

СЕКЦИЯ «ФИЗИКА»
ПОДСЕКЦИЯ «ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА»

Самовозникающий в реакционной среде катализатор

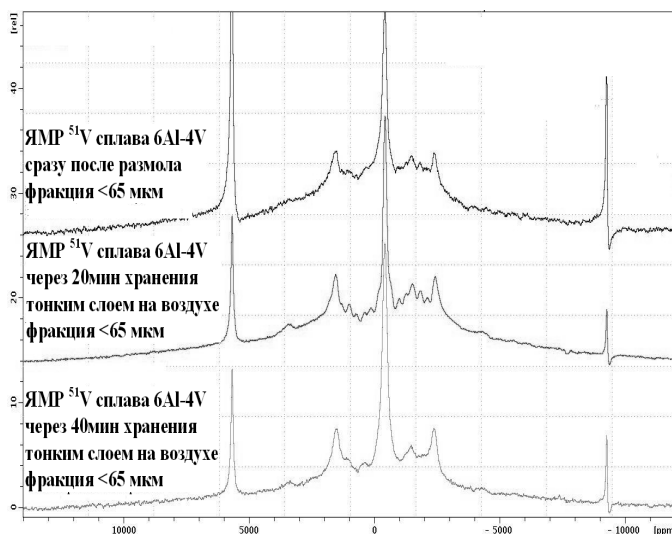
Белобров Юрий Николаевич

аспирант

Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины, Киев, Украина

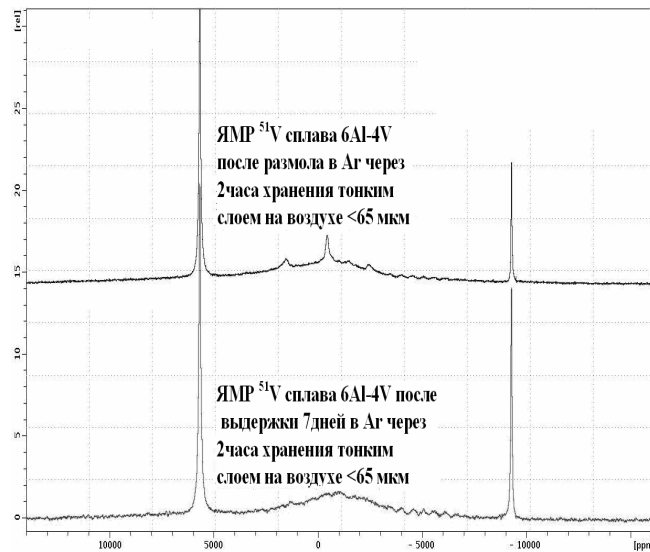
E-mail: lurii-IMP@yandex.ru

Взятые отдельно Al и V имеют высокое сродство к кислороду. В свежеприготовленных образцах сплава 6Al-4V фракции <65 мкм методом ЯМР ^{51}V обнаружена эволюция состояния ванадия в течение небольшого отрезка времени. В атмосфере Ar сигнал ЯМР исследуемого образца достаточно узкий для оперативной съемки информативного спектра, а при хранении в виде тонкого слоя на плоской поверхности в природной атмосфере достаточно 20 минут для заметного изменения спектра. Выявлено (рис. 1.), что основные изменения состояния поверхности частиц происходят на протяжении 1 часа после размола. Последующие изменения в условиях ограниченного доступа воздуха к образцу проявляются в виде постепенного уменьшения интегральной интенсивности пика $\delta = 5686$ ppm, который обусловлен атомами V, находящимися в междоузлиях решетки. Окисление части атомов металлического V - медленный процесс, о чём свидетельствует уменьшение, интегральной интенсивности длящейся при выбранной дисперсности >10 суток.



При непрерывном хранении тонкого слоя порошка на воздухе кинетика взаимодействия с компонентами воздуха оказалась иной: конечное состояние достигается в течение 2х часов. Параметры спектров ЯМР ^{51}V указали на покрытие поверхности сплава оксидами разного состава. Анализ суперпозиции сигналов в спектре ЯМР обнаружила образование ряда соединений (характерное для ванадия существование форм с разными степенями окисления). Последующее воздействие реакционноспособных компонент атмосферы к более глубокому преобразованию образец не приводило. При образовании сложной смеси оксидов алюминия и ванадия принципиальным является протекание наряду с другими следующей реакции $4\text{V} + 5\text{O}_2 = 2\text{V}_2\text{O}_5$ продукт которой проявляет высокую каталитическую активность. Следовательно, возникает ситуация, когда в одной из реакций образуется катализатор, который инициирует последующее периодическое ускорение окисления атомов поверхности. Принципиальным является факт

образования и последующего размещения катализатора в реакционной зоне, и равномерное его распределение в приповерхностном слое, формируемом продуктами реакции, сопровождающейся сегрегацией компонентов структуры.



Сплав 6Al-4V используется в качестве лигатуры при создании титановых сплавов методом спекания порошковых компонент, потому на основе полученных данных сформулированы рекомендации с учётом необходимости создания защитной атмосферы во время технологических операций связанных с использованием этих лигатур для предотвращения, согласно существующих нормативов, попадания кислорода в состав конечного сплава.

Описание кристаллизации системы твердых сфер при помощи уравнения

Орнштейна-Цернике

Бирюлина Т.В.

*Старший преподаватель факультета Права, социологии и СМИ
Иркутский государственный технический университет, Иркутск, Россия*

E-mail: blue-sea@yandex.ru

Одной из проблем, стоящих перед физикой конденсированного состояния вещества, является проблема описания фазовых переходов. В частности, при кристаллизации благодаря структурным отличиям между жидкостью и кристаллом, параметры жидкости меняются скачкообразно. При последовательно статистическом описании мы должны использовать однофазный подход, заранее не постулирующий структуру кристаллической фазы. Этот подход основан на решении обобщенного уравнения Орнштейна-Цернике (ОЦ) для одно- $G_1(\vec{r}_1)$ и двухчастичной $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ функций распределения. Структурно-однородное уравнение ОЦ, описывающее жидкую фазу, должно перестать существовать в точке фазового перехода к кристаллическому состоянию. Из многих предложенных к настоящему времени уравнений замыкания, связывающих функции h_{12} и C_{12} , уравнение Мартынова – Саркисова содержит условие потери устойчивости уравнения ОЦ при плотности, близкой к плотности кристаллизации. Решение для кристалла ищется разложением уравнения ОЦ по скачку плотности жидкости в точке кристаллизации.

Мы рассматриваем кристаллизацию в однокомпонентной системе и предельноразбавленной двухкомпонентной смеси твердых сфер с частицами примеси в два раза больше и два раза меньше частиц раствора. Максимальная плотность, при которой еще существует действительное решение уравнения ОЦ, $n_0=1.012$. Модуль волнового вектора \vec{k} равен 7.67. Структурный фактор для этой плотности будет

$S_{max}(k)=3.431$. Максимального значения, равного $S(k)=2.85$, которое в литературе считается критерием фазового перехода, структурный фактор в нашем случае достигает при меньшей плотности, равной $n=0.932$. Причем для плотности $n_0=1.012$ функция G_{ij} , описывающая взаимное расположение частиц друг относительно друга и отражающая структурные изменения, не имеет уширения второго пика, которое могло бы рассматриваться как указание на то, что здесь мы имеем дело с метастабильным состоянием.

