

Время	Понедельник (место проведения: СФУ) (23.06.2025)	Время	Вторник (24.06.2025)	Время	Среда (место проведения: СФУ) (25.06.2025)
9:00	<b>Регистрация участников</b>				
9:30	<b>Открытие школы –семинара</b> Вступительное слово: академик Сигов А.С. академик Шабанов В.Ф. д.ф. – м.н. Софронова С.Н. д.ф. –м.н. Минаков А.В.				
10:00	<b>Лекция:</b> Муртазаев А.К. «Фазовые переходы и критические явления»	10:00	Экскурсия (ГЭС, смотровая площадка, пос. Овсянка, Часовня)	10:00	<b>Лекция:</b> Зайцев А.И. «Двойникование в полярных кристаллах, как аналог сегнетоэлектрических доменов»
11:30	Кофе - Брейк			11:30	Кофе - Брейк
12:00	<b>Лекция:</b> Шнайдштейн И.В. «Теория фазовых переходов Ландау в примерах»	13:30		12:00	<b>Лекция:</b> Еремин Е.В. «Мультиферроики. Магнитозэлектрический эффект»
13:30	Обед			13:30	Обед
14:30	<b>Лекция:</b> Шнайдштейн И.В. «Тепловые явления при фазовых превращениях»	15:00		14:30	<b>Лекция:</b> Смольников А.Г. «Спектроскопия ЯМР функциональных материалов»
16:00	Кофе-Брейк	17:00	Банкет	16:00	Кофе-Брейк
16:15	Экскурсия в СФУ			16:15	Постерная секция
18:00					

<b>Время</b>	<b>Четверг (место проведения: СФУ) (26.06.2025)</b>	<b>Время</b>	<b>Пятница (место проведения: Институт физики им. Л.В. Киренского) (27.06.2025)</b>
10:00	<b>Лекция:</b> Коломин В.М. «Диэлектрические резонаторы для техники СВЧ-диапазона»	10:00	<b>Лекция:</b> «Современные научные инструменты для наномасштабных исследований сегнетоэлектрических материалов»
11:30	Кофе - Брейк	11:30	Спонсор школы-семинара НТ-МДТ Кофе - Брейк
12:00	<b>Лекция:</b> Коломин В.М. «Отечественная система керамика –пласты для изготовления изделий по технологии ЛТСС»	12:00	Круглый стол: «Сравнение гиперспектральной съемки с традиционными спектральными методами анализа: преимущества и ограничения» Спонсор школы-семинара группа компаний «Научное оборудование»
13:30	Обед	13:30	<b>Закрытие школы-семинара</b> Награждение лучших докладов и выдача сертификатов участника школы-семинара
14:30	<b>Лекция:</b> Смирнов А.В. «Новые методы низкотемпературного спекания керамики и компози- тов с керамической матрицей»		Экскурсия в Институт физики им. Л.В. Киренского
16:00	Кофе-брейк		
16:15	Постерная секция		

**ПОСТЕРНАЯ СЕКЦИЯ № 1 (25.06.2025 г.) СФУ (ВРЕМЯ 16:15)**

№	ФИО	Тезисы
1.1	Сподина Анастасия Вячеславовна	<u>Сподина А.В.</u> , Свинухова А.А. Просвечивающая электронная микроскопия гексаборида Лантана
1.2	Козлова Наталья Николаевна	<u>Козлова Н.Н.</u> , Маноменова В.Л., Руднева Е.Б., Волошин А.Э. Особенности роста монокристалла GUNP
1.3	Матвеева Диана Сергеевна	<u>Матвеева Д.С.</u> , Коморников В.А., Сорокина Н.И., Волошин А.Э. Особенности фазообразования, рост и свойства монокристалла $Rb_2NiCl_4 \cdot 2H_2O$
1.4	Ахметшин Линар Ришатович	<u>Ахметшин Л.Р.</u> , Казанцева Е.А. Влияние формы образца из метаматериала на его свойства
1.5	Шарая Светлана Сергеевна	Шарая С.С., Захаров Б.А., Болдырева Е.В., Макарова И.П., Исакова Н.Н., Калюканов А.И. Детальное изучение структур органических сегнетоэлектриков (сегнетовой соли и R-хинуклидинола) дифракционными методами
1.6	Соколова Дарья Арнольдовна	<u>Соколова Д.А.</u> , Подсвилов О.А., Шестаков С.А. Формирование наночастиц серебра в силикатных стеклах с помощью электронного облучения
1.7	Кондранова Анастасия Михайловна	Кондранова А.М., Окотруб А.В. Массивы УНТ, полученные CVD синтезом на алюминиевой фольге
1.8	Лясникова Мария Сергеевна	<u>Лясникова М.С.</u> , Юрасик Г.А., Сорокина Н. И., Кулишов А.А., Борщев О. В., Постников В. А. Рост, структура и опико-люминесцентные свойства кристаллов бифенила и его производных с триметилсилильным и третбутильным концевыми заместителями
1.9	Кулишов Артём Андреевич	Постников В.А., Юрасик Г.А, <u>Кулишов А.А.</u> , Сорокина Н.И., Сорокин Т.А., Степко А.С., Лебедев-Степанов П.В. Кристаллы линейных аценов: поверхностные свойства и зародышеобразование в условиях роста из пара и раствора
1.10	Титова Вероника Романовна	<u>Титова В.Р.</u> , Гудим И.А. Выращивание монокристалла хромобората методом раствора-расплава
1.11	Чулкова Марина Юрьевна	Турчин П.П., <u>Чулкова М.Ю.</u> , Суходаев П.О., Молокеев М.С., Турчин В.И. Исследование образования квазикристаллических фаз в алюминиевом сплаве D16
1.12	Ситников Кирилл Алексеевич	<u>Ситников К.А.</u> , Еремин Е.В., Гудим И.А. Проблема выбора раствора-расплава для выращивания монокристаллов $NdGa_3(BO_3)_4$
1.13	Акинъшин Иван Дмитриевич	<u>Акинъшин И.Д.</u> , Корнюшин М.В., Холодкова А.А., Ивакин Ю.Д., Смирнов А.В. Структура и свойства керамики $BaTiO_3$ и $Al_2O_3$ , изготовленных методом холодного спекания
1.14	Мошкина Евгения Михайловна	<u>Мошкина Е.М.</u> , Молокеев М.С., Софронова С.Н., Д. Кох Д., Еремин Е.В., Безматерных Л.Н. Особенности синтеза монокристаллов и магнитные свойства Co-Ni оксидоборатов со структурами людовгита и котоита

# ПРОСВЕЧИВАЮЩАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ГЕКСАБОРИДА ЛАНТАНА

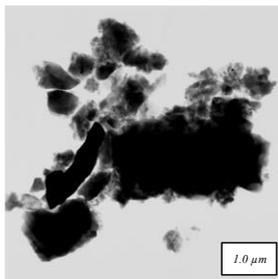
**А.В. Сподина<sup>1\*</sup>, А.А. Свинухова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Томский политехнический университет, 634050, Томск, Россия*

\*e-mail: avs363@tpu.ru

В последние годы наблюдается растущий интерес к исследованию соединений, в состав которых входят редкоземельные металлы. В частности, гексаборид лантана ( $\text{LaB}_6$ ) – одно из наиболее интересных соединений редкоземельных металлов, обладающее уникальными физико-химическими свойствами [1]. Гексаборид лантана выделяется среди других материалов своей высокой температурой плавления ( $2500\text{ }^\circ\text{C}$ ), твердостью, механической прочностью и термической стабильностью [2], что делает его перспективным кандидатом для применения в электронике и материаловедении.

В данной работе представлены результаты просвечивающей электронной микроскопии гексаборида лантана, полученного безвакуумным электродуговым методом. Исследования были проведены на лабораторном стенде Томского политехнического университета. Стенд представляет собой безвакуумный электродуговой реактор. Основными элементами реактора являются графитовые электроды и источник постоянного тока. В качестве прекурсоров были взяты порошки оксида лантана («Редкий металл», Россия) и аморфного бора («Ферус», Россия). Полученные порошковые материалы были исследованы методом просвечивающей электронной микроскопии (JEOL JEM 2100F).



**Рис. 1.** Просвечивающая электронная микроскопия продуктов синтеза. Изображение образца гексаборида лантана ( $1\text{ }\mu\text{m}$ );

На рисунке 1 представлены результаты просвечивающей электронной микроскопии гексаборида лантана. На снимке можно различить множество объектов, размеры которых составляют порядка нескольких микрометров. Подавляющее большинство частиц имеет размер менее  $0.5\text{ }\mu\text{m}$  ( $47.83\%$ ), максимальный размер частицы составляет  $2.99\text{ }\mu\text{m}$ .

## Литература

- [1] Глобальный рынок редкоземельных металлов / В.Б. Кондратьев // Горная промышленность. – 2017. – № 4. – С. 48–54.
- [2] S.N. Dub, G.P. Kislaya, P.I. Loboda, Study of mechanical properties of  $\text{LaB}_6$  single crystal by nanoindentation, Journal of Superhard Materials 35 (2013) 158–165.

## ОСОБЕННОСТИ РОСТА МОНОКРИСТАЛЛА GUHP

**Н.Н. Козлова<sup>1\*</sup>, В.Л. Маноменова<sup>1</sup>, Е.Б. Руднева<sup>1</sup>, А.Э. Волошин<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>*Отделение Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Курчатковского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", 117342, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Национальный университет науки и технологий "МИСиС", 119049, Москва, Россия*

\*e-mail: kozlova.n@crys.ras.ru

Исследования новых материалов в области оптики и оптоэлектроники стремительно развиваются, открывая новые горизонты для создания сверхбыстрых устройств, которые могут работать в терагерцовом спектральном диапазоне. В последнее десятилетие для этого использовались различные неорганические кристаллы, такие как LiNbO<sub>3</sub> и KTP [1], а также были созданы новые органические материалы, например, DAST и BNA [2]. При этом органические кристаллы в отличие от неорганических, привлекают внимание благодаря высоким нелинейно-оптическим (НЛО) коэффициентам. Однако многие из них демонстрируют значительное поглощение на терагерцовых частотах и низкий порог лазерного разрушения, к тому же их сложно синтезировать и выращивать. Как альтернативу им рассматривают полуорганические молекулярные кристаллы, поскольку они сочетают в себе преимущества как органических, так и неорганических кристаллов.

Исследуемый в данной работе полуорганический НЛО кристалл гидрофосфитгуанилмочевины (GUHP) благодаря своей уникальной структуре, имеет широкое окно прозрачности в видимой и ближней ИК областях спектра. Он способен генерировать вторую и третью гармоники, и может быть использован как эффективный источник терагерцового излучения, его синтез прост, а рост осуществим из водных растворов [3].

В представленной работе были исследованы свойства водных растворов GUHP, в частности, фазообразование в системе C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>N<sub>4</sub> (дициандиамида) – H<sub>3</sub>PO<sub>3</sub> – H<sub>2</sub>O, построены изотермы растворимости GUHP в воде при различных значениях pH, а также изучено влияние водородного показателя раствора на особенности роста монокристаллов. Проведено численное моделирование условий роста кристаллов GUHP с различной гидродинамикой, по результатам которого выбран оптимальный режим роста кристалла. Представлены результаты экспериментов, связанных с ростом кристаллов GUHP методом снижения температуры раствора, подтверждающие результаты численного моделирования. Получены объемные монокристаллы GUHP размером до 90×35×15 мм<sup>3</sup> и исследованы особенности реальной структуры монокристаллов GUHP, выращенных при различных значениях pH.

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

### Литература

- [1] Matlis N. H. et al. Scaling narrowband THz generation to large apertures in LiNbO<sub>3</sub> and KTP //Optics Express. – 2024. – Т. 32. – №. 19. – С. 33875-33893.
- [2] Notake T. et al. Hybrid terahertz-wave source with ultrawideband tunability utilizing organic DAST and BNA crystals //CLEO: Science and Innovations. – Optica Publishing Group, 2011. – С. JThB108.
- [3] Sinko A. et al. A monoclinic semiorganic molecular crystal GUHP for terahertz photonics and optoelectronics //Scientific reports. – 2021. – Т. 11. – №. 1. – С. 23433.

# ОСОБЕННОСТИ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ, РОСТ И СВОЙСТВА МОНО-КРИСТАЛЛА $Rb_2NiCl_4 \cdot 2H_2O$

**Д.С. Матвеева<sup>1</sup>, В.А. Коморников<sup>1</sup>, Н.И. Сорокина<sup>1</sup>, А.Э. Волошин<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 119333, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Национальный университет науки и технологий "МИСЦ", 119049, Москва, Россия  
e-mail: matveeva.d@crys.ras.ru*

Исследование спектральных характеристик кристаллов переходных элементов обусловлено как фундаментальной, так и практической значимостью. Интерпретация экспериментальных данных от кристаллических образцов значительно проще в сравнении с растворами или аморфными телами. При этом такой подход позволяет дополнительно получать информацию о влиянии на спектры кристаллов разнолигандного координационного окружения d-элементов, что слабо отражено в рамках существующей теории кристаллического поля (ТКП) [1]. Практическая польза подобных исследований обусловлена возможностью получения оптических материалов для различных спектральных приборов.

