсса $\theta = 41 \text{ К}$ [1].

Таким образом, в данной работе были напрямую рассчитаны параметры обменного взаимодействия для соединения CuTe_2O_5 . Было установлено, что магнитная структура кристалла не соответствует кристаллической структуре и хорошо описывается моделью Гейзенберга, предложенной в работе [2] на основе вычисления параметров перескока.

Список публикаций:

- [1] Deizenhofer J., Eremina R., Gavrilova T.P., Krug von Nidda N.-A., Pimenov A., Loidl A., 2008 Phys. Rev. **74** 174421
- [2] Das H., Saha-Dasgupta T., Gros C., Valentí R., 2008 Phys. Rev. **77** 224437
- [3] Hanke K., Kupchik V., Lindqvist O., 1973 Struct. Crystallogr. Cryst. Chem. **29** 963
- [4] Andersen O.K., Jepsen O., 1984 Phys. Rev. Lett. **53** 2571
- [5] Von Barth U., Hedin L., 1972 J. Phys. **5** 1629
- [6] Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I., 2000 Phys. Rev. B **61** 8906

Исследование фотопроводимости оксидных плёнок Nb_2O_5 , полученных методом анодного окисления

Фёдоров Александр Анатольевич

Петрозаводский государственный университет

Малиненко Владимир Пантелеймонович, к.ф.-м.н.

xepon3@onego.ru

Плёночные оксиды переходных металлов, таких как ниобий, вольфрам, находят широкое применение в микроэлектронике, в частности как материал с высокой диэлектрической проницаемостью, электрохромный и материал с фазовым переходом металл-диэлектрик. В зависимости от технологии получения возможно различное распределение энергетических состояний в запрещенной зоне, а также изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от катион-анионного состояния. Целью работы являлось изучение широкозонного оксида ниобия методом фотоэлектрической спектроскопии.

В работе использовался монохроматор с диапазоном выделяемых длин волн: от 200 до 800 нм. Исследовались образцы Nb_2O_5 , полученные методом анодного окисления ниобиевой пластины в слабом растворе H_3PO_4 , с последующим напылением в вакууме серебра в виде параллельных полос, для получения систем $Nb-Nb_2O_5-Ag$ в планарной и сандвич конфигурации. Регистрация фототока осуществлялась при помощи электрометрического усилителя с пределом измерения до 10-14 А. В качестве источника излучения применялась галогенная лампа мощностью 650 Вт.

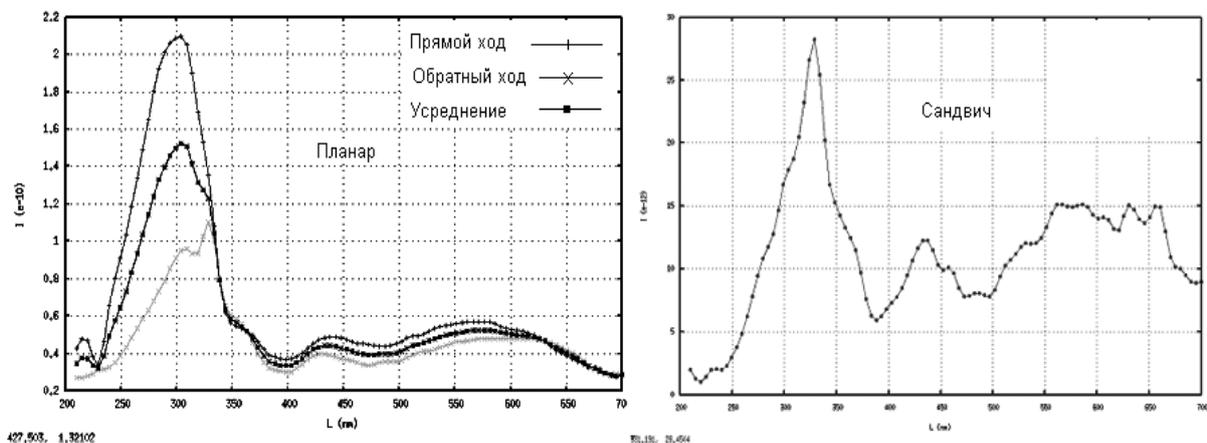


рис. 1 Фотоспектр Nb_2O_5

На рис.1 приведены спектры тонкой аморфной плёночной структуры Nb_2O_5 для планарного и сандвич варианта, прямой ход соответствует увеличению длин волн от УФ. Характерным для планарной структуры является наличие одного главного максимума $\lambda_{max}=310$ нм, и двух слабо заметных максимумов $\lambda=430$ нм и $\lambda=570$ нм. Положение главного максимума соответствует межзонному переходу с энергией $E_g=4,0$ эВ. При обратном ходе у главного максимума имеется два пика $\lambda_{max1}=310$ нм и $\lambda_{max2}=330$ нм, что наблюдается и в других работах [1]. При возбуждении от малых длин волн к большим происходит интенсивное накопление объёмного заряда, в то время как при обратном ходе этот процесс значительно слабее. Наличие максимума $\lambda=430$ нм связано с избытком атомов кислорода нестехиометричного Nb_2O_5 и образованием примесных уровней в запрещённой зоне. Максимум $\lambda=570$ нм видимо, связан с наличием различных примесей внедренных из электролита.

Измерение фототока в сандвичевой системе привело к изменению картины спектра фототока, главной особенностью которой является значительное увеличение вклада примесных состояний в результирующий ток. Фототок, соответствующий главному максимуму лишь в два раза выше примесного, что связано с меньшей глубиной проникновения излучения.

В результате проделанной работы определена ширина запрещённой зоны анодного оксида ниобия равная 4,0 эВ и обнаружены особенности спектра, связанные с накоплением и перераспределением объёмного заряда при фотовозбуждении. В сандвич структуре выявляется роль примесных состояний аморфной структуры оксида ниобия.

Список публикаций:

[1] Костров Д. В. Анодные окисные плёнки. Автореферат. Л. 1979.

[2] Бьюб Р. Фотопроводимость твёрдых тел. М., 1962.

Импульсная электронно-пучковая модификация поверхности электровзрывного легирования углеродистой стали

Филимонов Семён Юрьевич

Тересов Антон Дмитриевич, Колубаева Юлия Александровна

Институт сильноточной электроники СО РАН

Иванов Юрий Федорович, д.ф.-м.н.

ZMAN3@ya.ru

Цель работы – анализ эволюции структуры и механических свойств поверхностного слоя стали Ст45, подвергнутой электровзрывному легированию (ЭВЛ) алюминием и последующей электронно-пучковой обработке.

Методика подготовки материала исследования. В качестве материала подложки использовали сталь марки Ст.45 (Fe-0,45 вес % С) с феррито-перлитной структурой. ЭВЛ осуществляли путем электрического взрыва алюминиевых фольг толщиной 20 мкм. Условия для осуществления импульсного жидкофазного легирования задавали величиной зарядного напряжения накопителя энергии ускорителя, диаметра канала сопла и расстояния от его среза до образца, которые составили соответственно 2,3 кВ, 20 и 20 мм. При оптимальном ЭВЛ время обработки 100 мкс, поглощаемая плотность мощности на оси струи 4,5 ГВт/м², давление в ударно-сжатом слое вблизи поверхности – 11,2 МПа; толщина зоны легирования в ее центральной области ~25 мкм [1]. Импульсную электронно-пучковую обработку поверхности электровзрывного легирования осуществляли на установке «Solo» (ИСЭ СО РАН) [2] при следующих параметрах пучка: плотность энергии пучка электронов 20 Дж/см²; длительность импульсов воздействия пучка 50 мкс; частота следования импульсов 0,3 с⁻¹; количество импульсов воздействия 2...200; обработку осуществляли в среде аргона при давлении 10⁻² Па.

Методы исследования. Исследование структуры поверхности и поперечного сечения образцов в исходном состоянии и после обработки осуществляли методами оптической и сканирующей электронной микроскопии; распределение алюминия по толщине образца анализировали с помощью микроанализатора EDAX ECON IV (анализируемые элементы: начиная от фтора, предел обнаружения: 0,2% вес. (зависит от набора анализируемых элементов), предельная точность определения концентрации: ~5%, пространственное разрешение микроанализа: 1,0 x 1,0 x 3,0-5,0 мкм), установленном на сканирующем электронном микроскопе Philips SEM 515. Механические свойства образцов характеризовали величиной микротвердости.