Проблема границ применимости уравнения ОЦ возникает в связи с отрицанием теоретически возможности описания неравновесных состояний с помощью полученного из равновесного распределения Гиббса уравнения ОЦ, и, с другой стороны, с полученными результатами решения уравнения ОЦ для различных замыканий и "практическими" результатами численных экспериментов, которые продолжают в область метастабильных состояний. Возможно, эти результаты появляются либо из-за приближенного характера решаемых уравнений, либо макроскопически малого числа частиц, задействованных в численном эксперименте.

Литература

1. Мартынов Г.А., Саркисов Г.Н. (1989) Статистическая теория фазовых переходов первого рода. // Кристаллография. Т. 34, № 3.

2. Аграфонов Ю. В., Мартынов Г. А. (1992) Статистическая теория кристаллического состояния // Теоретическая и математическая физика. Т. 90, № 1.

3. Саркисов Г.Н. (2006) Метастабильные состояния в системе твердых сфер. // Журнал физической химии. Т. 80, № 3.

4. Мартынов Г.А. (1999) Проблема фазовых переходов в статистической механике. // Успехи физических наук. Т. 169, № 6.

5. Саркисов Г. Н. (2002) Молекулярные функции распределения стабильных, метастабильных и аморфных классических моделей. // Успехи физических наук. Т. 172, № 6.

Спиновая поляризация тока в полупроводниках как результат спин-селективной рекомбинации.

Бобин Е.Г.

Аспирант

Оренбургский государственный университет имени,

физический факультет, Оренбург, Россия

E-mail: genius-1986@yandex.ru

Для создания и работы устройств спинтроники [1] необходимы новые методы получения спин-поляризованного тока [2]. Известные методы (оптическая поляризация электронов и их инжекция из ферромагнетика [3]) имеют ряд ограничений и недостатков, ограничивающих их применение. В нашей работе показано, что спин-селективная рекомбинация носителей тока или спин-селективный захват электронов на примесные центры способны создавать спин-поляризованный ток электронов проводимости. Выведены системы нелинейных уравнений, описывающие такие спин-селективные процессы, исследована динамика спиновой поляризации и устойчивость стационарных режимов. Обнаружены три различных переходных режима создания неравновесной поляризации, которые зависят от скорости генерации носителей, вероятности рекомбинации и времени жизни носителей тока. Показано, что в нестационарных и переходных процессах спиновая поляризация может существенно превышать стационарную. Кроме того, обнаружено, что после прекращения генерации носителей поляризация возрастает. Причём увеличение поляризации будет наблюдаться независимо от режима предшествующей генерации и от момента времени ее прекращения.

Current spin polarization in semiconductors as the result of spin dependent recombination.

New methods are necessary to obtain the spin-polarized current [2] for creation and operation of spintronics devices [1]. The known methods (optical polarization of the electrons and their injection from ferromagnet [3]) have some restrictions limiting their applications. It is shown, the spin-selective recombination of the current carriers or spin-selective capture of the electrons on the impurity centers are shown in our work to be able to create the spin-polarized electron current. The systems of the nonlinear equations, describing such spin-selective processes, have been inferred, dynamics of spin polarization and stability of stationary modes have been investigated. Three various transitive modes of creation of nonequilibrium polarization have been found, that depend on the rate of carrier generation, probability of the recombination and carriers lifetimes. It was shown that non-stationary and transient spin polarization can essentially exceed the stationary value. Moreover, it was find out that the polarization should increase after switching off the carrier generation. The polarization increase does not depend on the mode of the previous carrier generation and the moment of its switching off.

$$\sum_{i=1}^{i=N} S_{s_i} = \pi \left(\frac{4r^3}{3\xi N} \right)^{2/3} \cdot \left(1^{2/3} + 2^{2/3} + 3^{2/3} + \dots + N^{2/3} \right)$$

Литература

1. Zutic I. Fabian J, Das Sarma S. (2004) Spintronics: Fundamentals and applications // Reviews of modern physics, Volume 76, April 2004.
2. Ведяев А.В. (2002) Использование поляризованного по спину тока в спинтронике // Успехи физических наук, Т. 172, №12, с.1458-1461.
3. Avsshalom D.D., Loss D., N. Samarth N. (2002) Semiconductor Spintronics and Quantum Computation. Germany: Springer.

Условия возбуждения плазмы в проводящих водных растворах

Волков А.Н., Яковлев О.М.

Студент; сотрудник, студент

*Ульяновский государственный университет, инженерно-физический факультет
высоких технологий, Ульяновск, Россия*

E-mail: yavigor@mail.ru

Одним из современных методов обработки поверхности металлов, позволяющим не только проводить тончайшую подготовку поверхности к дальнейшим технологическим циклам производства, но и создавать на поверхности структуры заданной конфигурации с микро, наноразмерами, является электролитно-плазменная обработка.

Цель настоящей работы – теоретическая и экспериментальная оценка режимов зажигания плазмы в водных растворах электролитов. О степени пассивации электрода, приводящей к плазменному разряду, судили по уровню экранизации графита газовыми пузырьками, где $\sum_{i=1}^{i=N} S_{s_i}$ –результатирующая площадь экранирования; r –радиус всплывающих пузырьков; $i=1, 2, 3 \dots N$ –число заселяющих поверхность электрода пузырьков разного объема. N и ξ определяются уравнениями:

$$N_s = \left(\frac{3RTj}{4\pi r^3 b_z F P v} \right)^{2/3}; \quad \xi = (1 - \cos \theta)^2 - \frac{(1 - \cos \theta)^3}{3};$$

$$r = \left[\left(\frac{9}{2 \cdot \xi} \right)^{1/3} \cdot \frac{\sin \theta}{\rho g} \sigma_{23} (1 + \cos \theta) \right]^{1/2}$$

в которых $b=1...4$ в зависимости от сорта газа, заполняющего пузырьки; \bar{R} – универсальная газовая постоянная; T – температура; $z=1$ – валентность; F – число Фарадея; P – давление; j – плотность постоянного электрического тока; θ – краевой угол смачивания, определяемый по радиусу всплывающего пузырька.

Численная оценка результирующей площади экранирования позволяет определить истинную плотность тока j_{tr} на электроде, которая при заметной его экранизации пузырьками существенно отличается от геометрической $j=I/S$ $j_{tr} = I / \left(S - \sum_{i=1}^{i=N} S_{\sigma i} \right)$, где S – рабочая площадь электрода.

В проводимых опытах электродами служили спектрально чистые графитовые стержни $\varnothing=6$ мм (исследуемый) и 20 мм. Электролит – 1% раствор H_2SO_4 (х.ч.) и дистиллированной H_2O .

В стационарном режиме весь газ удалялся в виде пузырьков радиуса r скорость всплытия которых при ламинарном обтекании жидкостью оценивалась уравнением Стокса и длиной штриха на кадре цифрового фотоснимка.

Вольтамперные характеристики (ВАХ), снятые относительно неполяризуемого платинового электрода сравнения (э.с.) представлены на рис. Плазменный разряд всегда начинался при экстремальных плотностях тока с 93...95% пассивацией электрода газовыми пузырьками. Рассчитаны j_{tr} , поверхностная концентрация пузырьков и частота их всплытия, степень пассивации электрода при различных j и зависимость r от θ . Результаты расчетов согласуются с экспериментом.