Наиболее изученными объектами такого рода являются семейства кристаллов солей Туттона и некоторых простых сульфатов [2]. Одним из примеров является кристалл  $\alpha-NiSO_4 \cdot 6H_2O$  ( $\alpha$ -NSH). На участке спектра УФ-видимый свет данный кристалл обладает пропусканием на длинах волн  $\lambda=190-360$  нм и  $420-610$  нм. Такие спектральные характеристики кристалла  $\alpha$ -NSH прежде всего обусловлены наличием в его структуре октаэдрического комплекса  $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$ .

Объектом сравнительного исследования выбран кристалл  $Rb_2NiCl_4 \cdot 2H_2O$ , впервые полученный авторами исследования. Из водного раствора выращен кристалл, размеры и качество которого позволили провести комплексное исследование свойств и оценить его спектральные характеристики. Структура кристалла  $Rb_2NiCl_4 \cdot 2H_2O$  решена методом РСА. Термическая устойчивость кристаллогидрата оценена методом ДСК/ТГ. Оценена тенденция изменения спектральных характеристик кристаллов солей никеля с последовательным замещением молекул  $H_2O$  на ионы  $Cl^-$  в ближнем координационном окружении иона  $Ni^{2+}$ . Кроме того, методом рамановской спектроскопии исследован процесс перестройки координационного окружения иона  $Ni^{2+}$  из равновесного состояния  $[Ni(H_2O)_6]^{2+} / [Ni(H_2O)_5]Cl^+$  в маточном растворе к состоянию  $[Ni(H_2O)_2Cl_4]^{2-}$  в структуре кристалла.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-23-00320.

## Литература

- [1] Гринберг А.А. Введение в химию комплексных соединений. – Л.: "Химия", 1966. – С. 319-320.  
[2] V.L. Manomenova, E.B. Rudneva, A.E. Voloshin // Russ. Chem. Rev. – 2016. – Vol. 85, No. 6. – P. 585 – 609.

# ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ОБРАЗЦА ИЗ МЕТАМАТЕРИАЛА НА ЕГО СВОЙСТВА

**Л.Р. Ахметшин<sup>1,2,\*</sup>, Е.А. Казанцева<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055, Томск, Россия

<sup>2</sup>Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия

\*e-mail: akhmetshin.lr@gmail.com

Одним из элементов тканевой инженерии выступают скаффолды с персонализированной структурой. Их правильная структурная организация необходима для прикрепления, миграции, пролиферации и дифференцировки клеток. Химический состав и топография поверхности скаффолдов должны способствовать связыванию клеток, а пористость открытого типа необходима для проникновения клеток, диффузии питательных веществ, удаления отходов и васкуляризации [1]. В качестве скаффолдов активно применяются различные структуры метаматериалов. Все больше методов аддитивного производства способны создавать сложные геометрические формы таких скаффолдов. Одной из задач биоинженерии является разработка и производство новых скаффолдов для восстановления костной ткани путем выбора или изменения их структуры и поведения. При этом на поведение скаффолдов может влиять конечная форма образца из метаматериала. Цель настоящей работы состоит в определении связи формы поперечного сечения призматического образца из метаматериала на его механическое поведение.

В работе рассматривается механический тетрахиральный метаматериал. Пять параметров характеризуют структуру его элементарной ячейки:  $l$  – размер ячейки,  $r_1$  – внутренний радиуса кольца,  $r_2$  – внешний радиуса кольца,  $t$  – толщина связок,  $h$  – ширина тетрахиральной грани. Наиболее значимым, является размер кольца, с точки зрения получения наибольшего угла скручивания образцов. Ранее нами было получено, что наибольшее отклонение вершин при скручивании достигается в образце с  $r_2 = 17,5$  мм [2].

Метаматериал представляет собой конструкцию, элементы которой состоят из базового материала. В качестве базового материала принят ABS-пластик. Определение напряженно-деформированного состояния трехмерных образцов в процессе одноосного нагружения проводили методами численного моделирования. Математическая модель для решения поставленной задачи представлена системой дифференциальных уравнений механики сплошной среды. Система включает уравнения равновесия, соотношения Коши для определения деформаций через перемещения и определяющие соотношения (закон Гука). На верхней грани образца прикладывалась сжимающая нагрузка через смещение. Снизу образца задано ограничение перемещений по трем осям. На остальных гранях образца (и гранях элементов структуры метаматериала) заданы свободные граничные условия.

Рассмотрены призматические образцы из метаматериала, вырезанные из пластины. Вырезанные образцы в сечении имели форму правильных  $n$ -угольников. В таком случае, самая простая форма является треугольником, а  $n$ -угольник с бесконечным числом углов будет являться кругом. Наибольшие значения угла поворота замечены на верхней грани. Образец с треугольной формой поперечного сечения скручивался на  $3,8^\circ$ . В случае квадратного сечения образца угол поворота снизился на 30.5%. Рассмотрение многоугольников с пятью и шестью вершинами не выявлено значительного различия. Сравнение с треугольной формой дает разницу в 4.1% и 6.4%, соответственно. Поворот верхней грани в случае круглого поперечного сечения уменьшился на 14%.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022-0003.

## Литература

- [1] N. Elenskaya, P. Koryagina, M. Tashkinov, V.V. Silberschmidt, Computers in Biology and Medicine. V. 174, № 108402 (2024)
- [2] L.R. Akhmetshin, I.Y. Smolin, Russian Physics Journal. V. 67, № 4, P. 411–418 (2024)

# ДЕТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУР ОРГАНИЧЕСКИХ СЕГНЕТО-ЭЛЕКТРИКОВ (СЕГНЕТОВОЙ СОЛИ И R-ХИНУКЛИДИНОЛА) ДИ-ФРАКЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ

**С.С. Шарая<sup>1\*</sup>, Б.А. Захаров<sup>1</sup>, Е.В. Болдырева<sup>1</sup>, И.П. Макарова<sup>2</sup>, Н.Н. Исакова<sup>3</sup>, А.И.Калюканов<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Новосибирский государственный университет, 630058, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», 119333, Москва, Россия

<sup>3</sup>Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт», 123182, Москва, Россия  
\*e-mail: s.sharaya@g.nsu.ru

Сегнетоэлектрические свойства впервые были открыты именно для органической соли (сегнетова соль,  $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , калия-натрия L(+)-тартрата тетрагидрат), однако долгое время органические молекулярные сегнетоэлектрики уступали неорганическим соединениям по количеству известных примеров, а однокомпонентные органические кристаллы с сегнетоэлектрическими свойствами являлись скорее исключением. Однако в XXI веке было найдено множество примеров малых органических молекул, чьи кристаллы обладают собственной поляризацией при комнатной температуре, например R-(3)-хинуклидиол и S-(3)-хинуклидиол (1-азобисцикло[2.2.2]октан-3-ол) с температурой Кюри 400 К.

Цель работы – выявление изменений кристаллических структур молекулярных сегнетоэлектриков, сегнетовой соли и R-(3)-хинуклидинола, при воздействии температуры и давления. Подобные исследования дают информацию о структурных изменениях, сопровождающих фазовые переходы, а также об областях устойчивости каждой из фаз.

В рамках данной работы впервые методом монокристаллической рентгеновской дифракции исследована структура сегнетовой соли в температурном интервале от 308 до 100 К, включающем обе температуры Кюри (255 К и 297 К). Анализ температурных зависимостей параметров тепловых колебаний ионов  $\text{K1}$  позволил заключить, что разупорядочение этих ионов в неполярной фазе носит преимущественно (если не исключительно) динамический характер. Кроме того, в данных для высокотемпературной фазы наблюдались несимметричные максимумы электронной плотности, соответствующие атому  $\text{H6}$ , участвующему в водородной связи  $\text{O6} \cdots \text{O10} (-x+1/2, y+1/2, -z+1)$ , в которой расстояние между донорным и акцепторным атомом изменялось наибольшим образом при нагревании и фазовых переходах. Это позволило предположить, что упорядочение/разупорядочение атома  $\text{H6}$  играет ключевую роль в фазовых переходах. Для проверки этой гипотезы был проведён нейтронный дифракционный эксперимент для сегнетоэлектрической фазы, которую ранее не исследовали с помощью дифракции нейтронов. Распределение ядерной плотности позволило впервые достоверно определить отсутствие разупорядочения для атома  $\text{H6}$  в полярной фазе, что говорит в пользу гипотезы о ключевой роли изменений водородной связи  $\text{O6} \cdots \text{H6} \cdots \text{O10} (-x+1/2, y+1/2, -z+1)$ , по крайней мере, в фазовом переходе, соответствующем второй температуре Кюри.

Также в рамках работы были проанализированы структурные изменения сегнетоэлектрической фазы (R)-3-хинуклидинола при высоком давлении и низкой температуре. Изменения объема и параметров элементарной ячейки происходят непрерывно как при охлаждении, так и при повышении давления. Установлено, что анизотропия барической и термической деформации различаются. Вероятно, это связано с достижением при повышении давления максимально коротких расстояний для контактов  $\text{H} \cdots \text{N}$ . Поскольку деформация вдоль оси поляризации может быть связана со спонтанной поляризацией, следует ожидать различный пьезоэлектрических отклик при охлаждении и гидростатическом сжатии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00410, <https://rscf.ru/project/24-23-00410/>. Авторы благодарят к.х.н. В.А. Дребущака и д.ф.-м.н. Чернышова Д.Ю. за полезные обсуждения и Смирнову Е.С. и Иванову А.Г. (ФНИЦ КИФ РАН) за техническую помощь при работе в ЦКП.

# ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В СИЛИКАТНЫХ СТЕКЛАХ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

**Д.А. Соколова<sup>1\*</sup>, О.А. Подсвиров<sup>1</sup>, С.А. Шестаков<sup>1</sup>**

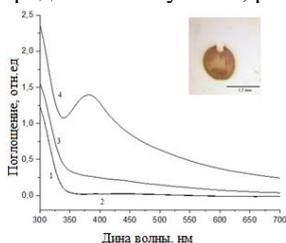
*1 Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Санкт-Петербург, Россия*

\*e-mail: kirpich\_da@spbstu.ru

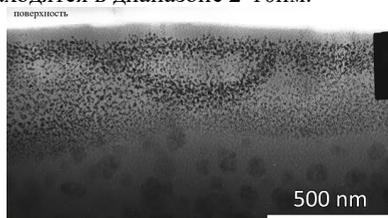
Стекла в составе с наночастицами (НЧ) металлов имеют большой спектр применения, в частности могут использоваться в качестве цветных оптических фильтров, нелинейно-оптических сред [1]. Существует ряд методов формирования наночастиц металлов в неорганических стеклах в том числе электронно-лучевой метод [2].

Целью работы является экспериментальное исследование влияния параметров электронного облучения на формирование НЧ серебра в натриево-силикатных стеклах состава  $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{MgO}$ , покрытых серебряной пленкой толщиной 26нм. Электронное облучение (ЭО) проводилось на оже-спектрометре Varian с энергией электронов  $E=20\text{кэВ}$ . Плотность электронного тока составляла  $j=100-1600\mu\text{А}/\text{см}^2$ , доза электронного облучения составляла  $Q=50, 100\text{млКл}/\text{см}^2$ . Время облучения  $\tau$  зависело от дозы и плотности электронного тока и составляло от 60 до 480с. Облучение проводилось при комнатной температуре. Но расчеты показывают, что электронное облучение при  $E=20\text{кэВ}$ ,  $Q=50-100\text{млКл}/\text{см}^2$  и плотностях тока до  $300\mu\text{А}/\text{см}^2$  вызывает нагревание приповерхностного слоя стекла толщиной 1 мкм до температуры 150-190°C. Диаметр облученной зоны был равен 1,5мм.

На рисунке 1 показано, что оптическая плотность стекла после ЭО при  $E=20\text{кэВ}$ ,  $Q=50\text{млКл}/\text{см}^2$ ,  $j=100\mu\text{А}/\text{см}^2$  не изменяется. При повышении плотности тока до  $300\mu\text{А}/\text{см}^2$  происходит увеличение оптической плотности за счет формирования нейтральных молекулярных кластеров серебра [3] в приповерхностных слоях стекла. При ЭО большими плотностями тока ( $1600\mu\text{А}/\text{см}^2$ ) появляется полоса поглощения с максимумом - 370 нм, что соответствует плазмонному резонансу НЧ Ag в видимой области спектра. На рисунке 2 приведено ТЕМ-изображение распределения слоя НЧ Ag по глубине, где видно: толщина слоя НЧ составляет около 350нм; концентрация НЧ неоднородна по всему слою; размеры НЧ находятся в диапазоне 2-10нм.