Результаты исследования и их обсуждение. Продукты электрического взрыва проводника содержат как плазменный компонент, так и конденсированные частицы различной дисперсности. В связи с этим, наряду с легированием электровзрывная обработка приводит к формированию на обрабатываемой поверхности высокодефектного покрытия. Последующее облучение образца электронным пучком субмиллисекундной длительности в режиме многоимпульсного воздействия приводит к плавлению поверхностного слоя и жидкофазному перемешиванию элементов покрытия и подложки. При оптимальном режиме работы электронного источника наблюдается формирование гладкой поверхности с минимальным количеством микрократеров и микротрещин [3].

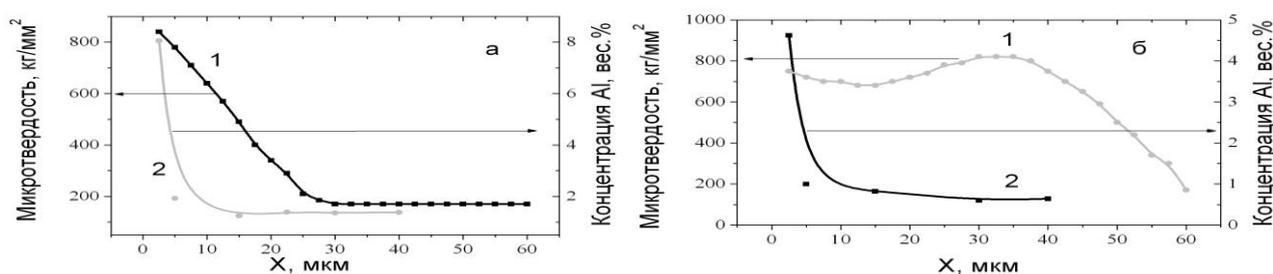


рис. 1. Профили микротвердости (кривая 1) и концентрации алюминия (кривая 2) в поверхностном слое стали Ст.45, подвергнутой электровзрывному легированию (а) и последующей электронно-пучковой обработке (20 Дж/см²; 50 мкс; 0,3 Гц; 10 имп.) (б).

ЭВЛ стали алюминием сопровождается увеличением твердости поверхностного слоя образца в ~4 раза (рис. 1, а, кривая 1). По мере удаления от поверхности обработки микротвердость снижается и на глубине 20...25 мкм выходит на значения микротвердости исходного состояния. ЭВЛ сопровождается насыщением поверхностного слоя стали алюминием: на глубине ~3...5 мкм концентрация алюминия достигает ~8 % (рис. 1, а, кривая 2). Удаление от поверхности обработки сопровождается резким снижением концентрации алюминия в стали. Последующая электронно-пучковая обработка поверхности стали при оптимальных условиях воздействия (20 Дж/см²; 50 мкс; 0,3 Гц; 10 имп.) сопровождается незначительным снижением микротвердости поверхностного слоя (рис. 1, б, кривая 1) по сравнению с микротвердостью поверхностного слоя стали после ЭВЛ. Одновременно с этим, электронно-пучковая обработка приводит к существенному увеличению протяженности упрочненного слоя – толщина слоя, микротвердость которого превышает микротвердость исходной стали в ~3,8 раза, достигает 40...45 мкм. Электронно-пучковая обработка сопровождается снижением концентрации алюминия в слое стали. В поверхностном слое концентрация алюминия составляет ~4,5 вес.% и быстро снижается по мере удаления от поверхности воздействия.

Заключение. Выполнены исследования структуры, элементного состава и механических свойств поверхностного слоя стали Ст45, подвергнутой электровзрывному легированию и последующей электронно-пучковой обработке. Показано, что ЭВЛ приводит к легированию стали алюминием и формированию высокодефектной поверхности, микротвердость которой существенно (в ~4 раза) превышает микротвердость сердцевины образца. Толщина слоя с повышенным значением микротвердости достигает ~20 мкм.

Последующая электронно-пучковая обработка в оптимальном режиме облучения сопровождается существенным увеличением толщина упрочненного слоя (до 40...45 мкм) при незначительном снижении величины его микротвердости. Очевидно, что столь существенное увеличение твердости поверхностного слоя обусловлено изменением фазового состава и дефектной структуры стали. Решение данной проблемы планируется осуществлять методами электронной дифракционной микроскопии тонких фольг, приготовленных из объема образца, расположенного на различном расстоянии от поверхности обработки.

Список публикаций:

- [1] Багаутдинов А.А., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е. Физические основы электровзрывного легирования металлов и сплавов. – Новокузнецк: Изд-во СибГИУ, 2007. – 301 с.
 [2] Коваль Н.Н., Иванов Ю.Ф. Наноструктурирование поверхности металлокерамических и керамических материалов при импульсной электронно-пучковой обработке // Известия ВУЗов. Физика. - 2008. - №5. - С. 60-70.
 [3] Ivanov Yu.F., Tetesov A.D., Filimonov S.Yu., Koval N.N., Budovskih E.A., Vostretsova A.N., Gromov V.E. Electroexplosive and Electron Beam Combined Treatment of AISI 1045 Steel // Proc. 9th Intern. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. – Tomsk. – 2008. – P.204-207.

Подрешетки совпадающих узлов в решетках кубической сингонии

Филиппов Роман Игоревич

Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович

ont.rif@gmail.com

Решетки совпадающих узлов (PCY) [1,2,3] вводятся при исследовании поликристаллов и границ перехода из одной кристаллической структуры в другую. Было показано, что существует периодическая структура, которая является общей для двух граничащих структур. Она также обладает тем свойством, что переходит через границу без разрывов и искажений. Данную структуру можно задать как подмножество из множества всех узлов в кристаллической решетке и далее будем называть ее подрешеткой. Симметрия подрешетки может отличаться от симметрии основной решетки. Возникает вопрос о возможности существования подрешеток определенного сорта в кристаллах с заданной пространственной симметрией.

Пусть $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ - репер решетки и $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ - репер подрешетки. Два данных репера связаны через матрицу с целочисленными коэффициентами:

$$\begin{pmatrix} \vec{A} \\ \vec{B} \\ \vec{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{31} \\ n_{21} & n_{22} & n_{32} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Пусть (g, h, k, l, m, n) - параметры Зеллинга [4] решетки, которые определяются как:

$$\vec{d} = -(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}); \quad g = (\vec{b}, \vec{c}), \quad h = (\vec{a}, \vec{c}), \quad k = (\vec{b}, \vec{a}), \quad l = (\vec{a}, \vec{d}), \quad m = (\vec{b}, \vec{d}), \quad n = (\vec{c}, \vec{d}) \quad (2)$$

Аналогичным образом вычисляются метрические параметры подрешетки (G, H, K, L, M, N) . Выразим параметры Зеллинга решетки, при помощи (1), через метрические параметры подрешетки. При вычислении скалярных произведений возникнут квадраты $\vec{a}^2, \vec{b}^2, \vec{c}^2$, которые можно легко преобразовать в линейную комбинацию параметров Зеллинга. Для этого нужно воспользоваться первым из уравнений в (2). В результате получим систему уравнений вида:

$$\begin{cases} G = k_{11}g + k_{12}h + k_{13}k + k_{14}l + k_{15}m + k_{16}n \\ H = k_{21}g + k_{22}h + k_{23}k + k_{24}l + k_{25}m + k_{26}n \\ \dots \end{cases} \quad (3)$$

где k_{ij} - различные парные произведения $n_{ii}n_{jj}$. Добавим к системе (3) условия, налагаемые на параметры сортом для решетки и подрешетки. Для этого введем некоторые переменные X_i :

$$\begin{cases} G = H: & X_2 = (k_{11} - k_{21})g + (k_{12} - k_{22})h + \dots + (k_{16} - k_{26})n = 0 \\ g = h: & X_1 = g - h = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Условия вида $g = 0$ и $G = 0$ в качестве уравнений в систему не вносятся. Общая система уравнений (3) и (4) имеет множество решений относительно (g, h, k, l, m, n) . Добавим к (3) и (4) условие минимизации функции $f = g + h + k + m + n + l$, в результате получаем задачу линейного программирования с условиями на переменные $(g, h, k, l, m, n, G, H, K, L, M, N, X_1, X_2, \dots)$. Численное решение для определенных значений n_{ij} дает ответ на вопрос о возможности совмещения подрешетки и решетки определенных сортов. В работе диапазон для n_{ij} был ограничен значениями $-3 \leq n_{ij} \leq 3$, что соответствует не сильно большому отношению объема элементарной ячейки подрешетки к объему элементарной ячейки кристалла.