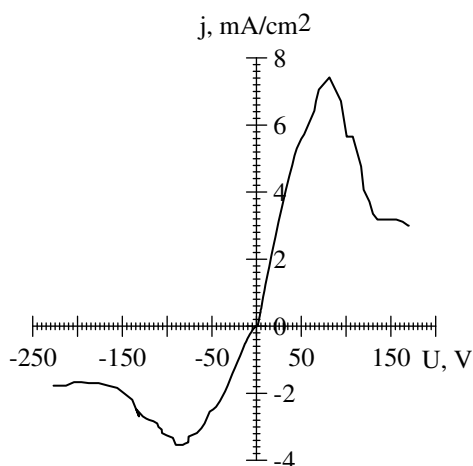


Рис.1 ВАХ графитового электрода относительно платинового э.с.

Исследование методом электронного парамагнитного резонанса диоксида титана, легированного азотом.

Дейген Д.М.

студентка

Московский Государственный Университет имени Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: okdf2008@mail.ru

Диоксид титана (TiO_2) является многофункциональным материалом и широко применяется как в химических процессах, так и в электронных устройствах. В данной работе было изучено влияние фотовозбуждения с различными энергиями квантов на парамагнитные свойства N- TiO_2 .

Все исследуемые образцы диоксида титана, легированного азотом, и данные по фотокаталитическому разложению 4-хлор-фенола на поверхности N- TiO_2 были любезно предоставлены профессором Х. Кишем (институт неорганической химии, Университет

Эрлангена, Германия). Измерения проводились на ЭПР-спектрометре BRUKER ELEXSYS 500 (рабочая частота 9,5 ГГц - X-диапазон, чувствительность 5×10^{10} спин/Гс).

Методом ЭПР изучены образцы диоксида титана, легированного азотом (N-TiO₂). В N-TiO₂ обнаружено два типа парамагнитных центров – N• и NO• - радикалы.

Спектры ЭПР N-TiO₂ в темноте и при освещении с различными энергиями квантов представлены на рис.1. Резкое увеличение интенсивности сигнала ЭПР наступает при $h\nu=2.3$ эВ (рис. 1). Вариации интенсивности сигнала ЭПР от N• - радикалов можно объяснить, предположив, что в исследуемых образцах имеет место примесное поглощение света: $N^+ + h\nu > N^0 + e$ (в зоне проводимости). В результате количество парамагнитных центров увеличивается. В пользу указанного процесса свидетельствует также полная обратимость эффекта освещения, которая может быть связана с перезарядкой указанных центров. Аналогичный эффект при энергии превышающей 2 эВ наблюдается для NO-радикалов (рис.2).

Обнаружена корреляция между концентрацией парамагнитных центров и скоростью фотокаталитического разложения 4-хлор-фенола в образцах TiO₂.

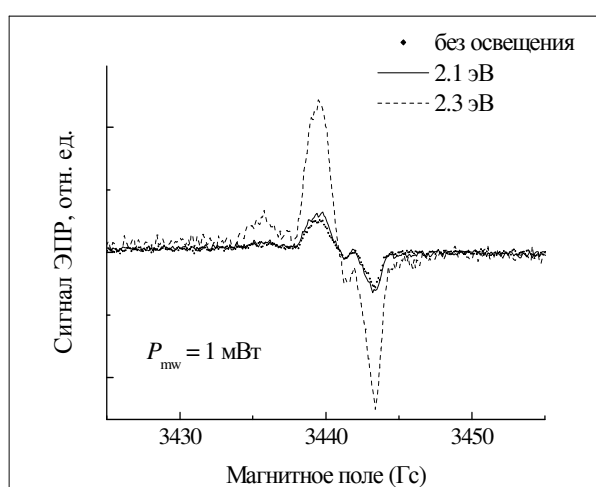


Рис.1. Спектры ЭПР N-TiO₂ в темноте и при освещении с различными энергиями квантов. интенсивности сигнала ЭПР NO• от энергии кванта излучения.

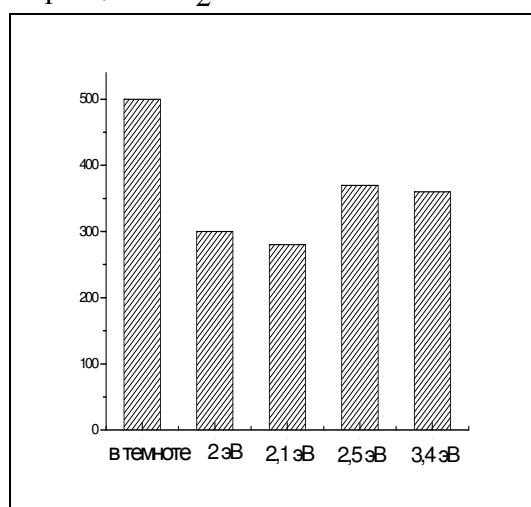


Рис.2. Диаграмма зависимости

Литература

1. S. Sakthivel, M. Janczarek, H. Kisch, "Visible light activity and photoelectrochemical properties of nitrogen-doped TiO₂" // J. Phys. Chem., 108, 19384 – 19387 (2004).

Адсорбционное накопление поверхности медного электрода газом.

Журавлева А.В., Кочетков А.В.,

Студентка., студент

*Ульяновский государственный университет, инженерно-физический факультет
высоких технологий, Ульяновск, Россия*

E-mail: yavigor@mail.ru

Известно, что электрическая обработка металлов и полупроводников в кислородосодержащих ионных растворах может способствовать радикальному изменению их поверхностных свойств. Результатом электролитно-плазменной обработки являются структуры имеющие совершенно новые физические свойства, которые находят своё применение в науке и технике. Поэтому уделяется большое внимание процессам, происходящим на поверхности электродов при подобных воздействиях.

В качестве материала рабочего электрода использовались медные цилиндры $\varnothing=7.8$ mm, материал второго электрода - графит. Электролитом являлся 1% раствор химически

чистой серной кислоты и дистиллированной воды. Потенциал снимался относительно неполяризуемого платинового электрода сравнения (э.с.).

Основная цель проводимых исследований – оценить динамику пассивации электрода водородными пузырьками при плотностях тока j , предшествующих плазменному разряду. Анализ проводился по осциллограммам включения $U(t)$, фиксируемым запоминающим осциллографом С 9-8. Их типичный вид представлен рисунком 1.

Установлены 4 характерные зоны, описание которых потребовало дополнительной оценки количества электричества, затраченного лишь на формирование газовых пузырьков. Это осуществлялось с помощью расшифровки видеок кадров, снятых цифровой видеокамерой: определялся как временной интервал от момента включения тока до пакетного всплытия пузырей, так и радиус r всплывающих пузырьков.