**Рис.1.** Спектры оптической плотности при  $E=20\text{ кэВ}$  и  $Q = 50\text{млКл}/\text{см}^2$ . 1 – без ЭО; 2 – ЭО при  $j = 100\ \mu\text{А}/\text{см}^2$ ; 3 – ЭО при  $j = 300\ \mu\text{А}/\text{см}^2$ ; 4 – ЭО при  $j = 1600\ \mu\text{А}/\text{см}^2$ ; вставка – облученная область



**Рис.2.** ТЕМ-изображение области ЭО при  $E=20\text{кэВ}$ ,  $Q=50\text{млКл}/\text{см}^2$  и  $j=1600\mu\text{А}/\text{см}^2$ ; распределение по глубине от поверхности облучения

- [1] L. Francois, M. Mostafavi, J. Belloni. NLO. V. 27, № 1–4, С. 319–329 (2001).
- [2] А.В. Востоков, И.А. Верзин, А.И. Игнатьев, О.А. Подсвиров, А.И. Сидоров. Оптика и спектроскопия. V. 109. С. 407 (2010).
- [3] С. Félix, С. Sieber, W. Harbich, J. Buttet, I. Rabin, W. Schulze, G. Ertl. Chemical Physics Letters. V. 313, P. 105 (1999).

## МАССИВЫ УНТ, ПОЛУЧЕННЫЕ CVD СИНТЕЗОМ НА АЛЮМИНИЕВОЙ ФОЛЬГЕ

**Кондранова А.М.<sup>1\*</sup>, Окотруб А.В.<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>ИИХ СО РАН, 630090, Россия, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3  
\* e-mail: a.kondranova@gmail.com*

В настоящее время растет интерес к технологии CVD синтеза (химическое осаждение газовой фазы) вертикально ориентированных массивов углеродных нанотрубок (УНТ) на металлических подложках для создания новых оптических наноструктур на их основе. CVD метод уникален благодаря своей универсальности и качеству получаемых УНТ. А именно: является низкотемпературным методом получения с вертикальной ориентацией УНТ и тем самым позволяет получать равномерные по толщине покрытия, дает возможность контролировать морфологию поверхности с помощью параметров процесса. Однако мало внимания уделяется влиянию Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на рост массивов УНТ при синтезе. Например, при использовании алюминиевой фольги в качестве подложки, по сравнению с традиционно используемыми подложками (кремний и кварц), фольга обладает лучшей тепло и токопроводимостью, она более гибкая, доступная, имеет низкую стоимость и совместима с автоматизированным крупномасштабным производством. Массивы УНТ, полученные CVD методом, на поверхности алюминиевой фольги, являются отличными претендентами для создания на их основе суперконденсаторов, новых оптических элементов, автоэлектронных эмиттеров, электродов для химических и биологических датчиков и во многих других электрохимических исследований.

В этой работе использовалась алюминиевая фольга толщиной (9 мкм, 14 мкм, 20 мкм и 30 мкм), на которой происходил рост массивов УНТ. Синтез проводился в CVD реакторе при температуре 800 °С, в качестве прекурсора применялся раствор ферроцена в толуоле, с использованием инертного газа аргон. Методом Рамановской спектроскопией было показано, что в полученных массивах УНТ на алюминиевой фольге есть радиально дышащая мода, это свидетельствует о наличии малослойных УНТ. Было проведено исследование морфологии массивов УНТ и структуры нанотрубок от температуры синтеза, толщины используемой фольги, скорости подачи газа носителя и концентрации реакционной смеси. Предварительный отжиг алюминиевой фольги в аргоне позволяет получать более высокие и однородные вертикально ориентированные массивы УНТ. Согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) показано, что в процессе отжига алюминиевой фольги и синтеза массивов УНТ происходит образование оксидов и карбидов алюминия, что предотвращает плавление алюминиевой фольги. Дальнейшее изучение роста массивов УНТ на алюминиевой фольге CVD синтезом дает возможность получать новые наноструктуры, например, для создания автоэлектронных эмиттеров, элементов терагерцовой оптики и т.д.

# РОСТ, СТРУКТУРА И ОПТИКО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ БИФЕНИЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ С ТРИМЕТИЛСИЛИЛЬНЫМ И ТРЕТБУТИЛЬНЫМ КОНЦЕВЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Лясникова М. С.<sup>1\*</sup>, Юрасик Г. А.<sup>1</sup>, Сорокина Н. И.<sup>1</sup>, Кулишов А. А.<sup>1</sup>, Борщев О. В.<sup>2</sup>, Постников В. А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Отделение Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", 117342, Россия, Москва

<sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, 117393, Россия, Москва

\*e-mail: lyasnikova.m@crys.ras.ru

Бифенил является наиболее короткой молекулой в гомологическом семействе линейных олигофениленов, выделяющихся среди различных семейств линейных сопряженных олигомеров как эффективные люминофоры с высокой химической и радиационной стойкостью. Кристаллы бифенила могут быть использованы для изготовления сцинтилляционных детекторов, однако их недостатком является относительно низкая температура плавления и высокая летучесть. В этой связи поиск более стабильных аналогов бифенила является актуальной научной задачей. В работе представлены результаты исследований роста из растворов, структуры, термических и спектрально-люминесцентных свойств кристаллов бифенила и его производных с концевыми триметилсилильными ( $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ ) и третбутильными ( $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ) заместителями.

Методами ДСК и ТГА исследована термическая стабильность и установлены параметры плавления производных бифенила. Определена растворимость исследуемых веществ в некоторых органических растворителях. Методами роста из растворов [1-2] получены монокристаллы исследуемых соединений и с помощью монокристалльной рентгеновской дифракции расшифрована их структура. Исследованы спектры поглощения и фотолюминесценции (ФЛ), и кинетики ФЛ растворов и кристаллических пленок производных бифенила. Выполненные исследования показали, что по спектрально-люминесцентным свойствам замещённые соединения не уступают бифенилу, при этом их кристаллы существенно устойчивее к возгонке и имеют более высокую температуру плавления.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов».

## Литература

- [1] В. А. Постников, Н. И. Сорокина, О. А. Алексеева и др. Кристаллография, 2018, 63, 801 – 814.
- [2] В. А. Постников, М. С. Лясникова, А. А. Кулишов и др. Ж. физ. химии, 2019, 93(9), 1362 – 1368.

# КРИСТАЛЛЫ ЛИНЕЙНЫХ АЦЕНОВ: ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА И ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЕ В УСЛОВИЯХ РОСТА ИЗ ПАРА И РАСТВОРА

**В. А. Постников, Г.А. Юрасик, А. А. Кулишов\*, Н. И. Сорокина, Т. А. Сорокин, А. С. Степко, П. В. Лебедев-Степанов**

*Отделение Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Курчатковского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", 117342, Россия, Москва  
\*e-mail: adakyla1255@gmail.com*

Среди линейных сопряженных молекул ацены, благодаря симметричной структуре, одни из наиболее привлекательных объектов для моделирования межмолекулярных взаимодействий в кристаллах. Теоретическому моделированию поверхностной энергии граней кристаллов линейных аценов посвящен ряд работ [1-2], однако в представленных результатах наблюдается широкий разброс значений, а экспериментальные сведения практически отсутствуют. Данная работа посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию поверхностных свойств кристаллов из семейства линейных аценов (нафталин, антрацен, тетрацен, пентацен) с целью термодинамического моделирования параметров зародышеобразования кристаллов в ростовых условиях [3-4] с учетом анизотропии поверхностной энергии.

Методом монокристалльной рентгеновской дифракции уточнена структура кристаллов. На основе уточненных параметров кристаллической структуры выполнен расчет энергии парных межмолекулярных взаимодействий в рамках первой координационной сферы и вычислены значения поверхностной энергии граней кристаллов линейных аценов в приближении метода силового поля OPLS и теории функционала плотности уровня V3LYP/6-31G(d,p). Для кристаллов методом краевого угла смачивания проведена экспериментальная оценка поверхностной энергии грани (001). В рамках классического термодинамического подхода получены и проанализированы выражения для критических размеров зародышей кристаллов в условиях роста из пара и раствора. Полученные результаты представляют интерес для технологии формирования с помощью паровых или растворных методик тонких кристаллических пленок и отдельно стоящих монокристаллов на основе функциональных органических соединений, в основе кристаллического строения которых находятся плотноупакованные молекулярные слои.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов».

## Литература

- [1] Kitaigorodsky A.I., Ahmed N.A. // Acta Cryst. A. 1972. V. 28. P. 207.
- [2] Massaro F.R., Moret M., Bruno M. et al. // Cryst. Growth Des. 2011. V. 11. P. 4639.
- [3] Postnikov V.A., Kulishov A.A., Yurasik G.A. et al. // Crystals. 2023. V. 13. P. 999.
- [4] Кулишов А.А., Юрасик Г.А., Лясникова М.С. и др. // Кристаллография. 2024. Т. 69. С. 330.

# ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛА ХРОМОБОРАТА МЕТОДОМ РАСТВОРА-РАСПЛАВА

**В.Р. Титова<sup>1\*</sup>, И.А. Гудим<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия  
\*e-mail: bb1995@mail.ru

Семейство редкоземельных (РЗ) боратов с общей формулой  $RM_3(BO_3)_4$  (где  $R = Y, La-Lu$ ;  $M = Al, Fe, Cr, Ga, Sc, Mn$ ) имеет широкий спектр физических свойств в зависимости от химического состава и условий роста. Систематическое изучение процессов выращивания кристаллов и характеристика редкоземельных боратов с магнитными ионами ( $M = Cr, Fe$ ) остается недостаточно исследуемым направлением. В частности, по соединению  $RCr_3(BO_3)_4$  [1,2,3], выявили недостаточность исследований в данной области.

Целью работы является синтез и исследование боратов  $YCr_3(BO_3)_4$ .

Монокристаллы  $YCr_3(BO_3)_4$  были синтезированы путём спонтанного зарождения из раствора-расплава  $Li_2WO_4$ .

Раствор – 87% вес.  $\{Li_2WO_4 + 3B_2O_3 + 0,3Y_2O_3\} + 13\%$  вес.  $YCr_3(BO_3)_4$ , готовился при  $T=950^\circ C$  в платиновом цилиндрическом тигле последовательным сплавлением окислов  $[Li_2O_3 + WO_3]$ ,  $[B_2O_3 + Y_2O_3 + Cr_2O_3]$ .

Предварительный поиск температуры насыщения проводился по наблюдениям за образованием на кристаллодержателе спонтанных кристалликов.

После перегрева раствора-расплава кристаллодержатель с затравками погружался в раствор-расплав на глубину температура понижалась до стартовой  $T=T_{нас} - 7^\circ C$ , что соответствует середине метастабильной зоны. Далее температура раствора-расплава плавно снижалась по программе.

Выращенные в температурном интервале  $1-2^\circ C$  монокристаллы  $YCr_3(BO_3)_4$  с размерами до 0,5-2 мм, имели выраженный темно-зеленый оттенок (рисунок 1).

В данной работе были разработаны растворы-расплавы, в которых искомые кристаллы являются единственной и высокотемпературной фазой. Определены параметры кристаллизации и условия устойчивого роста. Выращены качественные монокристаллы спонтанным методом из растворов-расплавов на основе  $Li_2WO_4$  для дальнейших исследований.



**Рис. 1** Выращенный монокристалл  $YCr_3(BO_3)_4$  из раствора-расплава

## Литература

- [1] Болдырев К. Н., и др., ФТТ, 50, 9 (2008)
- [2] Кузьмин Н. Н. и др., Неор. матер., 56, 8 (2020).
- [3] Gudim I. A. et al., of Crys. Gr., 637 (2024)

# ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ В АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ Д16

П. П. Турчин<sup>1,2</sup>, М. Ю. Чулкова<sup>1</sup>, П. О. Суходаев<sup>1</sup>, М. С. Молокеев<sup>1,2</sup>,  
В. И. Турчин<sup>1</sup>

1 – Сибирский федеральный университет, 660041, г. Красноярск, Россия

2 – Институт физики им. Л.В.Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, г. Красноярск,  
Россия

e-mail: mchulkova@sfu-kras.ru

С момента открытия квазикристаллического порядка в твердых телах [1] получено большое количество результатов, связанных с модифицированием различных сплавов квазикристаллами. Модифицирование сплавов приводит к изменению таких свойств как прочность, ползучесть, микротвердость и др. [2]. Много работ посвящены исследованию алюминиевых сплавов, модифицированных квазикристаллическими частицами состава Al-Cu-Fe. В этом случае создается более однородный (гомогенный) переход между матрицей и квазикристаллическими частицами [3], следствием чего является улучшение свойств этих сплавов.

В работе исследуются различные температурные режимы отжига сплава Д16 с добавлением атомов Cu и Fe до обеспечения концентрационного состава существования квазикристаллической (QQ) фазы в соответствии с [4, 5]. Для уменьшения пористости образцов использован метод горячего изостатического прессования (ГИП). Применены различные условия механоактивации исходных порошков сплава Д16, Cu и Fe. Состав фаз полученных образцов контролировался рентгенофазовым анализом. Температуры отжига лежали в диапазоне от температур пластичности Д16  $T=350 - 474^\circ\text{C}$  до зарождения QQ-фазы  $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$  при твердофазном синтезе  $T=600 - 800^\circ\text{C}$  [4-6].