Численное решение на компьютере показало, что не при всех значения n_{ij} возможно совмещение решетки и подрешетки. Также было выяснено, что некоторые множества n_{ij} дают одинаковое взаимное расположение решетки и подрешетки.

Ниже, в качестве примера, приведены ячейки Дирихле-Вороного для интересных результатов нестандартного пространственного размещения решетки и подрешетки кубической сингонии.

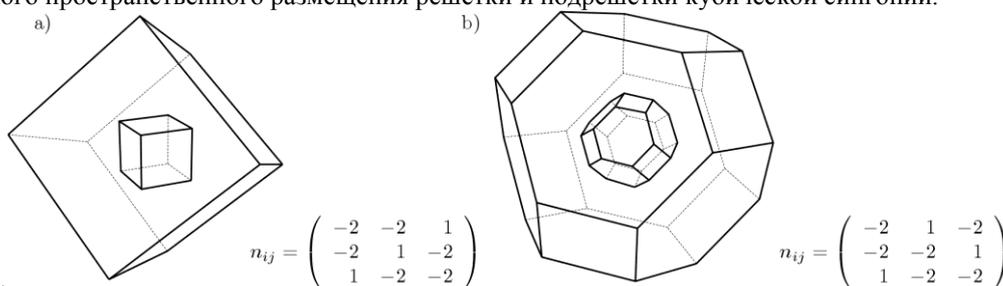


рис 1. а) простые кубические решетка и подрешетка,
 б) о.ц.к подрешетка и решетка

Список публикаций:

[1] Y. Iwasaki, *General Theory of Coincidence-Site Lattices, Reduced 0-Lattices and Complete Pattern-Shift Lattices in Arbitrary Crystals* // *Acta Cryst.* 1976. A 32, 59
 [2] H. Grimmer, *Coincidence-Site Lattices* // *Acta Cryst.* 1976. A 32, 783
 [3] Yi Ming Zou, *Structures of coincidence symmetry groups*// *Acta Cryst.* 2006. A 62, 109-114
 [4] Делоне Б. Н., Галушин Р. В., Штогрин М. И. *Теория Браве и ее обобщение на n-мерные решетки.*

Вычисление плотности состояний реальных кристаллов с помощью обобщенного метода моментов

Филиппов Семён Игоревич

Гордиенко Алексей Болеславович

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович

filippov_sem@kemsu.ru

Одним из наиболее популярных подходов для интегрирования по зоне Бриллюэна в расчетах электронной структуры с базисом плоских волн, является метод Метфесселя-Пакстона [1], основанный на полиномах Эрмита. Он позволяет обобщить простейшую схему «гауссоваго размывания» уровней энергии и значительно повысить ее точность. Однако, существенным недостатком [1] является численная неустойчивость для высоких порядков полиномиальной аппроксимации δ -функций и значительное влияние эффекта Гиббса, приводящего к отрицательным значениям плотности состояний на краях зон. Целью настоящей работы было исключение указанных недостатков и сохранение всех преимуществ [1] с помощью метода моментов [2], основанного на полиномах Чебышева, отличающихся высокой численной устойчивостью рекуррентных соотношений, и рассмотрении аппроксимации функций как интегрального преобразования с положительно определенным ядром. Основной идеей является разложение функции $\varphi(x)$, определенной на интервале $[-1, 1]$, по системе полиномов Чебышева:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \sum_{v=0}^{\infty} (2 - \delta_{v,0}) \mu_v T_v(x). \quad (1)$$

Для плотности состояний $N(E)$ интервала энергий, приведенного к $[-1,1]$, выражение преобразуется следующим образом:

$$N(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-E^2}} \sum_{v=0}^M (2 - \delta_{v,0}) g_v^M \mu_v T_v(E), \quad (2)$$

Здесь T_v – полиномы Чебышева первого рода, μ_v – моменты, которые определены в [3] как интегралы по зоне Бриллюэна и вычисляются методом специальных точек, M – число моментов, g_v – специальные демпфирующие коэффициенты. Модифицированный вариант [3], в отличие от оригинальной схемы [1], не требует явного задания ширины «размывания» уровней, которая связана только с максимальным порядком полиномов и соответствующих моментов. В практических расчетах это делает более удобной настройку точности вычислений с помощью вариации числа моментов M и плотности \mathbf{k} -сетки в обратном пространстве.

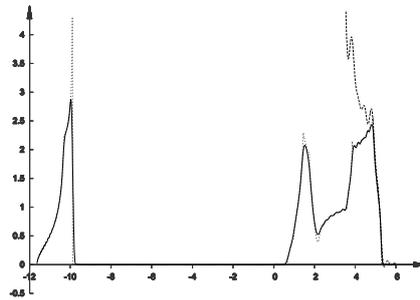


рис.1. Плотность состояний MgO, вычисленная методами: тетраэдров (тонкий пунктир), [1] с $n = 40$ (толстый пунктир), [3] с $M = 300$ (сплошная линия).

В работе модифицированный метод реализован как расширение программы для расчета электронной структуры Quantum ESPRESSO и выполнены расчеты плотности состояний для нескольких кристаллических решеток. На рис. 1 приведена аппроксимация электронной плотности состояний валентной зоны MgO, вычисленная на плотной \mathbf{k} -сетке $(32 \times 32 \times 32)$ и с большим числом моментов. При малых порядках полиномов Чебышева зависимость получается излишне сглаженной, а при малом количестве специальных точек, наоборот, разрешаются отдельные спектральные линии (рис. 2).

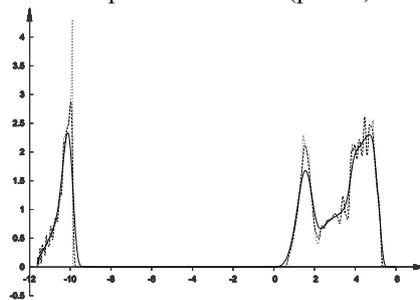


рис.2. Аппроксимации методом [3] на \mathbf{k} -сетке $16 \times 16 \times 16$ с $M = 100$ (сплошная линия), $M = 300$ (толстая пунктирная линия).

Тем не менее, при любых значениях этих параметров искомая функция остается, в отличие от [1], положительно определенной. Также модифицированный метод позволяет, благодаря хорошей численной устойчивости полиномов Чебышева, достичь аппроксимаций любой точности, тогда как при использовании полиномов Эрмита в [1] это невозможно. На рис. 1 показано поведение метода [1] при повышении порядка полиномов для получения более точных результатов – при некотором критическом значении происходит «срыв» в особых точках аппроксимируемой функции. Отдельно стоит отметить, что предлагаемый метод позволяет использовать небольшое число моментов ($\square 100$) для вычисления интегралов по зоне Бриллюэна с достаточной точностью при малых временных затратах.

Список публикаций:

- [1] M. Methfessel, A. T. Paxton. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals // *Phys. Rev. B*, 40, 6, 3616 (1989)
- [2] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, H. Fehske. The kernel polynomial method // *Rev. Mod. Phys.*, 78, 275 (2006)
- [3] А. Б. Гордиенко, С. И. Филиппов. Модифицированный метод Метфесселя-Пакстона // *Известия вузов. Физика* (в печати)

Изменение пластичности алюминия при воздействии электрическим потенциалом

Филипьев Роман Анатольевич

Коновалов Сергей Валерьевич, Столбоушкина Оксана Андреевна, Загуляев Дмитрий Валерьевич
Сибирский государственный индустриальный университет

Громов Виктор Евгеньевич, д.ф.-м.н.