Первая зона (линейная) характеризуется перезарядкой двойного электрического слоя, емкость которого легко определяется по наклону прямой. Затрачиваемое на это количество электричества $Q_1=It_1$. Перезарядка прекращается в точке пересечения касательных к 1 и 2 участкам. Второй участок связан с накоплением адсорбированного водорода до его предельного значения $C_{ад}^*$. Его характерные параметры: $Q_2=I(t_2 - t_1)$. Третий участок характерен зарождением пузырьков критического размера и

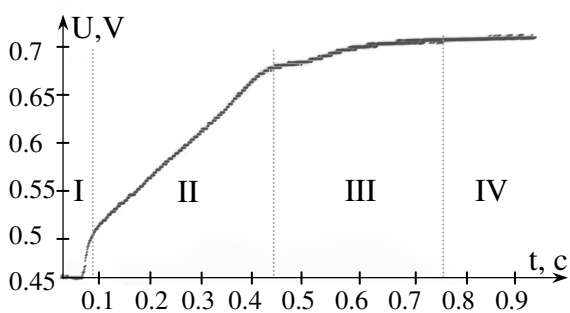


Рис.1 Зависимость потенциала медного электрода от времени катодной поляризации

последующим их синхронным ростом вплоть до момента их коллективного отрыва от электрода. Затрачиваемое на это $Q_3=I(t_3 - (t_1+t_2))$. Только этот участок несет ответственность за пассивацию электрода газовыми пузырьками. За его пределами (4-я зона) потенциал электрода остается неизменным и после быстрой установки стационарного режима характеризуется непрерывным всплытием пузырьков с фиксируемым интервалом.

Произведена количественная оценка емкости, $C_{ад}^*$, количества пузырьков на электроде, скорости их роста, частоты отрыва, коэффициента диффузии водорода к своим стокам и степени экранизации электрода при различных плотностях тока.

Термостимулированные поверхностные сегрегации в Fe-Mo, Fe-Ni и твердом растворе Cu-Ni.

Захватова М.В.¹

младший научный сотрудник

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

E-mail: less@fti.udm.ru

Методами рентгеноэлектронной спектроскопии в условиях сверхвысокого вакуума исследованы закономерности термостимулированных сегрегаций в поверхностных слоях сплавов $Cu_{50}Ni_{50}$, $Cu_{80}Ni_{20}$, $Fe_{82}Ni_{18}$, $Fe_{50}Ni_{50}$, $Fe_xMo_{(1-x)}$ ($x = 0 - 72$ ат. %).

Обнаружены изменения состава поверхности (сегрегация молибдена в слой до 5 нм от свободной поверхности) сплавов Fe-Mo с низкой взаимной растворимостью компонентов и возможностью образования интерметаллидных соединений направлено в сторону достижения соотношений концентраций, характерных для термодинамически выгодных фаз, возможных в этой системе в соответствии с диаграммой состояний.

В сплавах Fe-Ni поверхностные сегрегации (обогащение поверхности никелем) связаны с процессами атомного упорядочения, α - γ -превращениями и формированием состава поверхностного слоя с минимальной температурой плавления.

¹ Автор выражает признательность к.ф.-м.н. Гильмутдинову Ф.З. за помощь в подготовке тезисов.

Обнаружено, что поверхностные сегрегации меди в слое до 10 нм в медно-никелевых сплавах взаимосвязаны с процессами расслоения в объеме материала, при этом сегрегационные эффекты максимальны в сплавах с наибольшей склонностью к расслоению по диаграмме состояния.

Полученные результаты указывают на качественную сходность наблюдаемых поверхностных сегрегаций, отражающих процессы в объеме материалов.

Кристаллические фазы дисульфида железа FeS₂

Исаева Лейла Эйвазовна

студентка

Московский Государственный Университет им.М.В.Ломоносова, Физический

факультет Москва, Россия

E-mail: leyla_isaeva@yahoo.com

Дисульфид железа FeS₂ – один из наиболее распространенных сульфидов металлов на Земле, существующий в трех модификациях: пирит (символ Пирсона - *cP12*), марказит (символ Пирсона – *oP6*) и FeS₂ с простой кубической решеткой (символ Пирсона - *aP12*). Наибольший интерес представляют 2 полиморфные модификации FeS₂ - пирит и марказит, встречающиеся во многих геологических породах: осадочных, магматических, а также в гидротермальных жилах. Система Fe-S также, возможно, играла важную роль в формировании и эволюции Земной коры, а также других планет, например, Марса и Венеры [1]. Физические свойства дисульфидов железа мало изучены, поэтому исследование фазовых превращений кристаллических фаз пирита и марказита, а также динамической стабильности этих фаз в условиях высоких давлений представляет бесспорный интерес. В этой связи нами были проведены теоретические исследования пирита и марказита в интервале давлений от 0 до 300 ГПа.

Первопринципные расчеты были проведены с помощью пакета *Quantum Espresso* [2], основанного на теории функционала плотности [3] и теории возмущений в функционале плотности [4]. Для описания электрон-ионного взаимодействия были использованы ультрамягкие потенциалы, предложенные Вандербильтом [5]. Обмен-корреляционное взаимодействие в электронном газе учтено с помощью приближения обобщенных градиентных поправок [6]. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка 8x8x8 *k*-точек для марказита и 6x6x6 для пирита, сгенерированных по схеме Монхорста-Пака [7]. Суммирование по электронным зонам проводилось по методу Марзари-Вандербильта [8] с шириной уширения 0.01 Рид. Закон дисперсии фононов был получен с помощью матриц межатомных силовых констант, вычисленных в приближении метода линейного отклика.

Расчеты зонной структуры и электронной плотности состояний показывают, что в обычных условиях эти полиморфы являются полупроводниками с шириной щели 0.63 эВ и 0.35 эВ для пирита и марказита, соответственно, и под давлением переходят в металлическое состояние. Рассчитаны уравнения состояния кристаллических фаз дисульфида железа FeS₂. Исследовано поведение динамики решеток пирита и марказита под давлением.

Литература:

1. Ahrens T.J., Jeanloz R., J.Geophys.Res. 92, 10363, 1987
2. Gianozzi P., De Gironcoli S., Pavone P., Baroni S., <http://www.pwscf.org>
3. Kohn W., Sham L.J., Phys.Rev. 140, A1133, 1965
4. Baroni S., De Gironcoli S., Dal Corso A., Gianozzi P., Rev.Mod.Phys. 73, 515-562, 2001
5. Vanderbilt D., Phys.Rev.B. 41, 7892, 1990
6. J.P.Perdew, K.Burke, M.Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865, 1996
7. Monkhorst H., Pack.J., Phys.Rev.B. 13, 5188, 1976

8. Marzari N., Vanderbilt D., De Vita A., Payne M. C., *Phys.Rev.Lett.* 82, 3296-3299, 1999

Влияние природы и структуры полимерной сетки на свойства термочувствительных полимеров

Кожунова Е.Ю.²

Аспирант

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

физический факультет, Москва, Россия

E-mail: kozhunova@polly.phys.msu.ru

Полимеры, восприимчивые к внешним воздействиям, в последнее время привлекают внимание благодаря своим интересным свойствам – в подобных полимерах происходят относительно большие и резкие изменения физических и химических параметров под действием незначительных перемен во внешней среде. Способность изменять физические и химические свойства восприимчивых полимеров на молекулярном уровне имеет важнейшее значение для создания высокотехнологичных материалов.

Целью настоящей работы является изучение влияния природы и структуры полимерной сетки на свойства термочувствительных гелей. Проведено исследование конформационного перехода набухший – сколлапсированный гель, индуцированный температурой, в 1) слабосшитых гелях на основе сополимеров N-изопропилакриламида и N-винилкапролактама и 2) взаимопроникающих сетках. Для изучения влияния природы мономерных звеньев полимерных цепей сетки геля на его свойства проанализировано поведение гелей при введении ионогенных звеньев: диаллилдиметиламмония, стиролсульфоната и метакриловой кислоты.