Выполненные исследования фазообразования в сплаве Д16, обогащенного атомами Cu и Fe до концентраций существования QQ-фаз, продемонстрировали возможность образования квазикристаллических фаз  $\text{Al}_{60}\text{Cu}_{30}\text{Fe}_{10}$  и  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$  непосредственно в сплаве. Были найдены требуемые режимы отжига методом ГИП в диапазоне температур от температур пластичности сплава Д16 до температур твердофазного синтеза квазикристаллической фазы  $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ . Образование квазикристаллических фаз возможно как ниже температуры плавления сплава Д16, так и выше этой температуры. Проведение дополнительных отжигов может приводить к образованию квазикристаллической фазы в сплаве, так и к ее разрушению.

## Литература

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett. V.53, P. 1951–1953 (1984)
- [2] T. El Kabir, A. Joulain, V. Gauthier, S. Dubois, J. Bonneville, D. Bertheau, Journal of materials research. T. 23, №. 4, P.904–910 (2008)
- [3] M. Kamalnath, B. Mohan, A. Singh, K. Thirumavalavan, Materials Research Express. T. 7, №. 2, P.026535 (2020)
- [4] П.П. Турчин, А.И. Зайцев, А.Д. Васильев, Н.А. Четверг, А.А. Парфенов, Вестник КрасГУ. №. 1, С. 29–33 (2006)
- [5] L. Nascimento, A. Melnyk, Orbital: The Electronic Journal of Chemistry. P. 155–160 (2019)
- [6] Y. Yokoyama, K. Fukaura, H. Sunada, Materials transactions, JIM. T. 41, №. 6, P. 668–674 (2000)

# ПРОБЛЕМА ВЫБОРА РАСТВОРА-РАСПЛАВА ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{NdGa}_3(\text{VO}_3)_4$

**К.А. Ситников<sup>1\*</sup>, Е.В. Еремин<sup>2</sup>, И.А. Гудим<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Сибирский Федеральный университет, Красноярск, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

\*e-mail: Kirill-55as11@mail.ru

Кристаллы редкоземельных тригональных оксиборатов со структурой хантита ранее изучались как нелинейно-оптические среды, и только в последнее время вызвали интерес как мультиферроики, в частности алюмо-, галло-, ферро- и хромбораты [1]. Кристаллы  $\text{NdGa}_3(\text{VO}_3)_4$  были выращены методом спонтанного зарождения и группового выращивания на затравках.

Для выращивания кристаллов в качестве растворителя использовались вольфрамат лития и тримолибдат висмута. Известно, что в растворе-расплаве на основе тримолибдата висмута, как и при выращивании хромовых боратов, кристаллизуется только моноклинная фаза галлиевых боратов, а при использовании раствора-расплава на основе вольфрамата лития существует диапазон температур, в котором кристаллизуется не моноклинная фаза, а тригональная [0, 0]. Тригональная фаза является высокотемпературной.

Для получения тригональной фазы использовался следующий раствор-расплав 89%  $[\text{Li}_2\text{WO}_4 + 3\text{Nd}_2\text{O}_3 + 0,5\text{B}_2\text{O}_3] + 11\%[\text{NdGa}_3(\text{VO}_3)_4]$ .

Температура насыщения уточнялась  $\pm 2^\circ\text{C}$  с помощью пробных кристаллов, и для данного раствора-расплава она оказалась равной  $980^\circ\text{C}$ .

Полученные кристаллы имели моноклинную структуру, поэтому для повышения температуры в раствор расплав были добавлены оксиды неодима и бора. Но этим был достигнут обратный эффект – получено такое соотношение вольфрамата лития и оксида бора, что температура насыщения раствора-расплава снизилась, а соответственно увеличилась растворимость КОО. В дальнейшем в раствор-расплав добавлялся только оксид неодима, что не способствовало повышению температуры насыщения до нужных величин. Далее, исходя из существования высокотемпературной фазы  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$ , в раствор расплав был добавлен оксид алюминия. Добавление оксида алюминия привело к повышению концентрации компонентов раствора-расплава, а значит и температуры насыщения, что в свою очередь привело к появлению кристаллов.

## Литература

- K.-C. Liang, R.P. Chaudhury, B. Lorenz, Y.Y. Sun, L.N. Bezmaternikh, V.L. Temerov, C.W. Chu, *Physical review B* 83, 180417 (2011).  
I.A. Gudim, N.V. Mikhashenok, A.D. Vasiliev, S.V. Melnikova, M.S. Pavlovskii, S.A. Skorobogatov, A.I. Pankrats, *Journal of Cryst. Growth*, 637-638, 127716 (2024).  
A.I. Pankrats, S.A. Skorobogatov, I.A. Gudim, N.V. Mikhashenok, S.M. Zharkov, G.M. Zeer, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 1010, 178230 (2025).

# СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КЕРАМИКИ $\text{BaTiO}_3$ И $\text{Al}_2\text{O}_3$ , ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ХОЛОДНОГО СПЕКАНИЯ

**И.Д. Акиншин<sup>1\*</sup>, М.В. Корнюшин<sup>1</sup>, А.А. Холодкова<sup>1,2</sup>, Ю.Д. Ивакин<sup>2</sup>, А.В. Смирнов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА - Российский технологический университет», 119454, Москва, Россия

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова», 119991, Москва, Россия

\*email: akinshin@mirea.ru

Холодное спекание (англ. *cold sintering process*) – это способ получения керамики при одноосном давлении прессования (сотни МПа) и температуре до 450 °С в воде или водном растворе активирующей добавки (рис. 1). Метод ХС позволяет получать керамики при температурах обжига на сотни градусов ниже традиционных, либо вовсе без обжига, что позволяет получать керамики с субмикронными зернами и новые композиционные материалы. Впервые данный метод был предложен в 2016 г. [1]. Посредством ХС были получены такие материалы, как  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{K}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{ZrO}_2$  и др. [2]. Отличительными чертами зарубежных исследований являются высокие давления прессования, превышающие 350 МПа, и использование нанопорошков.

Посредством ХС из порошка  $\text{BaTiO}_3$  с размером частиц  $0,58 \pm 0,36$  мкм получен ряд образцов керамики при давлении 220 МПа и температурах от 200 до 400 °С с дополнительным уплотнением, замедляющим выход пара из реактора, и без него. В качестве активирующей добавки был использован порошок  $\text{Ba}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  (16 масс. %). При увеличении температуры с 200 до 400 °С относительная плотность образцов, полученных без доп. уплотнения, увеличилась с 82,0 до 96,6 %, а образцов с доп. уплотнением – с 86,4 до 96,6 %. Наиболее высокими значениями  $\epsilon_r$  обладали образцы, полученные с доп. уплотнением при 300 °С ( $\epsilon_r = 2607$ ,  $\text{tg}\delta = 0,420$ ) и без доп. уплотнения при 400 °С ( $\epsilon_r = 2820$ ,  $\text{tg}\delta = 0,180$ ). Обнаружено, что повышение температуры до 400 °С при доп. уплотнении пресс-формы приводит к аномальному росту зерен и ухудшению диэлектрических свойств ( $\epsilon_r = 2311$ ,  $\text{tg}\delta = 0,236$ ). Полученные образцы  $\text{BaTiO}_3$  сопоставимы по характеристикам с твердофазным  $\text{BaTiO}_3$  [3].

Также из смеси  $\gamma\text{-Al}(\text{OH})_3 + \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O}$  (95, 5 и 20 масс.% соответственно) при давлении 220 МПа, температурах 380, 390, 430 и 450 °С и со временем выдержки от 0 до 30 мин получен ряд образцов керамики с открытой пористостью более 30%. Установлено, что температура обработки влияет на фазовый состав продукта более существенно, чем длительность выдержки. После обработки длительностью 30 мин массовые доли  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  составили: 56% при 380 °С, 89% при 390 °С и 100% при 430 °С и выше. Относительная плотность всех однофазных образцов составила более 50 % при открытой пористости 46–49 %. Для образца, полученного при 450 °С в течение 30 мин, была измерена проницаемость, величина которой составила 5730 л/(м<sup>2</sup>·ч·бар). Таким образом, можно сделать вывод о возможности применения холодноспекенного  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в фильтрационных системах [4].

## Литература

- [1] H. Guo, A. Baker, J. Guo, C.A. Randall, *Journal of the American Ceramic Society*. V. 99, № 11, С. 3489–3507 (2016)
- [2] A. Galotta, V.M. Sglavo, *Journal of the European Ceramic Society*. V. 41, № 16, С. 1–17 (2021)
- [3] М.В. Корнюшин. Дис. ... канд. техн. наук: 2.6.17. (2025)
- [4] А.А. Холодкова, М.В. Корнюшин, А.В. Смирнов, Л.А. Арбанас, А.Н. Хрусталева, В.Е. Базарова, А.В. Шумяцев, С.Ю. Купренко, Ю.Д. Ивакин, Тонкие химические технологии. Т. 19, № 4, С. 337–349 (2024)

# ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА МОНОКРИСТАЛЛОВ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА NI-CO ОКСИБОРАТОВ СО СТРУКТУРАМИ ЛЮДВИГИТА И КОТОИТА

**Е.М. Мошкина<sup>1\*</sup>, М.С. Молокеев<sup>1,2</sup>, С.Н. Софронова<sup>1,3</sup>, Д. Кох<sup>3</sup>, Е.В. Еремин<sup>1</sup>, Л.Н. Безматерных<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского Федерального исследовательского центра КНЦ СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

\*e-mail: ekoles@iph.krasn.ru

Оксибораты  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{BO}_5$  и  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{B}_2\text{O}_6$  со структурами людовигита и котоита, соответственно, были получены с помощью раствор-расплавного метода, как продолженные работы [1]. Исследовалась фазовая диаграмма системы  $\text{Co}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_3$  с последующим добавлением оксида  $\text{Ni}_2\text{O}_3$ . В качестве растворителя была выбрана смесь оксидов  $\text{V}_2\text{O}_3\text{:MoO}_3\text{:Na}_2\text{O:V}_2\text{O}_3$ . Соотношение между компонентами растворителя выбирались в соответствии с желаемой высокотемпературной кристаллизующейся фазой.

В процессе поисковых ростовых исследований особое внимание было уделено проблеме стабилизации разновалентных состояний катионов кобальта (2+ и 3+). В безникелевой системе удалось получить три монокобальтовых соединения: содержащие только катионы кобальта  $\text{Co}^{2+}$  – пироборат  $\text{Co}_2\text{B}_2\text{O}_5$  и котоит  $\text{Co}_3\text{B}_2\text{O}_6$ , а также людовигит  $\text{Co}_3\text{BO}_5$ , содержащий гетеровалентные катионы  $\text{Co}^{2+}$  и  $\text{Co}^{3+}$ . При добавлении оксида никеля в систему удалось получить линейку из твердых растворов  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{B}_2\text{O}_6$  и несколько соединений  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{BO}_5$ . Исследования фазовой диаграммы  $\text{Co}_2\text{O}_3\text{-Ni}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_3$  при фиксированном составе растворителя показали, что при фиксированном валентном составе катионов кобальта, две данные линейки твердых растворов имеют общую точку со стороны людовигитовой системы, относительно которой добавки никеля влияют на кристаллизацию фаз людовигита и котоита. В системе котоита  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{B}_2\text{O}_6$  возможны замещения во всем диапазоне концентраций  $x$ , ввиду существования чистых соединений  $\text{Co}_3\text{B}_2\text{O}_6$  и  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ . Но в людовигитах никелевые катионы могут быть лишь двухвалентными, в связи с чем на фазовой диаграмме  $\text{Co}_2\text{O}_3\text{-Ni}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_3$  существует фазовая граница людовигит-котоит, и, соответственно, критическая концентрация никеля, которая ей соответствует. Химический состав и структура полученных образцов исследованы с помощью метода EDX и порошкового рентгеноструктурного анализа. Проведена магнитная характеристика. Магнитные свойства полученных твердых растворов Co-Ni котоитов и людовигитов проанализированы в зависимости от степени замещения  $x$ .



Рис. 1. Выращенные монокристаллы со структурой людовигита  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{BO}_5$  и котоита  $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{B}_2\text{O}_6$ .

## Литература

[1] S. Sofronova, E. Moshkina, A. Chernyshev et. al., CrystEngComm. Vol. 26, Is. 19. P.2536-2543 (2024).