Filipiev_ra@physics.sibsiu.ru

Управление пластичностью металлов и сплавов, широко используемых в технике, - важная научная и практическая задача. Пластичность определяется действием многих факторов. С одной стороны, пластичность зависит от структуры и температурно-скоростных условий деформации, т.е. является структурно-чувствительным свойством твердого тела, а с другой - зависит от схемы напряженного состояния и механики течения. Между этими факторами есть определенная связь, поскольку в обоих случаях пластическое течение осуществляется в результате действия определенных механизмов деформации.

Одна из главных задач физического материаловедения – установление связи между структурой и пластическими свойствами, а также изучение механизма управления пластической деформацией поликристаллов различными воздействиями. В связи с этим разработка принципов регулирования пластичностью металлов и сплавов с помощью различных внешних энергетических воздействий представляет большой интерес.

Хорошо известно, что изменение электрического потенциала поверхности контролирует многие практически важные процессы: коррозию в газовых и жидких средах, фреттингкоррозию, коррозию под напряжением, износ и выносимость в агрессивных средах и пр. Влияние электрических потенциалов на пластическое течение металлических систем изучено в значительно меньшей степени. Важно подчеркнуть, что в отличие от электроимпульсной обработки, это воздействие не является высокоэнергетическим, изменение потенциала редко превышало 1 В, а влияние было весьма существенным.

Поскольку механические свойства материалов чувствительны к состоянию тонких приповерхностных слоев, можно ожидать, что изменение плотности поверхностной энергии, вызванное электрическим потенциалом, может существенно сказаться на такой характеристике металла, как его микротвердость. Ранее подобный эффект наблюдался различными научными группами при измерениях микротвердости металлов (Тl, Pb, Zn, Te) в растворах электролитов (NaCl, KBr, Na₂SO₄, Na₂CO₃).

В данной работе выполнены исследования по установлению влияния электрического потенциала на пластичность поликристаллического алюминия. Подведение электрического потенциала к алюминиевому образцу обеспечивалось медным проводом сечением 0,1 мм от источника постоянного напряжения. Его величина менялась как по величине, так и по знаку в различных сериях экспериментов. Потенциал постепенно наращивался от 0 до 5 В (по модулю).

Полученная зависимость параметра пластичности от потенциала, так же как и при подобных испытаниях, выполненных нашей научной группой, на ползучесть, симметрична относительно оси ординат. Установлено, что более эффективны малые значения потенциала, так как уже при $\varphi > 1$ В скорость изменения параметра пластичности существенно замедляется.

При отключении от образца электрического потенциала параметр пластичности релаксирует во времени до исходных значений этой величины. Это показывает, что вариации пластичности металлов в указанных условиях связаны с более долгоживущими изменениями состояния поверхностного слоя, определяемыми, например, химическими взаимодействиями в поверхностном электролите и инициированными событиями в двойном электрическом слое на поверхности.

Наблюдаемое изменение пластичности, по-видимому, обусловлено, прежде всего, тем, что подключение электрического потенциала к исследуемому материалу, изменяет поверхностную энергию металла и, тем самым способствуют зарождению пластических сдвигов и развитию разнообразных дефектов.

Установленные в настоящей работе эффекты непосредственно указывают на существование связи между электронной структурой и механическими свойствами металлов и указывают на возможность ее наблюдения с помощью простых экспериментальных методов. Ранее одно из проявлений такой связи, например, наблюдалось при измерении характеристик макролокализации пластического течения, вызванном изменением числа электронов, приходящихся на элементарную ячейку металла. В то же время ясно, что природа таких эффектов весьма сложна и нуждается в тщательном изучении. Очевидно, что его учет необходим, например, при объяснении движения дислокаций в металлах при действии электрического поля.

Исследование энергетических перестроек в металлах при жестком сдвиге

Харина Евгения Геннадьевна

Ракитин Роман Юрьевич

Кузбасская государственная педагогическая академия
Алтайский государственный технический университет

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.

jane-ohara@yandex.ru

Низкие значения энергии определяют стабильные состояния упаковки атомов в кристаллах. Изучение таких состояний позволяет влиять на свойства металлических систем, проводить сравнение чистых кристаллов с дефектными. Исследование энергетической структуры и перестроек атомов в кристаллах возможно при построении γ -поверхностей. Анализ границ зерен (далее ГЗ) в модели решетки совпадающих узлов в данной работе проводится методом построения энергетической γ -поверхности. Энергетическая γ -поверхность представляет собой зависимость энергии плоского дефекта от вектора сдвига одной части кристалла относительно другой в заданном направлении. Впервые этот метод был применен Витеком [1] и использовался в дальнейшем во многих работах для исследования стабильности антифазных границ и дефектов упаковки [2, 3]. Как правило, прямой эксперимент не позволяет достичь нужной точности в измерении энергетических характеристик, поэтому подобные задачи решаются методами компьютерного моделирования.

В данной работе задача исследования энергетической структуры проводилась методом молекулярной динамики. Эксперимент проводился для металлических систем (Ni, Cu, Al) с использованием парного потенциала Морзе [4]. Расчетный блок представлял собой кристалл размером 60 на 52 на 49 Å с общим количеством атомов от 19200 до 22400.

Эксперимент состоял из серии расчетов (более 100 точек на одну поверхность), в каждом из которых производился сдвиг идеального кристалла вдоль исследуемых плоскостей. Сдвиг задавался посередине кристалла с координатами вектора сдвига (x, y). После этого кристалл состоял из двух кристаллитов – А и В. Общий сдвиг одной части кристалла относительно другой достигал нескольких межатомных расстояний и представлял собой совокупность из 289 элементарных сдвигов с шагом в 0,5 Å. Расчетный блок обрезался так, чтобы он не содержал по краям пустот и приобрел форму параллелепипеда, после чего на блок накладывались жесткие граничные условия. «Плоскость сдвига» соответствовала исследуемой плоскости (100), в которой в дальнейшем и производился сдвиг.

В ходе эксперимента проводилось построение γ -поверхности в жесткой модели. При относительном сдвиге кристаллита атомы оставались в узлах соответствующей решетки. На втором этапе использовалась динамическая трехмерная релаксация, при которой каждый атом смещался, вследствие чего общая энергия кристалла понижалась.

Используя данную методику, были построены γ -поверхности и их проекции на плоскость сдвига. На (рис. 1) представлены энергетические поверхности для направления [100]. Как видно из (рис. 1а), в модели жестких сфер атомы в идеальном кристалле занимают положения, характеризующиеся низким значением энергии, и соответствующие узлам идеальной кристаллической решетки. Область, характеризующая стабильное состояние, оказывается сильно локализованной и составляет порядка 0,5 Å. Энергия нестабильных состояний оказывается более 1.5эВ и характеризуется размером менее 0,3 Å. Области стабильных и не стабильных состояний имеют симметричный вид.

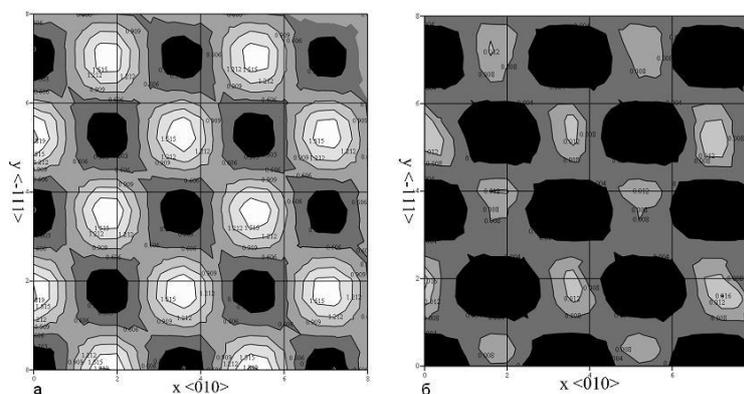


рис. 1 Проекция γ -поверхностей на плоскость (100) в модели жестких сфер (а) и динамической модели (б).