Проведенное исследование показало, что введение в состав термочувствительного полимера N-изопропилакриламида заряженных звеньев (диаллилдиметиламмоний, стиролсульфонат, метакриловая кислота) приводит к повышению критической температуры перехода набухший - сколлапсированный гель. Это объясняется конкуренцией электростатических и гидрофобных взаимодействий. Образование водородных связей в гелях на основе сополимеров метакриловой кислоты ведет к уменьшению коэффициента набухания и степени коллапса.

В ходе исследований были рассмотрены конформационные переходы в гидрогелях со структурой полувзаимопроникающих сеток термочувствительного полимера и полиэлектролита двух типов: трехмерную сетку формирует 1) неионный термочувствительный полимер и 2) полиэлектролит. Гель первого типа на основе полувзаимопроникающих сеток поли-N-изопропилакриламид – полистиролсульфонат (ПНИПА-ПСС) претерпевает конформационный переход и достаточно быстро достигает равновесного состояния. Гели второго типа на основе полувзаимопроникающих сеток полидиаллилдиметиламмоний хлорид - поливинилкапролактама (ПДАДМАХ-ПВК) и ПДАДМАХ-ПНИПА при нагревании мутнеют, что объясняется переходом клубок-глобула термочувствительных макромолекул в объеме слабосшитой полиэлектролитной сетки. При этом масса геля изменяется незначительно. Данное свойство может быть использовано в оптических системах.

Литература

1. Khokhlov A.R., Starodubtsev S.G., Vasilevskaya V.V.; Conformation transition in polymer gels: theory and experiment. //Adv. In Polymer Sci. 1993, 109, 123-171.
2. Hirokawa Y., Tanaka T.; Volume phase transition in nonionic gel. //J. Chem. Phys. 1984, 81(12), Pt. 2, 6379-6380.

² Автор выражает признательность доценту, д.ф.-м. н. Махаевой Е.Е. за помощь в подготовке тезисов.

Моделирование самоорганизации атомов Со, погруженных в первый слой поверхности Су (100)

Колесников С.В., Клавсюк А.Л.

аспирант

*Московский государственный университет им. Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия*

E-mail: kolesnikov_s_v@mail.ru

Изучение магнитных структур на поверхности металлов интересно с точки зрения развития нанотехнологий и, в частности, создания нанокomпьютеров. Существует несколько способов создания таких наноструктур, однако, наиболее экономичным является самоорганизация. Самоорганизации различных структур из атомов примеси на поверхности металла посвящено множество экспериментальных и теоретических работ, однако, не все такие структуры являются стабильными при комнатной температуре из-за высокой подвижности атомов примеси. В то же время, атомы примеси, погруженные в первый слой металлической подложки, являются малоподвижными при комнатной температуре и могут служить для создания стабильных наноструктур [1,2].

В нашей работе, мы провели теоретическое исследование самоорганизации атомов Со, погруженных в первый слой поверхности Су(100), методом, совмещающим метод молекулярной динамики (МД) [3] и кинетический метод Монте-Карло (КМК) [4].

В результате мы получили следующие основные выводы: во-первых, формирование компактных структур из атомов Со, погруженных в первый слой поверхности Су(100), без покрытия атомами подложки возможно только в узком интервале температур около 400К. Во-вторых, движение погруженных атомов Со при этих температурах обусловлено интенсивным движением вакансий, находящихся в первом слое медной подложки. В-третьих, в результате эволюции системы погруженных атомов Со образуются преимущественно зигзагообразные структуры. Помимо этих основных результатов, было исследовано влияние изменения концентрации погруженных атомов Со и концентрации вакансий на эволюцию системы.

Литература

[1] M.L. Grant, B.S. Swartzentruber, N.C. Bartelt, J.B. Hannon, Diffusion Kinetics in the Pd/Cu(100) Surface Alloy// Phys. Rev. Lett. 86, 4588 (2001)

[2] O. Kurnosikov, J.T. Kohlhepp, W.J.M. de Jonge, Can surface embedded atoms be moved with an STM tip?//Europhys. Lett. 64 (1), pp. 77-83 (2003).

[3] D.W. Heerman, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Springer (1990).

[4] K. A. Fichtorn, W.H. Weinberg, Theoretical Foundations of Dynamical Monte Carlo Simulations// J. Chem. Phys. 95, 1090 (1991).

**Влияние конструктивных параметров динамического
равноканального углового прессования на распределение
пластической деформации в образце³**

Косоногов Р.Е.⁴, Козулин А.А.

*Студент пятого курса, старший преподаватель
Томский государственный университет,
физико-технический факультет, Томск, Россия
E-mail: c_y_b_e_r@mail.ru*

Разработкам технологии получения объемных наноструктурных и ультрамелкозернистых (УМЗ) металлов методом равноканального углового прессования (РКУП) в последнее время уделяется большое внимание. Одна из модификаций динамических методов РКУП использует инерционное движение образца материала через канал, образец цилиндрической формы выстреливается в угловой канал и на высоких скоростях проходит сквозь него. При этом за счет возникновения пластической деформации происходит измельчение зеренной структуры металлов, и уже после нескольких повторений процедуры продавливания в несколько раз повышаются показатели механических характеристик материала образца. Из-за конструктивных особенностей экспериментальной оснастки проследить в реальном времени за протеканием процесса деформации невозможно, на деле приходится только довольствоваться конечным результатом эксперимента. Поэтому разработка математического аппарата для моделирования динамического РКУП, позволяющего прогнозировать ход эксперимента, является актуальной задачей.

Целью данной работы была разработка вычислительной модели для детального изучения закономерностей динамического равноканального прессования в зависимости от начальной скорости движения образца и значениях углов сопряжения каналов.

Модель учитывает особенности пластического течения металлов при высоких скоростях деформации.

Моделирование динамического РКУП алюминиевых и медных сплавов проводилось методом частиц. Цилиндрические образцы с начальной скоростью в несколько сотен метров в секунду под действием инерционных сил продавливались через канал, представляющий два сопряженных пересекающихся под углами 90 и 120 градусов отверстия, с одинаковыми поперечными сечениями. Проведено моделирование деформирования стержней при прохождении через канал круглого и квадратного сечения.

Результаты численного моделирования позволили провести анализ развития пластических деформаций во времени при прохождении металлических образцов через канал. Определены поля пластических деформаций в образце после завершения деформирования. Показано, что неоднородность развития пластических деформаций приводит к образованию блочных структур. При прохождении стержня через канал в нем остаются значительные объёмы материала в головной и хвостовой части с незначительной степенью пластической деформации. Получено объяснение неоднородного распределения в образцах материалов локальных объемов, в которых формируется ультрамелкозернистая структура в результате динамического углового прессования.

Дополнительным преимуществом разработки алгоритма численного моделирования РКУП является: возможность предсказания величин максимальных напряжений, возникающих в материале оснастки, что может служить предпосылкой для оптимизации ее конструкции; выбора оптимальной начальной скорости образца; возможности сокращения времени и затрат на проведение натурных экспериментов.

³ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта АБЦП ФАО РФ Рег. № 5993.

⁴ Автор выражает признательность профессору, д.ф.-м.н. Скрипняку В.А. за помощь в подготовке тезисов.