**ПОСТЕРНАЯ СЕКЦИЯ № 2 (26.06.2025 г.) СФУ (ВРЕМЯ 16:15)**

<b>№</b>	<b>ФИО</b>	<b>Тезисы</b>
2.1	Афимченко Никита Александрович	<u>Афимченко Н.А.</u> , Зильберберг И.Л. Активационные свойства F-центров в реакциях окисления углеводов по данным DFT
2.2	Карева Катерина Валерьевна	<u>Карева К.В.</u> , Вагнер Д.В., Журавлев В.А. Исследование магнитных композитов на основе планарных гексаферритов и МУНТ
2.3	Тонков Дмитрий Николаевич	<u>Тонков Д.Н.</u> , Грозова Н.А., Кобыхно И.А., Гасумянц В.Э. Моделирование проводящих свойств полимерных композитов на основе одностенных углеродных нанотрубок и термопластичного полиуритана
2.4	Суворова Екатерина Витальевна	<u>Суворова Е.В.</u> , Гермов А.Ю. Исследование структурной однородности наночастиц на основе сплавов FeCu с помощью ЯМР и мессбауэровской спектроскопии
2.5	Гамов Александр	Вальков В.В., Злотников А.О., <u>Гамов А.</u> Особенности поведения намагниченности топологического антиферромагнитного изолятора $MnV_2Te_4$ в магнитном поле, обусловленные квантовыми эффектами
2.6	Руль Николай Игоревич	<u>Руль Н.И.</u> , В.В. Романов В.В., Кукушкин С.А., Баграев Н.Т. Диамагнетизм двойниковых слоев переходной области гибридных структур карбида кремния на кремнии
2.7	Курбанова Джума Рамазановна	<u>Курбанова Д.Р.</u> , Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Фазовые переходы и критические свойства антиферромагнитной модели Поттса на ОЦК решетке
2.8	Тестов Дмитрий Сергеевич	<u>Тестов Д.С.</u> , Моржухина С.В., Моржухин А.М. Теплоаккумулирующие материалы на основе $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ : получение и применение
2.9	Уткин Никита Александрович	<u>Уткин Н.А.</u> , Кашникова М.Е., Смольников А.Г., Садыков А.Ф., Пискунов Ю.В., Оглобличев В.В., Казак Н.В. Спектроскопия ямр $^{59}Co$ в магнитоупорядоченной фазе $Co_3VO_5$
2.10	Кашникова Марина Евгеньевна	<u>Кашникова М.Е.</u> , Уткин Н.А., Смольников А.Г., Садыков А.Ф., Пискунов Ю.В., Оглобличев В.В., Казак Н.В. Спектроскопия ЯМР $^{10,11}B$ оксибората $Co_3VO_5$
2.11	Еремин Леонид Аркадьевич	<u>Еремин Л.А.</u> , Мацынин А.А., Балашов Ю.Ю., Комогорцев С.В. Фазы, формирующиеся в двухслойной пленке Sn/Co при нагревании
2.12	Тарасова Анастасия Сергеевна	<u>Тарасова А.С.</u> , Гохфельд Ю.С., Великанов Д.А., Еремин Е.В., Громилов С.А., Кондратьев О.А., Беляева А.О., Казак Н.В. Кристаллическая структура и магнитные свойства оксибората $NiCr(VO_3)_O$
2.13	Никитинский Олег Сергеевич	<u>Никитинский О.С.</u> Эффект Нернста-Эттингсгаузена в полупроводниках на основе Tm-Mn-Se
2.14	Ивлева Елена Викторовна	Толстых Н.А., <u>Ивлева Е.В.</u> , Коротков Л.Н., Чжэнью Ли, Абдулвахидов К.Г. Влияние интенсивной механической обработки на диэлектрический и магнитный отклики субмикронного титаната бария

# АКТИВАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА F-ЦЕНТРОВ В РЕАКЦИЯХ ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ПО ДАННЫМ DFT

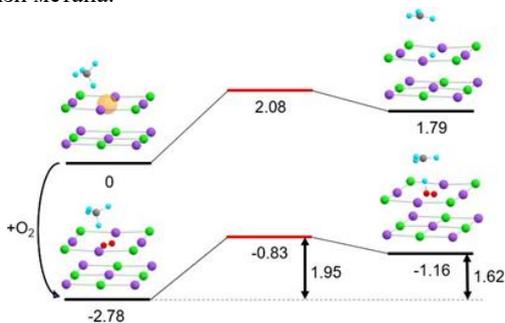
Афимченко Н.А., Зильберберг И.Л.

*ИХТТМ СО РАН, Россия, 630090, Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18  
e-mail: n.afimchenko@solid.nsc.ru*

F-центры представляют собой электрон, захваченный анионной вакансией. Такие центры образуются в ионных кристаллах, при выдержке в парах металла или под действием УФ или рентгеновского излучения. Свободный электрон F-центра представляет интерес как потенциальный каталитический центр химических реакций.

В рамках DFT в базисе плоских волн (пакет VASP) рассмотрено образование F-центра на поверхности NaCl и его способность захватывать и активировать другие молекулы на примере кислорода и метана. Дескрипторами F-центра выбраны появление спиновой плотности в анионной вакансии, положение занятых электронных состояний на DOS и значения полной и парциальной магнетизации. Активность F-центра была рассмотрена в процессе разрыва связи C-H метана (первой стадии окисления) без участия кислорода и с ним. Дескрипторами активности выбраны энергии барьеров и изменение полной энергии в ходе реакции. Полученные энергии были сравнены с энергией разрыва C-H связи метана в газовой фазе.

Адсорбция метана на F-центре энергетически невыгодна. Разрыв C-H связи метана на обычном F-центре требует преодоления барьера 2.08 эВ и имеет полное изменение энергии 1.79 эВ, что меньше энергии связи C-H (4.73 эВ по DFT оценкам, эксп. 4.45 эВ). При участии кислорода, на F-центре образуется супероксидная группа  $O_2^-$  (длина связи O-O 1.36 Å, эксп.  $O_2$  1.26 Å,  $O_2^-$  1.34 Å,  $O_2^{2-}$  1.47 Å), что приводит к локализации неспаренного электрона на  $\pi^*$ -орбитали кислорода и понижению энергии на 2.78 эВ. Дальнейшее окисление метана на  $O_2^-$  приводит к немного меньшему барьеру реакции разрыва C-H связи 1.95 эВ и полному изменению энергии 1.62 эВ. Однако, из-за эффекта стабилизации электрона на пероксидной группе весь процесс имеет полное изменение энергии равное -1.16 эВ. Таким образом, F-центр является активатором молекулярного кислорода, переводя его в супероксидное состояние  $O_2^-$ , которое способно к окислению C-H связи метана.



**Рис. 2** Рассчитанный в DFT профиль потенциальной энергии в реакции разрыва C-H связи метана на F-центре без участия кислорода и с ним. Энергия приведена в эВ.

Na – фиолетовый, Cl – зеленый, C – серый, H – голубой, O – красный, F-центр – оранжевый.

Вычисления выполнены с использованием ресурсов ЦКП ССКЦ ИВМиМГ СО РАН.

# ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПЛАНАРНЫХ ГЕКСАФЕРРИТОВ И МУНТ

**К. В. Карева\*, Д. В. Вагнер, В. А. Журавлев**

*Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия*

\*e-mail: katkareva1@gmail.com

Ферриты в зависимости от магнитных свойств, таких как намагниченность, коэрцитивная сила, поля магнитокристаллической анизотропии, магнитная проницаемость, температура Кюри, могут использоваться как в устройствах магнитной записи и постоянных магнитах [1], так и для фильтрации загрязнений в воде [2], катализаторов [3] и др. В радиотехнике ферриты часто применяются как материал для изготовления пассивных радиоэлементов [4] и поглощающих электромагнитное излучение покрытий или экранов [5].

В данной работе исследовались радиопоглощающие композиты, изготовленные из гексаферритов Y-типа  $\text{Ba}_2\text{NiCuFe}_{12}\text{O}_{22}$ , Z-типа  $\text{Ba}_3\text{Co}_{2,4}\text{Ti}_{0,4}\text{Fe}_{23,2}\text{O}_{41}$  и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). Данные гексаферриты были выбраны, так как вплоть до достижения температуры Кюри они сохраняют один тип магнитокристаллической анизотропии – плоскость легкого намагничивания. Композит 1 содержал 75 мас. % NiCu-Y, 0,3 мас. % МУНТ и 24,7 мас. % эпоксидного клея, композит 2 – 75 мас. %  $\text{Co}_{2,4}\text{Ti}_{0,4}\text{Z}$ , 0,3 мас. % МУНТ и 24,7 мас. % эпоксидного клея. Композиты изготавливали под воздействием внешнего магнитного поля величиной 2 кЭ для создания магнитной текстуры. МУНТ добавляли для внесения дополнительных диэлектрических потерь в композиты. Исследовано влияние МУНТ на спектры комплексной магнитной проницаемости (КМП) и степень магнитной текстуры композитов.

Методом рентгеновской дифракции было подтверждено формирование магнитной текстуры: на дифрактограммах наблюдалось перераспределение интенсивности пиков отражения, а также снижение степени магнитной текстуры  $f$  при внесении МУНТ в состав композита. Оценка проводилась в соответствии с методом, предложенным в [6]. Для композита на основе  $\text{Ba}_2\text{NiCuFe}_{12}\text{O}_{22}$   $f$  составила 0,86 и 0,68, для композитов на основе  $\text{Ba}_3\text{Co}_{2,4}\text{Ti}_{0,4}\text{Fe}_{23,2}\text{O}_{41}$  – 0,73 и 0,61 для составов без и с МУНТ, соответственно.

Спектры КМП вычислялись модифицированным методом Бейкера-Джарвиса [7] на основе измеренных S-параметров в частотном диапазоне от 10 МГц до 18 ГГц. Магнитное текстурование композитов приводит к увеличению значений действительной части магнитной проницаемости  $\mu'$  в диапазоне частот от 10 МГц до 1 ГГц. На зависимостях мнимой части магнитной проницаемости  $\mu''$  композитов наблюдались области дисперсии, обусловленные резонансом доменных границ и естественным ферромагнитным резонансом [1]. Текстурования композитов в магнитном поле привело к увеличению максимумов пиков  $\mu''$  относительно нетекстурованных композитов. Добавление МУНТ в состав магнитнотекстурованных композитов снизило пиковые значения  $\mu''$  на 9 % и 15 % для композитов на основе гексаферритов  $\text{Ba}_2\text{NiCuFe}_{12}\text{O}_{22}$  и  $\text{Ba}_3\text{Co}_{2,4}\text{Ti}_{0,4}\text{Fe}_{23,2}\text{O}_{41}$ , соответственно.

## Литература

- [1] Смит Я., Х. Вейн. Ферриты. М.: Издательство иностранной литературы, 1962. 501 с.
- [2] S. Debnath, R. Das, *Ceramics International*. V. 49, P.16199-16215 (2023)
- [3] N. Maji, H. S. Dosanjh, *Magnetochemistry*. V. 9, 156 (2023)
- [4] S. Balci, I. Sefa, N. Altin. *Journal of Electronic Materials*. V. 45, № 8, P. 3811-3821 (2016)
- [5] D.V. Wagner, V.A. Zhuravlev, K.V. Kareva, K.I. Baskakova, O.A. Dotsenko, A.S. Suraev, *Journal of Alloys and Compounds*, V. 977, 173437 (2024)
- [6] F.K. Lotgering, *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. V. 9, № 2, P. 113-123 (1959)
- [7] K. Chalapat, K. Sarvala, J. Li, G.S. Paraoanu, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. V. 57, P. 2257-2267 (2009)

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ТЕРМОПЛАСТИЧНОГО ПОЛИУРИТАНА

**Д.Н. Тонков<sup>1</sup>, Н.А. Грозова<sup>1</sup>, И.А. Кобычно<sup>1</sup>, В.Э. Гасумянц<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

<sup>2</sup> Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

\*e-mail: wtk\_dima@mail.ru

С момента открытия углеродных нанотрубок (УНТ) прошло около 40 лет, однако с каждым годом число публикаций, посвященных исследованию тех или иных физических свойств УНТ только растет [1]. Особый интерес представляют композиционные материалы с УНТ в качестве проводящего наполнителя, внедренного в полимерную матрицу, так как они обладают низким порогом перколяции и уникальными механическими свойствами [2]. Поэтому моделирование проводящих свойств таких композитов имеет большое значение с точки зрения изучения возможностей их последующего применения для изготовления элементов гибкой электроники.