Более светлые участки соответствуют более высокой энергии

Из (рис. 1б) видно, что при динамической релаксации энергия кристалла в целом понижается при аналогичных смещениях (максимальное значение не превышает 1эВ). Области минимальной энергии расширяются и имеют несимметричный вид. Это можно объяснить вероятностным движением атомов при релаксации. В общем, картина распределения энергии сглаживается и имеет менее выраженные максимумы.

Для определения стабильных состояний при сдвиге вдоль симметричных границ зерен, проводились эксперименты на бикристалле Ni с углом разориентации кристаллитов 7° . Аналогичные исследования для больших углов разориентации приведены в [5] и там же более подробно описана методика расчета. Сдвиг проводился вдоль плоскости границы зерен. Проекция γ -поверхности на плоскость (111) приведена на (рис. 2). Видны области минимальной энергии (темные участки), отвечающие наиболее стабильным состояниям. Анализ (рис. 1а-2) позволяет сделать предположить, что жесткий сдвиг уменьшает энергию кристалла, что может повлиять на свойства кристаллов, а также наиболее выгодно сдвигать границы зерен вдоль зернограничных дислокаций (образующихся на границах зерен при разориентировке) в малоугловых границах, а при повышении угла скольжения сдвиг выгоден в любом направлении.

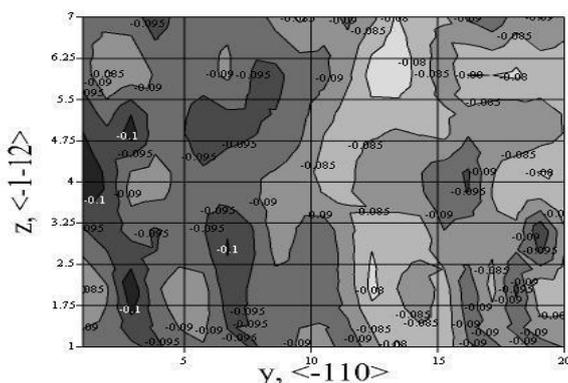


рис. 2 Проекция γ -поверхности на плоскость (111) в бикристалле Ni

Список публикаций:

- [1] Vitek V. *Phil. Mag. A.* 147 (1968) 18.
- [2] Vitek V. *Scripta Met.* 9 (1975).
- [3] Yamaguchi M., Vitek V., Pope D.P. *Phil. Mag. A.* 43 (1981) 4.
- [4] Girifalco L.A., Weiser V.G. *Phys. Rev.* 114 (1959) 3.
- [5] Старостенков М.Д., Харина Е.Г. *Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации», Новосибирск, 95-97 (2008)*

Процессы порообразования в конденсированных наносистемах

Хоменко Любовь Григорьевна

Технический центр НАН Украины

Куницкий Ю.А., к.ф.-м.н.

ljudv.dzjuba@rambler.ru

Развитие наносистем и нанотехнологий неразрывно связано с физикой конденсированного состояния, пленочным материаловедением, поиском и реализацией новых возможностей пленочных технологий, в частности, создания конденсатов различной степени дисперсности, в том числе многослойных модулированных кристаллических, аморфных и нанокристаллических структур. В этой связи актуализируется задача анализа и обобщения результатов исследований процессов формирования различных по генезису конденсированных структур, а также процессов конденсационного порообразования в твердых пленках и покрытиях. Многообразные по форме, видам, размерам и характеру распределения поры оказывают значительное влияние на физико-механические, физико-химические, капиллярно-транспирационные, тепло- и электрофизические, магнитные, оптические и другие свойства конденсатов, во многом определяя функциональное их применение в современной технике [1-5].

Широкий арсенал существующих методов получения пленок и покрытий – различные способы конденсации в «открытом» (динамическом) вакууме (тигельные, электроннолучевые, автотигельные, лазерные,

ионно-плазменные), сочетание конденсации из молекулярного потока с конденсацией в объеме и другими способами, конденсация в замкнутом объеме, с участием химических реакций (газотранспорт), молекулярная эпитаксия, невакуумные (газопламенные, детонационные, электрохимические, пиролиз) и другие способы [3-8] позволяют получать конденсаты с разным спектром характеристик пористости.

Рассмотрим закономерности и особенности этих процессов в конденсатах, получаемых различными методами. Учет этих закономерностей необходим не только для программирования параметров пористости структур, но и для прогнозирования их стабильности при эксплуатации в условиях многофакторных внешних воздействий. Основное внимание уделено оригинальным исследованиям конденсационной пористости методами рентгеновского малоуглового рассеяния (РМР), световой, электронной и рентгеновской теневой микроскопии, прецизионного измерения гидростатической плотности, тепловой десорбции аргона, ртутной порометрии, рентгеновской абсорбции, заполнения пор жидкостью и др.

Изучение напряженного состояния и определение субструктурных характеристик конденсатов производили методами рентгеновской тензометрии и рентгеноструктурного анализа. Малоугловые рентгеновские съемки проведены на усовершенствованной дифрактометрической установке КРМ-1 с повышенным разрешением, а также на сверхвысоковакуумном малоугловом рентгеновском дифрактометре, применяемом для «in situ»-исследований образцов, подвергаемых многофакторным внешним воздействиям в условиях безмасляной откачки и масс-спектрометрического контроля состава атмосферы остаточных газов. Наряду с дифрактометрией индикатрис РМР, регистрируемых сцинтилляционным и позиционно-чувствительным детекторами при различной азимутальной и полярной ориентации образцов относительно первичного рентгеновского пучка, для выявления наличия характера преимущественной ориентировки рассеивающих нанопор производили также фоторегистрацию картины РМР.

Результаты рассмотренных закономерностей и особенности этих процессов в конденсатах, получаемых различными методами, говорят о том что:

- аморфные пленочные системы, конденсированные в вакууме, отличаются достаточно высокой интенсивностью рентгеновского малоуглового рассеяния (РМР), что свидетельствует о наличии в них значительного количества нано- и микронеоднородностей электронной плотности конденсационного происхождения. Для установления природы этих неоднородностей был проведен цикл исследований по сравнению аморфных и кристаллических пленок различных материалов.
- при исследовании структуры осажденных слоев различных веществ оказалось, что величина реальной поверхности слоев может намного превышать площадь их геометрической поверхности, вследствие чего поверхностная энергия конденсата может быть далекой от минимума. Так, в сплошных тонких поликристаллических пленках Fe, Ni, Co, Cu, Pd, Pt, Ru, W, Ta, Mo, препарированных при $T_{\text{п}} \approx 0,3T_s$, площадь поверхности возрастает *линейно* с толщиной h пленки, тогда как даже вследствие сильной шероховатости поверхностных слоев она не может возрастать быстрее чем $h^{1/2}$.
- формирование ионно-плазменных конденсатов происходит в условиях совместного действия радиационного, термического и химического факторов. Особую роль здесь играет газовая пористость, обусловленная спецификой метода распыления.

Список публикаций:

- [3] Косторнов А.Г. *Материаловедение дисперсных и пористых материалов и сплавов.* – К.: Наук. думка, 2002. Т.1. – 569 с.
[4] Косторнов А.Г. *Материаловедение дисперсных и пористых материалов и сплавов.* – К.: Наук. думка, 2003. Т.2. – 548 с.
[5] Палатник Л.С., Фукс М.Я., Косевич В.М. *Механизм образования и субструктура конденсированных пленок.* – М.: Наука, 1972. – 320 с.
[6] *Осаждение из газовой фазы: Пер. с англ.* – М.: Атомиздат, 1979. – 380 с.
[7] Черемской П.Г., Слезов В.В., Бетехтин В.И. *Поры в твердом теле.* – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 376 с.
[8] Палатник Л.С., Черемской П.Г., Фукс М.Я. *Поры в пленках.* – М.: Энергоиздат, 1982. – 216 с.
[9] Черемський П.Г. *Пори у конденсатах і композиційних системах. Автореферат докт. дисертації, Харків: Національний університет ім. В.Н. Каразіна, 2002. – 32 с.*
[10] Мовчан Б.А., *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології, 2004. – Т.2. – №4. – С. 1103–1126.*

Влияние внешнего магнитного и электрического поля на динамические взаимодействия в сегнетомагнитных системах

Шарафуллин Ильдус Фанисович
Бакирский государственный университет
Харрасов Мухамет Хадисович, д.ф.-м.н.
SharafullinIF@yandex.ru

Одной из актуальнейших задач современной физики конденсированного состояния является исследование влияния внешнего электрического и магнитного поля на магнитоэлектрическое, магнитоупругое и электроупругое взаимодействие в кристаллах. Исследование сегнетон-фоонных, магнотон-фоонных, магнотон-сегнетонных и других взаимодействий и их влияния на динамические явления в кристалле привело к открытию ряда новых эффектов [1-3]. Несомненный научный интерес представляет класс веществ – сегнетомагнетики. Это соединения, в которых одновременно существуют магнитное и сегнетоэлектрическое упорядочение.