**Релаксационный отклик сегнетожесткой пьезокерамики $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$
на электрические, температурные и механические воздействия.**

Кузенко Д.В.⁵

аспирант, младший научный сотрудник

Донецкий национальный университет, физический факультет, г.Донецк, Украина

Научно-технологический центр "Реактивэлектрон" НАНУ, г.Донецк, Украина

E-mail: danil.kuzenko@gmail.com

В твердотельной электронике сегнетопьезокерамические материалы занимают важное место. При этом во многих устройствах необходимы как стабильность свойств пьезоэлектрических керамических элементов (ПКЭ) при высоких амплитудах возбуждающих напряжений, так и возможность управления их параметрами путем изменения внешних воздействий. В данном сообщении приведены результаты исследований поведения пьезокерамических материалов при различных уровнях возбуждающего электрического напряжения резонансной частоты, изотермической выдержки и одноосного механического нагружения.

Исследования проведены на модельном твердом растворе цирконата-титаната свинца (ЦТС) состава $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52},\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$, легированном марганцем, и на промышленном материале ЦТССт-3 (с тем же соотношением циркония-титана). В ходе работы установлено, что при увеличении возбуждающего электрического напряжения происходит снижение механической добротности и резонансной частоты. Одновременно с этим увеличение напряженности поля (на частоте резонанса) ведет к повышению температуры ПКЭ. На частоте антирезонанса изменения температуры не отмечается. Для выяснения причин такого поведения было изучено влияние возбуждающих полей различной напряженности, температуры и механического одноосного нагружения на временные зависимости резонансных параметров, релаксационное поведение характеристик после электрического и температурного возбуждения, а также механического воздействия на элементы. После отключения возбуждающего напряжения (резонансной частоты), снятия механической одноосной нагрузки и снижения температуры образца до комнатной, пьезорезонансные параметры ПКЭ восстанавливаются по логарифмическому закону: $f_r = A \cdot \ln(\tau) + D$. Процесс восстановления параметров является долговременным, растягивается на сутки и более.

Изотермическую выдержку ПКЭ проводили при температурах, соответствующих температурам разогрева в процессе возбуждения элементов полем напряженности 5.0 и 7.5 В/мм (140 и 170°C соответственно). После этого элементы находились при комнатной температуре. Время снижения температуры ПКЭ (до комнатной) не превышало 1 мин. Релаксационное восстановление параметров после температурного воздействия являлось долговременным и проходило более суток по закону, близкому к релаксационному закону восстановления параметров после воздействия возбуждающего электрического поля и механического одноосного нагружения.

Для объяснения релаксационного поведения ПКЭ в результате влияния отмеченных внешних воздействий привлечена модель, учитывающая процессы, происходящие в сегнетоэлектрических доменных структурах, и отклик таких структур на слабые внешние возбуждения (поля значительно слабее коэрцитивной силы; температуры значительно ниже температуры точки Кюри; механические напряжения много меньше деполаризующих). При этом возможны следующие механизмы:

1) частичный пиннинг доменных стенок на дефектах, величина которого зависит от амплитуды и длительности внешнего воздействия;

⁵ Автор выражает признательность профессору, д.ф.-м.н. Бажину А.И., д.ф.-м.н. Ищуку В.М., с.н.с. Спиридонову Н.А. за помощь в подготовке тезисов.

2) изменение относительной стабильности фаз (тетрагональной и ромбоэдрической), наличие которых обусловлено морфотропностью исследуемых образцов.

Спектральные характеристики CaMoO_4 – сцинтиллятора для обнаружения безнейтринного двойного β -распада

Курмашева Дарья Маратовна

студентка

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физико-химический факультет, Москва, Россия

E-mail: darya_mk@inbox.ru

В настоящее время одной из важнейших проблем физики элементарных частиц является поиск безнейтринного двойного бета-распада, запрещенного законом сохранения лептонного заряда. Проблема заключается в том, является ли нейтрино, обладающее отличной от нуля массой, майорановской или дираковской частицей. На сегодняшний момент не существует достоверных наблюдений безнейтринного двойного бета-распада. Для обнаружения этого процесса необходимы десятки, и даже сотни, килограммов дорогостоящих материалов.

Современные люминесцентные методики позволяют регистрировать предельно слабые интенсивности света – отдельные фотоны. Поэтому сцинтилляционные кристаллы, преобразующие ионизирующее излучение в свет, являются одними из наиболее эффективных для обнаружения безнейтринного двойного бета-распада. Перспективными для решения этой проблемы являются кристаллы CaMoO_4 , содержащие обогащённые изотопы ^{100}Mo .

Исследования проводились на двух кристаллах, один из которых выращен в ИФТТ РАН, а другой – в Богородицке. В ИФТТ кристалл CaMoO_4 выращивался по методу Чохральского из сырья, подвергнутого многократной очистке. Для каждого из двух кристаллов были получены спектры фотолюминесценции, возбуждения люминесценции, рентгенолюминесценции и импульсной люминесценции, а также проведены их сравнительные характеристики.

Спектры фотолюминесценции, исследованные в спектральной области 375-700 нм, содержат 2 полосы – ~500 нм и ~550 нм. В спектрах рентгенолюминесценции наиболее интенсивной является полоса с $\lambda \sim 500$ нм. Спектры возбуждения люминесценции исследованы в спектральной области 275-425 нм. Характерное время высвечивания для кристаллов CaMoO_4 , при возбуждении импульсом рентгеновского излучения (напряжение 150 КэВ, длительность 20нсек), составляет ~ 16 мкс.

Результаты сравнения показали, что кристалл, выращенный в ИФТТ РАН, более предпочтителен в экспериментах, связанных с поиском безнейтринного двойного бета-распада, так как его световыход на ~25 % больше, чем у кристалла, выращенного в Богородицке

Таким образом, на основании проведённых исследований можно сделать вывод о том, что использованные в ИФТТ РАН методы очистки сырья и способы выращивания кристаллов, позволившие увеличить световыход на ~25 %, являются эффективными. Это позволяет надеяться на то, что дальнейшая очистка сырья и модернизация способа выращивания позволит ещё больше увеличить световыход кристаллов CaMoO_4 , что делает их наиболее перспективными для поиска безнейтринного двойного бета-распада.

Особенности структурных превращений в α и β -фазах фольги сплава Pd-In-Ru-H⁶

Левин Иван Сергеевич

студент

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

E-mail: lyovin-ivan@rambler.ru

Детальное понимание характера структурной эволюции и фазовых превращений в сплавах, идущие под воздействием водорода, имеют существенное значение как для водородной энергетики, так и для создания конструкционных материалов термоядерных реакторов, в которых образуется большое количество водорода и его изотопов, поскольку безопасность работы таких объектов должна обеспечиваться стабильной механической прочностью узлов этих систем. Это тем более важно, что поглощение водорода провоцирует образование большого количества вакансий [1-2]. Поскольку палладий – один из хорошо поглощающих водород металлов, то именно он и сплавы на его основе являются удобным модельным объектом для изучения особенностей взаимодействия металлов с водородом.

В данной работе методами рентгеновской дифрактометрии исследовалась фольга сплава Pd-In-Ru после электролитического насыщения ее водородом в процессе длительной дегидрогенизации.

На основе изучения положения, формы и интенсивности профилей дифракционных линий, полученных как до гидрирования, так и в процессе длительной релаксации после насыщения фольги водородом, было установлено, что:

1. количество образующейся β - фазы и скорость $\beta \rightarrow \alpha$ фазового превращения в исследуемой фольге сплава Pd-In-Ru имеют ориентационную зависимость. Наибольшее количество β -фазы образуется в ОКР (100), а наибольшая скорость $\beta \rightarrow \alpha$ фазового превращения наблюдается для ОКР (110).