В данной работе синтезированы полимерные композиты на основе УНТ и термопластичного полиуритана (TPU) и измерена зависимость их удельного сопротивления при комнатной температуре,  $\rho_{300}$ , от массовой доли УНТ, варьируемой в диапазоне 0.1–1.0 масс.%. Обнаружено, что значение  $\rho_{300}$  сильно возрастает при уменьшении содержания УНТ, что свидетельствует о том, что в исследованном диапазоне концентраций УНТ в композите реализуется прыжковый механизм проводимости. Далее проведено моделирование полученной зависимости на основе модели, описанной в [3]. Моделирование происходит следующим образом: задается длина и радиус нанотрубки, количество сегментов, из которых состоит нанотрубка, максимальный угол поворота одного сегмента УНТ относительно другого,  $\theta_{\max}$ , и количество УНТ в расчетной области композита. На основе этих параметров генерируются координаты сегментов нанотрубок с углами поворота, статистически варьируемыми в диапазоне  $\theta = 0 - \theta_{\max}$  и на основе полученного пространственного распределения нанотрубок определяются типы контактов между двумя соседними нанотрубками (непосредственный или туннельный). На основе полученных данных моделируется сетка сопротивлений, методом сопряженного градиента решается система уравнений, составленных по правилам Кирхгофа, и определяется сопротивление расчетной области композита, а затем и удельное сопротивление всего образца. По результатам проведенного моделирования обнаружено, что при концентрациях УНТ  $\leq 0.75$  масс.% полученная в эксперименте зависимость наилучшим образом описывается при  $\theta_{\max} \approx 30^\circ$ , а при более высоких концентрациях происходит увеличение значения максимального угла поворота сегментов УНТ. Это соответствует данным, полученным ранее для композитов на основе УНТ и бутадиен-стирольного каучука [4] и указывает на то, что пространственное распределение УНТ в композите не зависит от типа полимерной матрицы. Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого ([www.spbstu.ru](http://www.spbstu.ru)).

## Литература

- [1] M.R. Predtechenskiy, A.A. Khasin, A.E. Bezrodny et al., Carbon Trends, V. 8, P. 100175 (2022)
- [2] Z. Spitalsky, D. Tasis, K. Papagelis, C. Galiotis, Progress in Polymer Science, V. 35, N 3, P. 357-401 (2010)
- [3] S.-M. Jung, H. Choi, F.-C. Mocanu et al., Scientific Reports, V. 9, P. 20376 (2019)
- [4] D. Tonkov, E. Vasilyeva, O. Tolochko, V. Gasumyants, 2024 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). P. 410-413 (2024)

# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ ОДНОРОДНОСТИ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ СПЛАВОВ FeCu С ПОМОЩЬЮ ЯМР И МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**Е.В. Суворкова\*, А.Ю. Гермов**

*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, 620108, Екатеринбург, Россия*

\*e-mail: e.v.suvorkova@mail.ru

Интерес к изучению сплавов FeCu обусловлен их уникальными функциональными свойствами и перспективами практического применения, однако синтез данных сплавов осложняется ограниченной взаимной растворимостью компонентов Fe и Cu [1]. Тем не менее, в работе [2] методом ЯМР (ядерный магнитный резонанс) было установлено, что в многослойных структурах Fe/Cu возникает осциллирующая спиновая поляризация меди, свидетельствующая о значительном межкомпонентном взаимодействии в наномасштабе, что стало основанием для проверки возможности формирования гомогенного сплава в наночастицах FeCu. Помимо этого, в прошлых исследованиях наночастиц FeCo@C, полученных методом газофазного синтеза [3], температурный отжиг позволил получить сплавы с высокой степенью однородности состава [4]. В связи с этим в настоящей работе была предпринята попытка применения аналогичного подхода к получению однородных наночастиц FeCu.

Для исследования возможности получения сплавов FeCu в наносостоянии, а также проверки эффективности использования комбинации методов ЯМР и мессбауэровской спектроскопии для определения фазового состава, были исследованы порошковые наночастицы  $Fe_xCu_{1-x}$  ( $x = 0.36 - 0.85$ ), полученные при помощи газофазного синтеза [3] аналогичным образом. В работе рассматривалось два типа образцов: наночастицы с размером  $d = 6$  нм, покрытые углеродной оболочкой, и более крупные частицы ( $d = 38$  нм) в естественной оксидной оболочке.

Спектры ЯМР  $^{63}Cu$  наночастиц в оксидной и углеродной оболочке схожи и, судя по значению химического сдвига, относятся к металлической меди. По наличию квадрупольного расщепления можно сказать, что твердый раствор медь-железо до некоторой концентрации образуется, однако это не исключает наличие фазового расслоения.

Мессбауэровские спектры  $^{57}Fe$  свидетельствуют о большой доле ферромагнитной фазы  $\alpha$ -Fe, а также о нахождении атомов железа в решетке меди. Это частично согласуется с данными намагниченности. Сильное уширение секстетов в сторону меньших полей можно отнести к твердому раствору меди в железе, либо к ферромагнитному состоянию частиц вблизи точки блокировки. В наночастицах с углеродной оболочкой FeCu@C обнаружено присутствие карбидов железа. Аналогичные фазы наблюдаются и в системе Fe@C [5], что также подтверждает неоднородность состава.

Комплексный анализ методами резонансной спектроскопии показал, что полученные наночастицы обладают неоднородной структурой, содержащей отдельные фазы железа с включениями меди и наоборот. Газофазный синтез в данных условиях не обеспечивает образования гомогенных наночастиц, а последующий отжиг при  $400^\circ C$  приводит лишь к большому расслоению на фазы  $\alpha$ -Fe и Cu.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

## Литература

- [1] A.H. Alami, A.A. Hawili, Applied Surface Science Advances. V. 1, P. 100027 (2020)
- [2] Q.Y. Jin et al., Journal of magnetism and magnetic materials. V. 126, P. 285-287 (1993)
- [3] V.A. Tsurin et al., Physics of the Solid State. V. 56, P. 287 (2014)
- [4] A.Yu. Germov et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials. V. 588, P. 171391 (2023)
- [5] A.Yu. Germov et al., Materials Today Communications. V. 27, P. 102382 (2021)

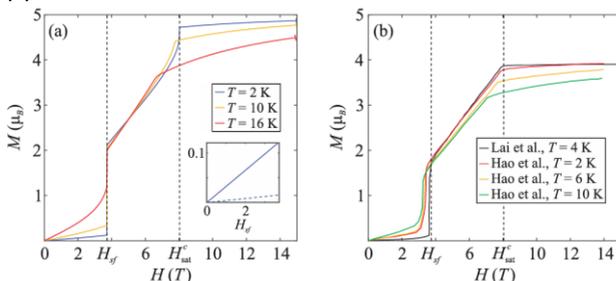
# ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ИЗОЛЯТОРА $MnBi_2Te_4$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ КВАНТОВЫМИ ЭФФЕКТАМИ

В.В. Вальков<sup>1</sup>, А.О. Злотников<sup>1</sup>, А. Гамов<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия  
\*agamow96@gmail.com

Из экспериментальных исследований топологического изолятора  $MnBi_2Te_4$  в магнитном поле, ориентированном вдоль тригональной оси кристалла, при температурах, много меньших температуры Нееля, известно, что возрастание магнитного поля от нуля до поля спин-флоп перехода сопровождается монотонным увеличением намагниченности [1, 2] (см. рис. 1 б). Такое поведение противоречит феноменологической теории [2-4], предсказывающей нулевую намагниченность в отмеченных областях температуры и магнитного поля.

В этой связи, в работе в рамках эффективного гамильтониана, описывающего магнитную подсистему топологического изолятора  $MnBi_2Te_4$  и учитывающего анизотропию, получены аналитический вид выражений, определяющих поле спин-флоп перехода и поле насыщения при учете ренормировки, обусловленной наличием тригональной компоненты одноионной анизотропии (ТКОА). С помощью данных выражений определены обменные параметры и параметры анизотропии, приводящие к экспериментально наблюдаемым величинам критических полей и температуры Нееля. Показано, что аномальное возрастание намагниченности материала до спин-флоп перехода, а также после него в фазе «схлопнутых» подрешеток (см. рис. 1 а) связано именно с вкладами от квантовых эффектов, обусловленных ТКОА. При этом с ростом магнитного поля в фазе «схлопнутых» подрешеток можно наблюдать подавление эффектов ТКОА.



**Рис. 1.** (а) – Теоретическая полевая зависимость намагниченности при температурах  $T = 2, 10, 16$  К и приложенном вдоль оси  $Oz$  поле  $H$ . На вставке сплошной линией показана зависимость для  $T = 2$  К при учете ТКОА, штриховой линией – без учета ТКОА. (б) – Экспериментальные зависимости для  $MnBi_2Te_4$  из работ [1,2] при температурах  $T = 2, 4, 6, 10$  К.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №23-22-10021 и Красноярского краевого фонда науки. Гамов А. также благодарит за поддержку фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

## Литература

- [1] Y.-J. Hao et al., Phys. Rev. X, V. 9, P. 041038 (2019).
- [2] Y. Lai et al., Phys. Rev. B, V. 103, P. 184429 (2021).
- [3] B. Li et al., Phys. Rev. Lett., V. 124, P. 167204 (2020).
- [4] Y. Li et al., Phys. Rev. B, V. 100, P. 134438 (2019).

# ДИАМАГНЕТИЗМ ДВОЙНИКОВЫХ СЛОЕВ ПЕРЕХОДНОЙ ОБЛАСТИ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУР КАРБИДА КРЕМНИЯ НА КРЕМНИИ

Н.И. Руль<sup>1,2,3\*</sup>, В.В. Романов<sup>1</sup>, С.А. Кукушкин<sup>2</sup>, Н.Т. Баграев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Институт проблем машиноведения РАН, 199178, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup>Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия

\*e-mail: rul\_ni@spbstu.ru

Граница раздела, формирующаяся в процессе роста наноразмерного слоя карбида кремния на поверхности кристаллического кремния, демонстрирует яркие магнитные свойства, зависящие от времени формирования гибридной структуры и определяющие возможность её практического применения [1, 2]. Этот эффект был, до некоторой степени неожиданно, обнаружен при анализе результатов измерения магнитной восприимчивости образцов гибридных структур SiC/Si на поверхности кристаллического Si n- и p-типа.

В работе представлены результаты измерения статической магнитной восприимчивости гибридных структур SiC/Si, синтезированных методом MCSA [3] при различных временах роста. Установлено, что при комнатной температуре диамагнетизм исследованных гибридных структур, более чем на порядок превышающий диамагнитный отклик пиролитического графита, обусловлен переходной областью границы раздела SiC/Si, содержащий двойниковые упорядоченные слои, параллельные границе раздела. При этом число двойниковых слоев переходных областей SiC, выращенных на подложках Si n- и p-типов проводимости меняется антисимметрично в зависимости от времени синтеза, что находит свое отражение в магнитных характеристиках исследуемых гибридных структур.

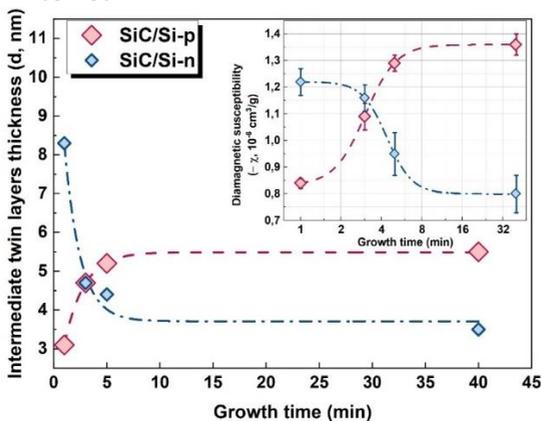


Рис. 1. Зависимости толщин двойниковых слоев переходной области, построенных по данным электронной просвечивающей микроскопии высокого разрешения, и зависимости магнитной восприимчивости образцов SiC/Si, выращенных на Si (111) от времени их синтеза.

## Литература

- [1] F. Li, F. Roccaforte, G. Greco et al., *Materials*. V. 14, №. 19, (2021)
- [2] M. Spreitzer, D. Klement, T. Parkelj Potocnik et al., *APL Materials*. V. 9, №. 4, P. 040701 (2021)
- [3] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, *Russian Journal of General Chemistry*. V. 92, №. 4, P. 584-610 (2022)

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ОЦК РЕШЕТКЕ

**Д.Р. Курбанова\***, **А.К. Мургазаев**, **М.А. Магомедов**, **М.К. Рамазанов**

*Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

\*d\_kurbanova1990@mail.ru

Порядок фазового перехода в модели Поттса зависит от пространственной размерности и числа состояний спина  $q$ . Фазовые переходы в антиферромагнитных моделях Поттса более сложны, поскольку сильно зависят от микроструктуры решетки. Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Одним из физических примеров является спиновое стекло. Стекла Поттса обычно используют для описания большого класса анизотропных ориентационных стекол [1].

В настоящей работе на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло нами исследовано влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы и критические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q=3$  на объемно-центрированной кубической решетке. Гамильтониан модели:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \delta(S_i, S_j) - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \delta(S_i, S_k)$$

где  $S_i = 1, 2, \dots, q$  может находиться в различных состояниях  $q$ ,  $J_1$  и  $J_2$  – параметры обменных взаимодействий первых ( $J_1 = -1$ ) и вторых ( $J_2 < 0$ ) ближайших соседей. Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами  $2 \times L \times L \times L = N$ ,  $L = 8 \div 60$ . Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $J_2$ . На диаграмме наблюдаются несколько различных фаз (рис. 1): фаза с нарушенной подрешеточной симметрией (BSS), упорядоченная фаза с перестановочно-симметричным состоянием (PSS), фаза с нарушенной подрешеточной симметрией другого типа (BSS1) и парамагнитная (PM), все они встречаются в мультикритической точке ( $T_N = 1.320(5)$ ,  $J_2 = -2/3$ ). Установлено, что конкуренция обменных взаимодействий в диапазоне  $-2/3 < J_2 < 0$  приводит к фазовому расщеплению и смене типа фазового перехода.