В данной работе рассматривается антисегнетоантиферромагнетик (АСАФМ) орторомбической симметрии со структурой перовскита. Чтобы иметь возможность изучать динамические свойства сегнетомагнетиков, воспользуемся методом приближенного вторичного квантования (ПВК). Выражая магнитный момент, поляризацию и упругое смещение через операторы рождения и уничтожения квазичастиц получим гамилтониан, учитывающий в представлении ПВК:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k\gamma} \varepsilon_{k\gamma}^M \hat{c}_{k\gamma}^+ \hat{c}_{k\gamma} + \sum_{k\tau\zeta} E_{k\tau\zeta} \hat{D}_{k\tau\zeta}^+ \hat{D}_{k\tau\zeta} + \sum_{k\rho} \varepsilon_{k\rho}^U b_{k\rho}^+ b_{k\rho} + \sum_{k\tau\zeta\gamma} \Psi_{k\tau\zeta}^{MF} \hat{c}_{k\gamma} \left[\hat{D}_{-k\tau\zeta} - \hat{D}_{k\tau\zeta}^+ \right] + \\
 & + \sum_{k\rho} \Psi_{k\rho}^{MU} c_{k\gamma} \left[b_{-k\rho} - b_{k\rho}^+ \right] + \sum_{k\tau\zeta\rho} \Psi_{k\tau\zeta\rho}^{FU} D_{k\tau\zeta} \left[b_{-k\rho} - b_{k\rho}^+ \right].
 \end{aligned} \quad (1)$$

Получено дисперсионное уравнение, определяющее собственные частоты АСАФМ, а также явная зависимость коэффициентов связи спиновой спиновой, сегнетоэлектрической и упругой подсистем от феноменологических постоянных, а также от внешнего электрического и магнитного поля.

$$\prod_{a=1}^8 (\varepsilon_a^2 - \omega^2) - \sum_{a,b} 4\varepsilon_a \varepsilon_b |\gamma_{ab}|^2 \prod_{c \neq a,b}^8 (\varepsilon_c^2 - \omega^2) = 0, \quad (2)$$

Взаимодействие магнитной и сегнетоэлектрической подсистем меняет спектры тех ветвей, для которых коэффициент связи ζ отличен от нуля. Дисперсионное уравнение для случая магнитоэлектрических колебаний имеет вид:

$$(\varepsilon_{k2}^{M^2} - \omega^2)(\varepsilon_{k2}^{f^2} - \omega^2) - 4\varepsilon_{k2}^{M^2} \varepsilon_{k2}^{f^2} \zeta_k^2 = 0, \quad (3)$$

где безразмерный коэффициент связи ζ характеризует взаимодействие магнитной и сегнетоэлектрической ветвей. Разумеется, обменное усиление магнитоэлектрического взаимодействия есть только в том случае, когда симметрия кристалла допускает существование хотя бы некоторых из компонент магнитоэлектрического тензора, не противоречивших работе [4]. Зная, какие из этих компонент отличны от нуля для данного кристалла и направляя должным образом внешнее магнитное поле, можно экспериментально наблюдать эффект обменного усиления магнитоэлектрической связи по эффективности нерезонансного линейного возбуждения спиновых волн переменным электрическим полем на частоте спиновой волны.

Также в работе показано, что щель в спектре спиновой ветви уменьшается с увеличением внешнего магнитного поля, а щель в спектре сегнетоэлектрической ветви увеличивается с увеличением величины внешнего электрического поля. Получена безразмерная константа магнитоэлектрического взаимодействия в точке резонанса, исследование которого выявило уменьшение при росте внешнего магнитного поля и увеличение при росте внешнего электрического поля. Полученные результаты важны с точки зрения преобразования сигналов, так как они дают возможность преобразовывать магнитные и электрические сигналы под действием внешних полей с наименьшими потерями. Определено затухание спиновых волн для случая антисегнетоантиферромагнитной структуры.

Список публикаций:

- [1] Звездин А.К., Пятаков А.П. Фазовые переходы и гигантский магнитоэлектрический эффект в мультиферроиках. // УФН, т.174, №4 (2004).
- [2] Туров Е.А., Николаев В.В. Новые физические явления в магнетиках ... // УФН, т.175, №5 (2005)
- [3] Кызыргулов И.Р., Харрасов М.Х. Связанные сегнетомагнитоупругие волны в антисегнетоферромагнетиках // ДАН, т.385, №1 (2000)
- [4] Туров Е.А. УФН.-1994.- Том 164; № 3.

Экспериментальные и модельные исследования структуры полипропиленовых пленок

Шахова Ирина Валерьевна

Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Одним из наиболее перспективных способов получения новых углеродных фаз и наноструктурированных углеродных материалов, является их синтез из полимеров при карбонизации. Различные типы углеродных материалов можно синтезировать из разных исходных полимеров. Это связано с тем, что конечный углеродный материал, получаемый в результате карбонизации, наследует структуру углеродного каркаса исходного полимера. Какие углеродные структуры могут быть получены из различных полимеров предшественников, до сих пор остается не достаточно изученным. В данной работе исследована структура полипропиленовых пленок и закономерности их трансформации при карбонизации полипропилена методами рентгеноструктурного анализа и молекулярной механики.

Была рассчитана структура основных молекулярных разновидностей полипропиленового полимера-изотактическая, синдиотактическая и атактическая. Изотактический полипропилен - полимер, в котором метильные группы направлены в одну сторону от воображаемой плоскости основной цепи; синдиотактический - метильные группы строго чередуются; атактический - метильные группы расположены случайным образом (рис.1, а,б,в). Установлено, что в отличие от структуры цепей поливинилиденфторида, имеющих трансляционный порядок отдельных молекул, цепочки полипропилена стремятся к формированию клубковых структур (рис.2, а). Однако взаимодействие нескольких таких цепочек препятствуют сворачиванию отдельных цепей в клубки (рис.2, б), но трансляционного порядка в молекулах все же не наблюдается – цепочки случайным образом скручены и изогнуты в спирали, ориентированные вдоль общей оси жгута. По-видимому, именно с этими особенностями структуры полипропиленовых жгутов связана низкая плотность данного полимера, отличающая его от других СН и CFH полимеров. Периодичность обнаружена только в относительном расположении спиральных цепочек в плоскости перпендикулярной оси жгутов. Поэтому рентгеновские дифракционные максимумы полипропилена должны характеризовать межцепочечное упорядочение полимерных молекул в жгутах. Действительно, межплоскостные расстояния, рассчитанные по экспериментально снятым рентгенограммам, изменяются в диапазоне от 3.18 Å до 9.65 Å, а межцепочечные расстояния, найденные в результате модельных расчетов, варьируются от 3.83 Å до 10.68 Å. Исследование углеродных структур, которые могут формироваться в результате карбонизации, показали, что из-за отсутствия периодичности в исходных полимерных молекулах их сшивка при удалении атомов водорода должна приводить к формированию углеродных материалов с аморфной структурой.