2. время существования β - фазы в исследуемом сплаве составляет более 500 часов при данных условиях гидрирования. Количество растворенного водорода в матрице данного сплава больше со стороны насыщения.

3. максимальный параметр решетки для β - фазы с обеих сторон фольги исследуемого сплава наблюдается через 50 часов релаксации после насыщения ее водородом.

4. структурная эволюция в фольге исследуемого сплава Pd-In-Ru-H в процессе дегидрогенизации носит немонотонный характер.

5. упругие напряжения в α - и β - фазах исследуемого сплава имеют разные знаки, что связано с разной атомной структурой дефектных комплексов, имеющих в них.

6. в процессе фазовых превращений, идущих в фольге исследуемого сплава после гидрогенизации, в β - фазе увеличивается количество дефектов межузельного типа.

Литература

1. Fukai Y, Okuma N. // Phys. Rev. Letters, 1994, vol.73, № 12, p.1640.
2. Авдюхина В.М., Анищенко А.А., Кацнельсон А.А., Ревкевич Г.П. // ФТТ, 2004, т. 46, № 2, с. 259.

⁶ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№ 09-02-90441).

Использование импульсного метода вихретокового контроля в дефектоскопии облучённых твэлов ВВЭР-1000**Летуновская О.С.¹, Сагалов С.С.²***Инженер¹, старший научный сотрудник²**ОАО “Государственный Научный Центр Научно Исследовательский Институт Атомных Реакторов”, г. Димитровград**E-mail: grayser@bk.ru*

Вихретоковая (ВТ) дефектоскопия – один из основных методов неразрушающего контроля облучённых твэлов в радиационной материаловедческой лаборатории НИИАР. Возможности этого метода используются уже на начальном этапе послереакторных исследований ТВС. Пропуская извлекаемые из сборки твэлы через проходной вихретоковый преобразователь (ВТП), получают первичную информацию о состоянии защитных оболочек. Целью этого этапа является разбиение контролируемого массива твэлов на две группы: с нормальными и аномальными параметрами оболочек. Твэлы второй группы и часть твэлов первой (в качестве образцов типичного состояния) поступают на дальнейшие неразрушающие и разрушающие материаловедческие исследования. Полученная информация используется для оценки ресурса работоспособности, причин выхода из строя и допустимых параметров эксплуатации твэлов.

Система вихретокового контроля твэлов построена на базе дефектоскопа с импульсным возбуждением. При этом использовался дифференциальный датчик трансформаторного типа.

В качестве объекта исследований была выбрана ТВС ВВЭР-1000, разгерметизировавшаяся при выгорании 18 МВт-сут/кгU. Вихретоковые диаграммы трёхсот двенадцати твэлов сборки включали в себя отклики от пружинного фиксатора и нижней заглушки. Уровень фоновой составляющей был незначителен. ВТ-диаграмма одного из твэлов сборки содержала сигналы, существенно превышающие по амплитуде уровень фона. Амплитудно-временной анализ откликов преобразователя в районе аномальных участков показал наличие дефектов различного типа.

Таким образом, использование возможностей импульсного вихретокового контроля позволило экспрессно обнаружить в составе ТВС ВВЭР-1000 негерметичный твэл с одним первичным и множеством дефектов вторичного происхождения.

Оптические свойства тонких плёнок фталоцианина ванадила в ходе структурных перестроек***Миткалев П.О.⁷****Студент физического факультета**Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия**E-mail: pavelmit@gmail.com*

Интерес к фталоцианину ванадила (VOPc) вызван целым рядом его уникальных свойств [1]: высокой нелинейно-оптической восприимчивостью третьего порядка, сверхбыстрым оптическим откликом, стабильностью к облучению видимым светом, кроме того, он является органическим материалом, стабильным в воздухе до 350°C.

В нашей лаборатории ведутся исследования свойств сверхтонких плёнок VOPc. В частности, свойств, связанных с технологией их получения (методом Ленгмюра-Блоджетт). Так, в нашей лаборатории изучены электрические, адсорбционные характеристики [2] и поведение спектров поглощения ленгмюровских плёнок VOPc при их нагреве в интервале температур от 20°C до 70°C и при обратном охлаждении до комнатной температуры.

⁷ Автор выражает признательность доценту, к.ф.-м.н. Зайцеву В.Б. за помощь в подготовке тезисов.

Показано, что в этой области (вблизи 40°C) происходит поверхностный структурный переход, во время которого слабые Ван-дер-Ваальсовы силы, связывающие молекулы VOPc, разрушаются и происходит активизация движения молекул. Обнаружено, что в указанном диапазоне температур спектральная линия поглощения S-band остается неизменной, в то время как полуширина Q-band (705 нм) при нагреве необратимо уменьшается на величину порядка 10%. Сопоставление этих результатов с данными [3], показало что, этот процесс соответствует упорядочиванию в фазе I. Такой процесс наблюдается только в сверхтонких плёнках и исчезает при увеличении их толщины.

Согласно теоретическим данным, фаза I VOPc является метастабильной. Поэтому, при сильном нагреве (отжиге) она должна трансформироваться в фазу II. Мы ставили перед собой цель экспериментально обнаружить этот переход в ленточных пленках фталоцианина ванадила. Для изучения фазового перехода I→II мы нагревали образцы VOPc на кварцевой подложке до температур немного выше 100°C. Сужение спектра заканчивалось при температуре порядка 60°C, и при дальнейшем нагреве спектр начинал значительно уширяться. Максимум Q-band сдвигается при этом в длинноволновую область спектра, его интенсивность заметно вырастает по сравнению со спектром для комнатной температуры. В ходе дальнейшего исследования стало очевидно, что "сдвиг" спектра в данном случае есть ни что иное, как образование нового максимума с большей длиной волны.

Таким образом, мы обнаружили, что при нагреве до температур выше 100°C в ЛБ пленках фталоцианина ванадила происходит фазовый переход из фазы I в фазу II, характеризующийся появлением нового длинноволнового максимума 758 нм в спектре поглощения пленок.

Литература

1. Yufeng Zhang, Timothy Learmonth, Shancai Wang, A. Y. Matsuura, James Downes, Lukasz Plucinski, Sarah Bernardis, Cian O'Donnella, Kevin E. Smith. Electronic structure of the organic semiconductor vanadyl phthalocyanine (VO-Pc); *J. Mater. Chem.*, 2007, 17, 1276–1283.
2. Д. В. Корешков, Н. Л. Левшин, П. А. Форш, С. Г. Юдин. Исследование влияния адсорбции молекул из газовой фазы на проводимость пленок Ленгмюра-Блоджетт фталоцианина ванадила; *Вестник Московского университета, серия 3, №2*, 2007.
3. С. Н. Griffiths, M. S. Walker and P. Goldstein. Polymorphism in Vanadyl Phthalocyanine; *Mol. Cryst. & Liq. Cryst.*, 33 pp. 149-170 (1976).

Определение магнитного вклада в восприимчивость иттрия с помощью рентгеновского излучения круговой поляризации^{8,9}

Одинцова Е.Е.