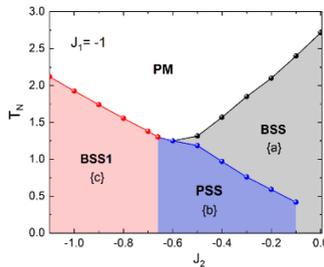


Рис. 1. Фазовая диаграмма трехвершинной модели Поттса на ОЦК решетке при  $J_1 = -1$  и  $J_2 < 0$ . Температура приведена в единицах  $J_1/k_B$ . Все фазовые переходы первого порядка, за исключением BSS-PM перехода, который является непрерывным.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 25-12-20029, <https://rscf.ru/project/25-12-20029/>

## Литература

[1] F.Y. Wu, The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982) 235.

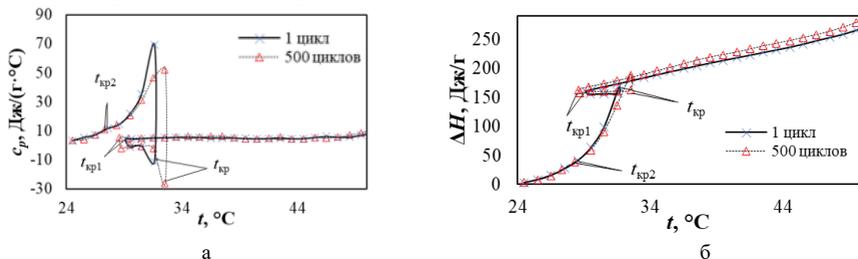
# ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ : ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ

Д.С. Тестов\*, С.В. Моржухина, А.М. Моржухин

Государственный университет «Дубна, 141980, Дубна, РФ

\*dimal3-1994@yandex.ru

Кристаллогидрат  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  является перспективным для создания теплоаккумулирующих материалов (ТАМ), что подтверждено рядом исследований [1, 2]. Однако, из-за высокого переохлаждения, достигающего  $16^\circ C$ , его использование без добавок затруднено. В качестве таких добавок в настоящем исследовании использованы гидрофилизированный графит (EGгидр), карбоксиметиллцеллюлоза (КМЦ), оксид цинка  $ZnO$ , а также  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ , выбранный в качестве основного зародышеобразователя из-за схожести кристаллических решеток двух кристаллогидратов. На примере одного из составов на рисунке 1 приведены зависимости теплоемкости и энтальпии от температуры, построенные по кривым охлаждения исходного и термоциклированного при 500 циклах образца.



**Рис. 1.** Зависимости теплоемкости (а) и энтальпии (б) от температуры состава (95%  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  + 5%  $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ) + 1% EGгидр + 1% КМЦ

Расчет физико-химических свойств образца проводился методом термической задержки (метод  $M$ ). После термоциклирования переохлаждение повышается с  $3.3$  до  $4.6^\circ C$  при температуре среды  $t_{окр} = 23.5^\circ C$ . Время аккумуляции  $\tau$  снижается с  $79$  до  $67$  минут. Теплоты кристаллизации  $\Delta H_{кр}$  образцов сходятся в пределах  $5\%$ -ной погрешности и составляют  $132.3 \pm 6.6$  и  $138.3 \pm 6.9$  Дж/г до и после термоциклирования соответственно, а с учетом вклада теплоемкости при переохлаждении теплоты при фазовом переходе равны  $146.0 \pm 7.3$  и  $158.9 \pm 7.9$  Дж/г.  $\Delta H_{пл}$  до и после термоциклирования составляет  $147.4 \pm 4.4$  и  $130.6 \pm 3.9$  Дж/г соответственно, что ниже, чем теплота при кристаллизации. Это вызвано высокой скоростью нагрева в методе ДСК и сложностями использования данного метода при изучении фазовых переходных материалов [3]. Суммарные теплоты выравниваются к при  $50^\circ C$  и составляют  $263.1$  и  $275.4$  Дж/г до и после термоциклирования соответственно (рисунок 1б).

## Литература

- [1] Kumar N., Banerjee D., Chavez Jr R. Exploring additives for improving the reliability of zinc nitrate hexahydrate as a phase change material (PCM). Journal of Energy Storage. V. 20. Pp. 153-162 (2018)
- [2] Д.С. Тестов, С.В. Моржухина, В.Р. Гашимова и др. Получение и исследование физико-химических свойств фазовых переходных теплоаккумулирующих материалов на основе гексагидрата нитрата цинка. Журнал физической химии. Т. 98. № 2. С. 11-27 (2024)
- [3] Mehling H., Ebert H. P., Schossig P. Development of standards for materials testing and quality control of PCM. 7th IIR Conference on Phase Change Materials and Slurries for Refrigeration and Air Conditioning. P. 8. (2006)

# СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР $^{59}\text{Co}$ В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННОЙ ФАЗЕ $\text{Co}_3\text{VO}_5$

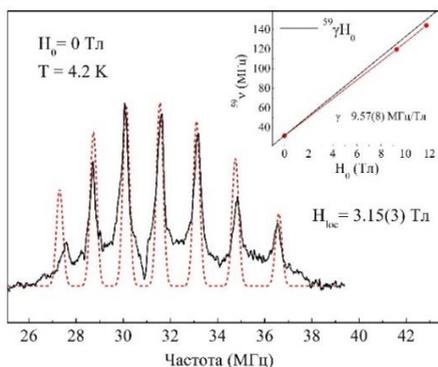
Н. А. Уткин<sup>1</sup>, М. Е. Кашникова<sup>1</sup>, А. Г. Смольников<sup>1\*</sup>, А. Ф. Садыков<sup>1</sup>,  
Ю. В. Пискунов<sup>1</sup>, В. В. Оглобличев<sup>1</sup>, Н. В. Казак<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, 620108, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: Smolnikov@imp.uran.ru

Впервые получены данные о локальном зарядовом и магнитном окружении ядер  $^{59}\text{Co}$  в структуре гомометаллического оксибората  $\text{Co}_3\text{VO}_5$  с использованием спектроскопии ЯМР. Спектры ЯМР  $^{59}\text{Co}$  были зарегистрированы при температурах ниже точки ферромагнитного перехода ( $T_N = 42 \text{ K}$ ) [1] в магнитных полях от 0 до 11.7 Тл. На рис. 1 представлен спектр ЯМР, полученный при температуре жидкого гелия ( $T = 4.2 \text{ K}$ ) без внешнего магнитного поля ( $H_0 = 0 \text{ Tl}$ ). На спектре четко видны семь максимумов, соответствующих числу переходов ( $2I$ ) для ядерного спина кобальта  $^{59}I = 7/2$ , что позволяет ассоциировать линию с сигналом от ядер одного из четырех ионов в составе исследуемого соединения.



**Рис. 1.** Спектр ЯМР  $^{59}\text{Co}$  в  $\text{Co}_3\text{VO}_5$  в локальном поле при  $T = 4.2 \text{ K}$ . Красная пунктирная линия – результат аппроксимации [2]. На вставке - зависимость резонансной частоты  $^{59}\text{Co}$  от величины внешнего магнитного поля  $H_0$

Полученный экспериментальный спектр хорошо моделируется при значениях локального магнитного поля  $H_{\text{loc}} = 3.15 \text{ Tl}$  и с учетом возможного взаимодействия квадрупольного момента ядра кобальта с градиентом электрического поля. Согласно данным порошковой нейтронной дифракции в  $\text{Co}_3\text{VO}_5$  ионы  $\text{Co}^{2+}$  находятся в высокоспиновом (HS) состоянии с магнитными моментами от  $3.1 \mu_B$  до  $3.8 \mu_B$  [1]. При этом, магнитный момент ионов  $\text{Co}^{3+}$  сильно подавлен (LS) и имеет значения  $0.5 \mu_B$ . Полученное нами значение локального магнитного поля подтверждает наличие в исследуемой системе  $\text{Co}^{3+}(\text{LS})$  состояний.

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

## Литература

- [1] D.C. Freitas, C.P.C Medrano, D.R. Sanchez [et al.]. Physical Review B. V. 94, № 17, P.174409 (2016)
- [2] А. П. Герашенко, З. Н. Волкова, А. Ф. Садыков, А. Г. Смольников, Ю. В. Пискунов, К. Н. Михалев. ЖЭТФ. V. 167, № 4, С. 553-570 (2025)

# СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР <sup>10,11</sup>В ОКСИБОРАТА СО<sub>3</sub>ВО<sub>5</sub>

М. Е. Кашникова<sup>1</sup>, Н. А. Уткин<sup>1</sup>, А. Г. Смольников<sup>1\*</sup>, А. Ф. Садыков<sup>1</sup>,  
Ю. В. Пискунов<sup>1</sup>, В. В. Оглобличев<sup>1</sup>, Н. В. Казак<sup>2</sup>

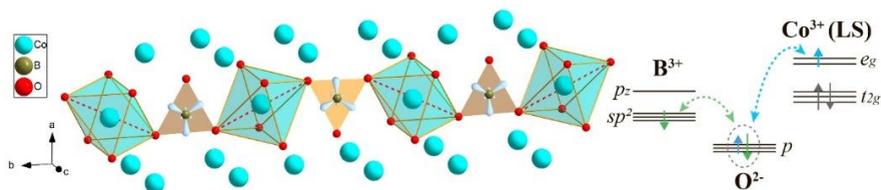
<sup>1</sup> Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, 620108,  
Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036,  
Красноярск, Россия

\* e-mail: Smolnikov@imp.uran.ru

Впервые получены данные о локальном зарядовом и магнитном окружении ядер <sup>10,11</sup>В в структуре гомометаллического оксобората Со<sub>3</sub>Во<sub>5</sub> с использованием спектроскопии ЯМР. Данные получены в области температур парамагнитного состояния образца в магнитных полях до 117 кЭ. Получены параметры тензора градиента электрического поля и сверхтонкие поля на позициях ядер иона В<sup>3+</sup>. Данные указывают на наличие суперобменных взаимодействий в цепочках Со – О – В, которые наиболее вероятно происходят с участием *sp*<sup>2</sup>-гибридизованных орбиталей иона В<sup>3+</sup>. Предложена модель суперобмена с участием свободных *e<sub>g</sub>*-орбиталей иона Со<sup>3+</sup>, находящегося в низкоспиновом (LS) состоянии 3*d*<sup>6</sup> (Рис.1).

Таким образом, вдоль оси *b* кристалла возможно выстраивание длинных связанных суперобменными взаимодействиями цепочек Со – О – В. Такое направление перпендикулярно цепочкам из кислородных октаэдров СоО<sub>6</sub>, выстроенных вдоль кристаллографической оси *c* и связанных более сильными обменными взаимодействиями [1]. Суперобменное взаимодействие Со – О – В может играть важную роль в системе Со<sub>3</sub>Во<sub>5</sub> как при формировании дальнего магнитного порядка при низких температурах [2, 3], так и в механизме спинового кроссовера при температурах значительно выше комнатных [4].



**Рис. 1.** Слева – фрагмент кристаллической структуры Со<sub>3</sub>Во<sub>5</sub> с взаимным расположением структурных блоков октаэдров СоО<sub>6</sub> и треугольников Во<sub>3</sub>. В центре Во<sub>3</sub> схематично изображена пространственная ориентация *sp*<sub>2</sub>-гибридизованных орбиталей иона В<sup>3+</sup>. Справа – схема предлагаемой модели суперобменного взаимодействия в цепочках Со – О – В.

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

## Литература

- Y. V. Knyazev, N. V. Kazak, I. I. Nazarenko et al. Journal of Magnetism and Magnetic Materials. V. 474, pp. 493-500 (2019)
- D. C. Freitas, M. A. Continentino, R. B. Guimarães et al. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. V. 77, №. 18, pp. 184422 (2008)
- D. C. Freitas, C. P. C. Medrano, D. R. Sanchez et al. Physical Review B. V. 94, №. 17, pp. 174409 (2016)
- N. V. Kazak, M.S. Platonov, Y. V. Knyazev et al. Physical Review B. V. 103, №. 9, pp. 094445 (2021)

# ФАЗЫ, ФОРМИРУЮЩИЕСЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ ПЛЕНКЕ Sn/Co ПРИ НАГРЕВАНИИ

Еремин Л.А.<sup>1\*</sup>, Мацынин А.А.<sup>1,2</sup>, Балашов<sup>1</sup> Ю.Ю. Комогорцев С.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского, 660041, Красноярск, Российская Федерация

<sup>2</sup> Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф.