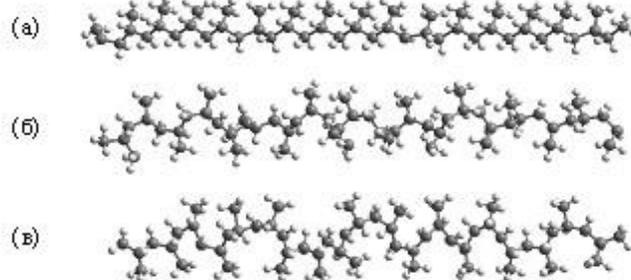


рис.1. (а) изотактическая, (б) синдиотактическая и (в) атактическая цепочки полипропилена

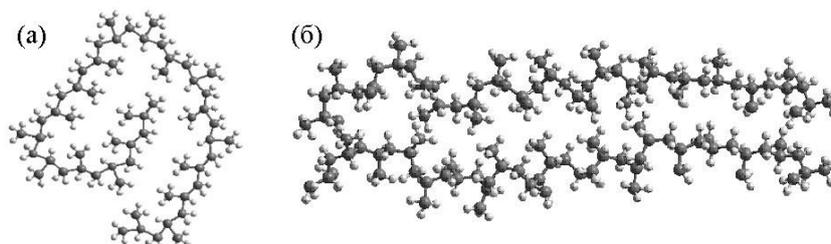


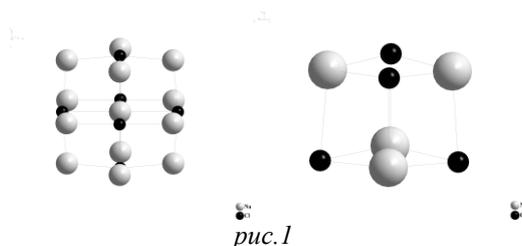
рис.2. (а) Клубковая структура, образованная в процессе геометрической оптимизации цепочки полипропилена атактического типа, (б) структура из двух взаимодействующих цепочек полипропилена синдиотактического типа

Изменение структуры свободных кластеров NaCl в зависимости от размера: анализ методом рентгеновской спектроскопии поглощения

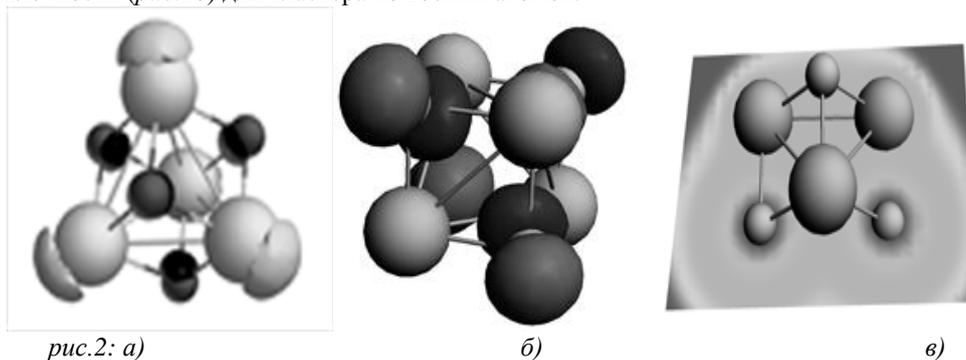
Шматко Валентина Анатольевна
Южный федеральный университет
Яловега Галина Эдуардовна
shmatko86@mail.ru

Свободные кластеры являются переходными объектами между изолированными атомами или молекулами и твердым телом. Особенно интересным является анализ изменения геометрии кластеров в зависимости от размера. Локальное геометрическое окружение атомов, как функция размера кластера влияет на многие свойства кластеров: электронную структуру, способность к химическим реакциям и магнитные свойства. В настоящей работе были проведены исследования локальной структуры свободных кластеров NaCl на основе перспективного метода теоретического анализа экспериментальных данных ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения (XANES – x-ray absorption near - edge structure) за К-краем натрия. Анализ был проведен с использованием метода конечных разностей (FDMNES) для решения уравнения Шредингера. Целью работы являлось определение геометрической структуры малых кластеров (8 и 19 атомов) NaCl. В порядке определения возможной геометрии этих кластеров были проведены расчеты на основе теории функционала плотности (DFT, ADF2007) с использованием в расчете всех орбиталей и квадрополяризованного базиса (QZ4P).

Экспериментальные спектры были получены на ондуляторной линии HASYLAB BW3 (Desy, Германия), обладающей высоким разрешением и энергией пучка. Спектры поглощения за К-краем Na были записаны с использованием методов времяпролетного масспектрометра, полного выхода фотоэлектронов и парциального выхода фотонов. Экспериментальные спектры показывают постепенное изменение тонкой структуры спектров поглощения с увеличением размера кластера от молекулы до твердого тела, в частности вариации окологкраевых структур ниже 1080 эВ и изменение высокоэнергетических структур для спектров К-края натрия. Резонно предположить, что геометрическая структура свободных кластеров может отличаться от структуры кристалла NaCl. Поэтому для изучения локальной структуры малых кластеров NaCl получили оптимизированные атомные структуры для свободных кластеров из 8 и 19 атомов, используя DFT расчеты. В качестве исходной точки расчетов была использована структура полученная из кристалла NaCl. Кристалл NaCl имеет кубическую решетку с межатомными расстояниями равными 2.82 Å. Из кристалла NaCl были выделены одна ячейка, включающая 8 атомов и высокосимметричный фрагмент из 19 атомов. Для них была проведена геометрическая оптимизация методом теории функционала плотности.. Было обнаружено сильное искажение симметрии и вариации межатомных расстояний для кластера содержащего 8 атомов (Na-Cl =2.57 Å и со смежными углами 84°и 96°), в то время как для кластера состоящего из 19 атомов эти изменения были намного меньше.(Na-Cl =2,8 ; 2,6 Å и со смежными углами 90°и 100°). На рисунке 1 представлена оптимизированные структуры для 8 и 19 атомов.



Следующим шагом было исследование электронной структуры кластеров. На рисунке 2 представлены высшие заполненные орбитали (рис.2а), низшие не заполненные орбитали (рис 2б) и распределение электронной плотности (рис.2в) для кластера из восьми атомов.



Для оптимизированных структур были рассчитаны спектры XANES за К-краем Na кластеров, включающих 8 и 19 атомов

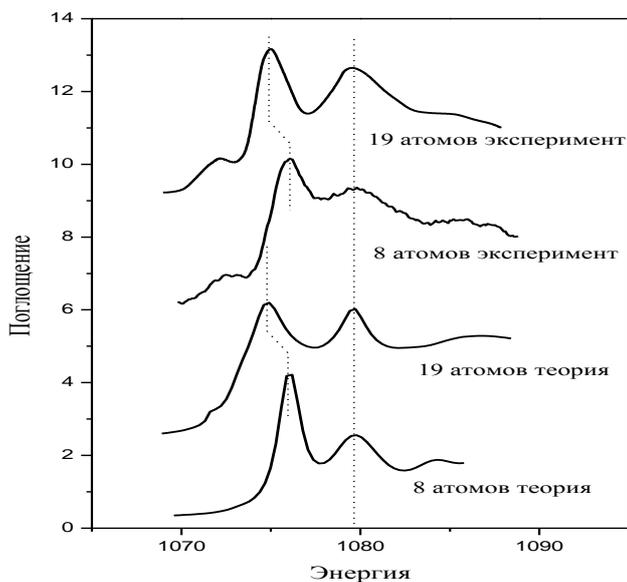


рис.3

Изменения между теоретическими спектрами кластеров двух размеров соответствуют изменениям, наблюдаемым в эксперименте (рис.2). Таким образом, Метод спектроскопии рентгеновского поглощения является достаточно чувствительным для отслеживания малых изменений в параметрах локальной структуры малых кластеров NaCl, а перспективный теоретический анализ экспериментальных данных делает возможным получить параметры атомной структуры 8 и 19 атомных кластеров NaCl. Свободные кластеры NaCl, состоящие из 8 и 19 атомов, имеют локальную геометрическую структуру отличную от структуры кристаллического NaCl.

Численное моделирование разрушения металлических образцов при динамических испытаниях на трехточечный изгиб

Шушаков Роман Анатольевич

Скрипняк Владимир Альбертович, Козулин Александр Анатольевич

Томский государственный университет

Козулин Александр Анатольевич, к.ф.-м.н.

kozulyn@ftf.tsu.ru

Эксперименты на ударный трехточечный изгиб (по Шарпи) имеют наибольшее значение для определения сопротивления хрупкому разрушению вязких металлических материалов. Этот экспериментальный метод является самым распространенным (после испытаний на растяжение) испытанием материалов в автомобилестроении металлообрабатывающей промышленности. Испытание на ударный трехточечный изгиб образца с надрезом используется не только для определения склонности к хрупкому разрушению конструкционных сталей, но и для контроля качества обработки, однородности структурного состояния, а также, например, для исследования склонности к старению.

Целью работы было создание численной физико-математической модели, описывающей эксперимент и сравнение результатов компьютерного моделирования динамических испытаний на трехточечный изгиб с результатами, полученными с помощью экспериментов на испытательной машине INSTRON VHS-40/50, имеющей множественные функциональные превосходства перед известными копровыми испытательными машинами. Схема эксперимента показана на рис.1. Проводили целый ряд экспериментов с различными скоростями ударника от 1 до 20 м/с.



рис 1. Схема эксперимента на трехточечный изгиб на испытательной машине INSTRON VHS – 40/50:
а) начальное состояние; б) конечное состояние

Геометрическая и сеточная модель образца ударника и опор (рис.2) разработана с помощью программных средств ANSYS Workbench 11, вычислительный эксперимент проведен в специализированной для решения динамических задач программе AUTODYN. Ударник и опоры моделировали, как модели из жесткого материала и разбивали на равномерную сетку со сгущением в области контакта с образцом. Узлы опор закреплены неподвижно во всех направлениях. К узлам ударника прикладывается постоянная скорость по направлению к образцу.

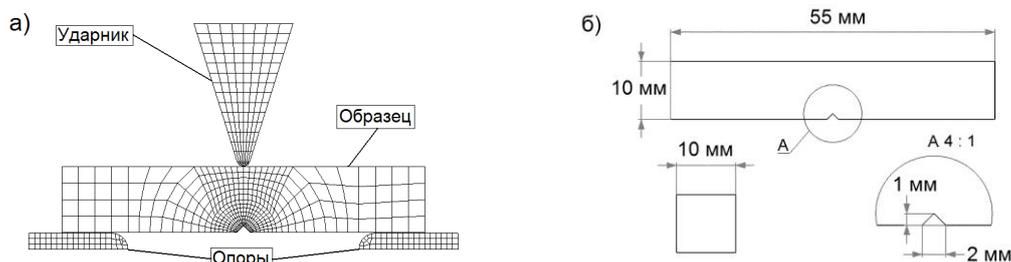


рис 2. а) Сеточная модель эксперимента, используемая в расчетах; б) размеры испытываемого образца

Результатом моделирования предусматривается разрушение образца, поэтому, для точности численного решения образец разбит на мелкую регулярную сетку со сгущением в области предполагаемого разрушения. Число конечных элементов модели образца подбиралось из условий сходимости численных результатов и составляло около 100 тыс. элементов. Для описания материала образца в расчетах использовалась упруго-пластическая модель. Алгоритм моделирования разрушения, предусматривает удаление конечных элементов при достижении ими предела эффективной пластической деформации, являющейся причиной разрушения. Величина пластической деформации при растяжении определялась из испытаний образцов на одноосное растяжение.

Взаимодействие лазерного излучения с поверхностью объемных аморфных металлических сплавов

Яковлев Алексей Владимирович

Чернова Ирина Валерьевна

Тамбовский государственный университет им. Г. Р. Державина

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н.

feodorov@tsu.tmb.ru

Исследование действия различных внешних факторов на свойства объемных аморфных металлических сплавов является актуальной задачей физики неупорядоченных сред и материаловедения. В работе исследованы механические характеристики объемных аморфных металлических сплавов, формируемые при воздействии импульсного лазерного излучения. Исследования проводили на металлических стеклах (МС) на основе циркония и палладия. Объектами исследования служили образцы размером $2 \times 5 \times 4$ мм на основе циркония системы Zr – Ti – Cu – Ni – Al (52,5% Zr) и палладия системы Pd – Cu – Ni – P (40% Pd) соответственно. Воздействие лазерного облучения на поверхность МС осуществляли с помощью лазерной установки «ЛТА-4-1». Средняя энергия импульса излучения составляла $E=1,6$ Дж/мм². Длительность импульса ~ 2 мс. Исследование характера воздействия лазера проводили на металлографическом микроскопе, индентирование проводили на микротвердомере ПМТ-3. Перед началом исследований одна сторона образцов была подготовлена как металлографический шлиф. В результате воздействия сфокусированного импульсного лазерного излучения на поверхность МС формируются локальные зоны облученного материала. При малой площади облучаемой поверхности и достаточной энергии излучения, образуются области воздействия лазера, имеющие для каждого из образцов морфологические отличия (рис. 1). Зона воздействия образца на основе Zr представляет собой

“корону”, состоящую из наслоений выплавленного из центральной области материала, имеет вид воронки. Зона воздействия образца на основе Pd имеет вид “лунного кратера”. Размеры зон воздействия изменяются в зависимости от энергии импульса. Выделяются зона оплавления и зона термического влияния. По краям зоны проплавления сплава на основе Zr наблюдаются полосы микропластичности, обусловленные термическими напряжениями. В центре области воздействия лазера сплава на основе Pd наблюдаются локальные участки выплавленного материала, обусловленные воздействием лазера. Индентирование осуществлялось в зоне термического влияния и около нее. Микротвердость максимальна у границы зоны воздействия лазера и постепенно уменьшается по мере удаления от нее (зона термического влияния) и на некотором расстоянии приблизительно равном 100 мкм, принимает значения, характерные для необлученного сплава, для образцов на основе Zr. Для образцов на основе Pd наблюдается обратная картина, микротвердость минимальна у границы зоны воздействия лазера, постепенно увеличивается по мере удаления от нее (зона термического влияния) и на некотором расстоянии приблизительно равном 100 мкм, принимает значения, характерные для необлученного сплава, для образцов на основе Pd.

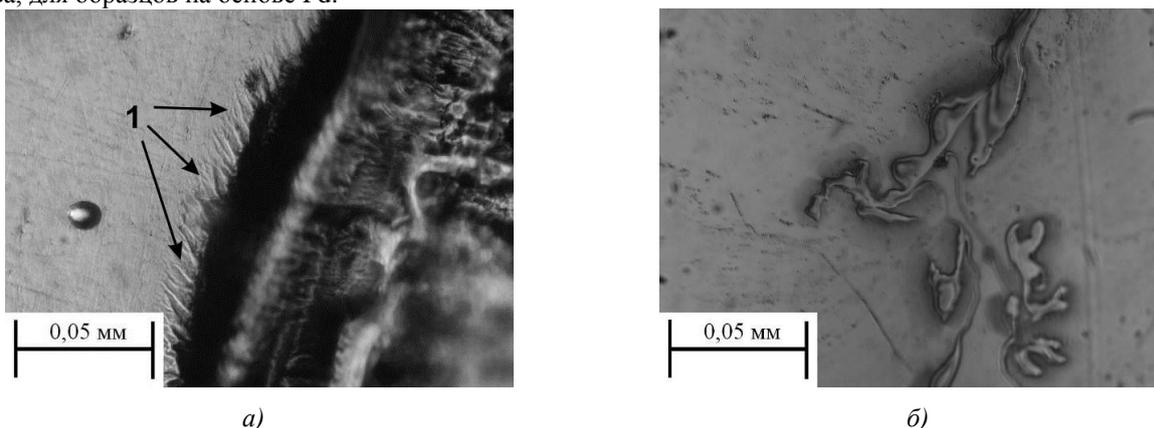


рис. 1. Общий вид зон воздействия образцов, подвергнутых воздействию лазерного излучения: а) сплав на основе Zr: 1 – полосы микропластичности; б) сплав на основе Pd: локальные участки расплавления.

Таким образом, морфологический вид зон, образующихся в результате воздействия сравнительно мощного и непродолжительного лазерного импульса зависит от состава, что обусловлено различием свойств этих материалов, в частности механических.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №09-01-97514 р_центр_а).