Решетнева, Красноярск, Россия

\*e-mail: leonidereminw@gmail.com

Структуры и фазы, образующиеся в тонкопленочных системах Sn/Co, представляют интерес как с точки зрения твердофазной химии, так и благодаря их применимости в качестве бессвинцовых припоев и материалов для металлизации в электронных устройствах [1,2]. Другим практическим применением таких систем являются контакты электродов литий ионных батарей [3].

В работе исследовались тонкопленочные образцы Sn/Co, изготовленные на подложках из стекла, ситалла и MgO, методом термического испарения в вакууме. Образцы отжигались в вакууме порядка  $10^{-6}$  Торр с шагом в  $100^\circ$ , время отжига 1ч, в диапазоне температур от комнатной до  $1000^\circ\text{C}$ . На каждом шаге отжига проводился рентгеноструктурный анализ состава образцов, а также исследование изменения константы анизотропии и намагниченности образцов. Также для образцов, изготовленных на подложках из ситалла была снята и исследована зависимость сопротивления от температуры.

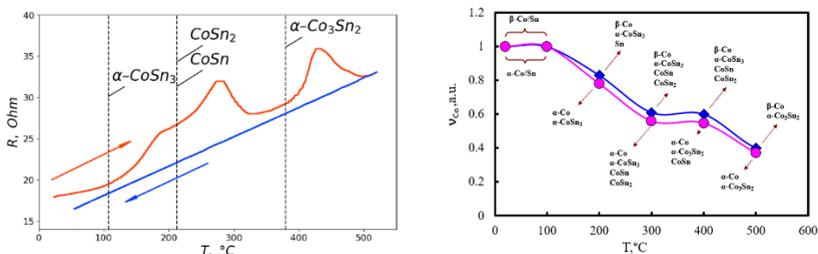


Рис. 3. А – Зависимость электрического сопротивления образца от температуры; В – изменение первой константы анизотропии и намагниченности насыщения от температуры отжига.

Исходя из результатов эксперимента были определены фазовая последовательность и критические температуры в тонкопленочной системе Sn/Co:



Температура инициирования реакции составила  $T_i=110^\circ\text{C}$ . Намагниченность насыщения и первой константа перпендикулярной магнитной анизотропии уменьшаются с увеличением температуры отжига, что связано с уменьшением доли свободного кобальта в системе.

## Литература

- [1] V.A. Baheti, Phase evolutions and growth kinetics in the Co–Sn system. *SN Appl Sci.* 1(2), 185 (2019). <https://doi.org/10.1007/s42452-019-0207-z>.
- [2] C. Wang, Chen S. Sn/Co solid/solid interfacial reactions. *Intermetallics (Barking)*. 16(4), 524–530 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2007.12.017>.
- [3] V. Milanova et al. Morphology of intermetallic (Co–Sn, Ni–Sn) nanoparticles, electrochemically tested as electrodes in li-ion battery. *Journal of Chemical Technology and Metallurgy*. 52(3), 542–556 (2017).

# КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИБОРАТА $NiCr(BO_3)O$

**А.С. Тарасова<sup>1\*</sup>, Ю.С. Гохфельд<sup>1</sup>, Д.А. Великанов<sup>1</sup>, Е.В.Еремин<sup>1</sup>, С.А. Громилов<sup>2</sup>, О.А. Кондратьев<sup>3</sup>, А.О. Беляева<sup>3</sup>, Н.В. Казак<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup> Национальный Исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

\*e-mail: black.tao2002@gmail.com

Методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава впервые выращены монокристаллы оксибората  $NiCr(BO_3)O$ , которые представляли собой прозрачные призмы зеленого цвета, сильно вытянутые вдоль одного из направлений (рис.1). Атомное отношение  $Ni:Cr = 0.92:1.00$ , полученное из измерений рентгено-флуоресцентного анализа (M4 TORNADO X-ray spectrometer, Bruker), подтверждает стехиометрию образца.

Исследование кристаллической структуры выполнено при температурах 100 и 300 К с использованием монокристалльного дифрактометра BRUKER X8 (MoK $\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор, CCD-детектор ApexII). Соединение обладает ромбической симметрией, пространственная группа  $Pnma$  (№62), параметры решетки при T = 300 К  $a = 9.0908 \text{ \AA}$ ,  $b = 3.0507(4) \text{ \AA}$ ,  $c = 9.3438(13) \text{ \AA}$ . При охлаждении фазовых переходов не обнаружено. Атомы  $Ni$  и  $Cr$  распределены по двум кристаллографически неэквивалентным октаэдрическим позициям M1 (4c) и M2 (4c). Проведены измерения намагниченности в поле  $H = 1 \text{ кЭ}$  в интервале  $T = 4.2 - 300 \text{ К}$  (PPMS, Quantum Design), типичные размеры монокристалла  $1.0 \times 0.1 \times 0.1 \text{ мм}^3$ . Дивергенция кривых намагниченности, измеренных в режимах FC и ZFC, может указывать на формирование состояния спинового стекла при низких температурах (рис. 1). FC и ZFC соответствуют режиму охлаждения во внешнем магнитном поле и в отсутствии поля, соответственно. Магнитокристаллическая анизотропия проявляется в увеличенном магнитном моменте вдоль  $c$ -оси. Впервые определены параметры магнитной подсистемы и установлена температура магнитного перехода  $\sim 46 \text{ К}$ , которая является рекордно высокой среди известных изоструктурных магнетиков.

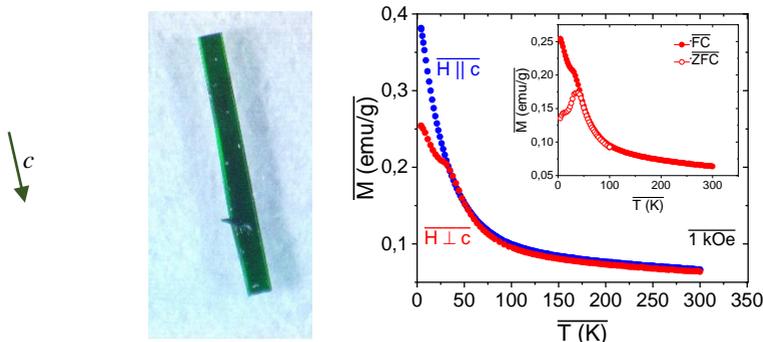


Рис. 1 – Фото монокристалла  $NiCr(BO_3)O$  (слева) и температурные зависимости намагниченности  $NiCr(BO_3)O$  (справа), измеренные в двух направлениях  $H \perp c$ ,  $H \parallel c$ . Вставка: FC и ZFC намагниченности для  $H \parallel c$ , ( $H = 1 \text{ кЭ}$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта 24-12-20012.

# ЭФФЕКТ НЕРНСТА-ЭТТИНГСГАУЗЕНА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ НА ОСНОВЕ ТМ-MN-SE

**О. С. Никитинский**

Сибирский государственный университет науки и технологий имени М.Ф. Решетнева, Российской Федерация, 660037, г. Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31  
\*e-mail: onikitinsky@yandex.ru

Диффузия носителей тока под действием градиента температур приведет к разности потенциалов, которую можно варьировать магнитным полем. Продольный эффект Нернста-Эттингсгаузена (НЭ) заключается в изменении термоэдс полупроводников под действием магнитного поля [1]. Появление разности потенциалов вдоль и поперек градиента температур наблюдается в композитных материалах, содержащих соединения с пьезоэффектом, например, в графене на подложке GaAs [2].

Найден диапазон температур с экстремальными значениями НЭ. В области концентраций протекания ионов тулия по решетке коэффициент термоэдс имеет положительное значение и достигает максимального значения при 345 К. Диффузия связанных электрон-дырочных пар приводит к электрической поляризации. Диссоциация связанных состояний электронов и дырок при 350 К вызывает максимум термоэдс (Рис. 1).

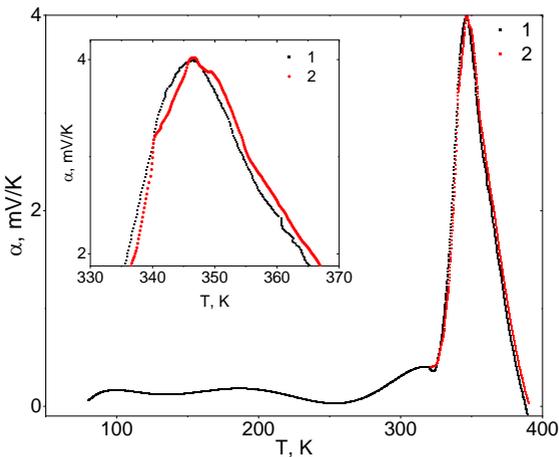


Рис. 1 - Термоэлектрический коэффициент без поля (1), в магнитном поле  $H = 12$  КЭ (2), в зависимости от температуры в образце  $(\text{MnSe})_{0.8}(\text{Tm}_{0.76}\text{Se})_{0.2}$

Поперечная разность потенциалов вызвана локальной электрической поляризацией и пьезоэффектом областей, содержащих ионы тулия.

## Литература

- [1] Oscillating Nernst-Ettingshausen Effect in Bismuth across the Quantum Limit / K. Behnia, M.-A. Méasson, Y. Kopelevich, // Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 166602. [Электронный ресурс]. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.166602>
- [2] Piezoelectric surface acoustical phonon limited mobility of electrons in graphene on a GaAs substrate / S.H. Zhang, W. Xu, S.M. Badalyan, F.M. Peeters // Phys. Rev. B 87 (2013) 075443. [Электронный ресурс]. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.075443>

# ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ И МАГНИТНЫЙ ОТКЛИКИ СУБМИКРОННОГО ТИТАНАТА БАРИЯ

Н.А. Толстых<sup>1</sup>, Е.В. Иевлева<sup>1</sup>, Л.Н. Коротков<sup>1</sup>, Ли Чжэнью<sup>2</sup>, К.Г. Абдулвахидов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный технический университет», Воронеж, Россия

<sup>2</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: elenaz.86@mail.ru

Известно, что силовое воздействие в сочетании со сдвиговой деформацией (СВСД) оказывают заметное влияние на физические свойства материалов. Однако, влияние СВСД на магнитные и диэлектрические свойства ультрадисперсного титаната бария ( $\text{BaTiO}_3$ ) до настоящего времени изучено не было. Это и обусловило цель данной работы – сравнительное исследование магнитного и диэлектрического откликов исходного и подвергнутого СВСД образцов субмикронного титаната бария.

Образцы для эксперимента получали по двухстадийной керамической технологии. Часть материала в виде порошка подвергли дополнительной механической обработке, сочетающей силовое воздействие со сдвиговой деформацией, с использованием наковален Бриджмена, под давлением 175 МПа в течение 40 мин.

Измерения намагниченности  $M$  порошков  $\text{BaTiO}_3$  от напряженности магнитного поля  $H$  проводили при комнатной температуре с использованием магнетометра LakeShore 7404 (рис. 1). Исследования диэлектрического отклика ( $\epsilon$ ) осуществляли с помощью измерителя E7-20 на частоте 10 кГц в режиме нагрева в интервале 20 – 500 °С (рис. 2).

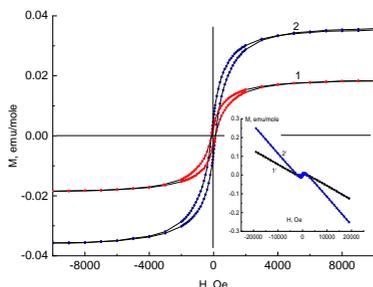


Рис. 1. Зависимости  $M(H)$  для исходного (1) и подвергнутого СВСД (2) порошка  $\text{BaTiO}_3$  после вычитания диамагнитного отклика. На вставке – полные зависимости  $M(H)$ .

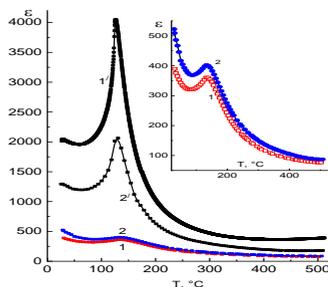


Рис. 2. Зависимости  $\epsilon(T)$  для исходного (1 и 1') и подвергнутого СВСД (2 и 2') образцов  $\text{BaTiO}_3$ , спеченных при температурах 1000 (1 и 2) и 1300 °С (1' и 2').

Анализ результатов эксперимента показал, что исходный и подвергшиеся СВСД обработке порошки  $\text{BaTiO}_3$  обладают слабым магнетизмом при комнатной температуре. СВСД обработка приводит к заметному увеличению намагниченности насыщения  $M_s$ . Обосновано предположение, что повышение  $M_s$  наночастиц  $\text{BaTiO}_3$  связано с ростом в них плотности дислокации, в которых из-за нарушения химических связей можно ожидать появления ионов титана  $\text{Ti}^{3+}$ , обладающих не скомпенсированным магнитным моментом.

Установлено, что дефекты решетки, вызванные СВСД, обладают высокой устойчивостью к высокотемпературному термическому отжигу, что отражается в более слабом диэлектрическом отклике, СВСД обработанного образца в сравнении с исходным после их термического отжига при температуре 1300 °С.