Аспирант

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
E-mail: k_odintsova@hotmail.com

Спектры круго- или линейно-поляризованного рентгеновского излучения вблизи краев поглощения обладают замечательной чувствительностью к магнитному состоянию атомов. Определение магнитооптических констант для рентгеновского излучения необходимо для расшифровки спектров отражения и дифракции. Различие спектров поглощения (XAS) для излучения правой и левой круговой поляризации (XMCD спектры) позволяет получить мнимую часть магнитной составляющей показателя преломления. Для

⁸ Работа поддержана грантами РФФИ № 07-02-00324 и №09-02-01293

⁹ Авторы выражают благодарность Дюфо К. и Дюменсил К. (университета г. Нэнси, Франция) за изготовление образцов для исследования и Рогалеву А., Вильгельму Ф. и Смеховой А. (ESRF, Гренобль, Франция) за проведение эксперимента

определения реальной части магнитной добавки мы использовали смещение осцилляций Кизиха на кривых отражения, измеренных для правой и левой поляризации падающего излучения в геометрии продольного эффекта Керра (L-MOKE). Эффект обусловлен различием сдвига фазы при прохождении излучения с правой и левой поляризацией тонкой магнитной пленки.

Эпитаксиальная многослойная пленка Nb(4 nm)/YFe₂(40 nm <110>)/Fe(1.5 nm)/Nb(50 nm) была получена в Университете г. Нанси. YFe₂ является мягким ферромагнетиком [1], в котором магнитный момент атомов Y $\mu_Y \sim 0.4 \mu_B$. Рефлектометрические кривые и соответствующие кривые асимметрии были измерены при нескольких энергиях вблизи Y L_{2,3} краев поглощения (L₃: 2071 – 2095 eV, L₂: 2145 – 2185 eV) на станции ID12 Европейского источника синхротронного излучения. Результаты для L₃ края представлены на рис. 1. Для обработки эксперимента использовался программный пакет ASYM.

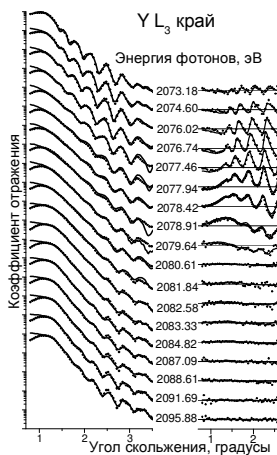


Рис. 1

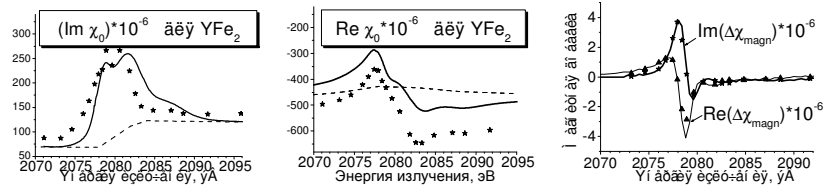


Рис. 2

В результате подгонки экспериментальных данных были восстановлены спектры для диагональной и магнитной компонент восприимчивости (χ_0 и $\Delta\chi_{\text{mag}}$) в слое YFe₂ (символы на рис. 2).

Эти зависимости сопоставлены с нормированными спектрами XAS, XMCD и преобразованиями Камерса-Кронига от них (сплошные кривые на рис. 2). Видно, что кривые достаточно хорошо согласуются.

Литература

1. K. Dumesnil, C. Dufour, Ph. Mangin, M. Fitzsimmons, S. Park, J.J. Rhyne, A. Rogalev and J. A. Borchers, Journ. Appl. Phys. **97**, 10K108 (2005).

Металлографический анализ и износостойкость электроискровых покрытий из стали

Окин М.А.¹⁰

ГОУВПО «Мордовский государственный университет имени Н.П.Огарева»,

Институт физики и химии, г. Саранск, Россия

e-mail: okin112@mail.ru

Электроискровая обработка (ЭИО) существенно влияет на эксплуатационные характеристики деталей посредством изменения свойств поверхностного слоя [1]. Данный метод позволяет осуществлять нанесение покрытий на тела вращения, что нашло применение в восстановлении изношенных частей механизмов. Создание новых технологий восстановления и упрочнения деталей с использованием ЭИО непосредственно связано с изучением процесса нанесения покрытия и оптимизации его свойств.

Получение покрытий осуществляли путем наплавки проволоки из сталей 65Г и 08 на подложку цилиндрической формы, выполненную из стали 20Х.

¹⁰ Автор выражает признательность профессору, к.ф.-м.н. Фомину Н.Е. и доценту кафедры физики твердого тела Батину В.В. за помощь в проведении работы.

Гипотезой к проведению исследований послужили ранее проведенные исследования структуры подобных покрытий. Было выдвинуто предположение о том, что изменение структуры повлияло на механические свойства модифицированной поверхности. Для определения характера влияния проведены металлографические исследования.

При наблюдении поперечных шлифов образцов под микроскопом наблюдается значительная неоднородность получаемых покрытий и пористость верхнего слоя больше, чем у нижнего. Определено, что обработка поверхности происходит путем нескольких проходов электрода по определенному месту поверхности, в результате чего образуются покрытия, состоящие из нескольких слоев. Толщина наносимых слоев отличается как у отдельно выбранного, так и при их сравнении между собой.

Последующее травление показало, что покрытие по глубине неоднородно. Наплавленный материал имеет пористую структуру. На границах наблюдаются некоторые скопления пор, которые состоят, как было определено ранее, в основном из оксидов железа (Fe_2O_3 и Fe_3O_4). На травленном шлифе в приграничном слое подложки наблюдается светлая полоса. Анализ литературных данных показал, что при воздействии на поверхность сталей концентрированными источниками тепла приграничная область обогащается углеродом и различного рода дефектами, в результате чего образуется более твердая структура. Значение микротвердости в этой области выше по сравнению с соседними.

Неоднородность повлияла на распределение величины микротвердости по глубине поверхностного слоя. Большие значения соответствуют уколу в область границы между наносимыми слоями, а малые – в область, близкую к поре.

По данным проведенных исследований определены оптимальные режимы нанесения обоих материалов. Полученные зависимости коррелируют со значениями величины микротвердости, измеренной на определенном расстоянии от границы «покрытие-подложка».

Кристаллохимический аспект вхождения цинка в структуру титанил фосфата калия

Орлова Е.И.

Аспирант

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: agapova@polly.phys.msu.ru

Кристаллы семейства титанил фосфата калия KTiOPO_4 (КТР) представляют научный и практический интерес в связи с необычным сочетанием их свойств: сегнетоэлектрических, суперионных и нелинейных оптических, обусловленных их туннельно-каркасной структурой. С целью установления закономерности между химическим составом, атомной структурой и физическими свойствами в настоящей работе были выращены кристаллы КТР с различным содержанием достаточно редкого элемента цинка и исследованы их свойства.

Для выращивания кристаллов KTiOPO_4 с цинком был использован метод спонтанной кристаллизации из нестехиометрических составов в четверной системе $\text{K}_2\text{O} - \text{TiO}_2 - \text{ZnO} - \text{P}_2\text{O}_5$ при замещении от 0.5 до 10 мол.% TiO_2 на ZnO . Полученные образцы были хорошего оптического качества и не имели включений растворителя. Средний размер кристаллов составил 6-7 мм. Температура плавления возрастала с увеличением содержания цинка. Параметры элементарной ячейки изменились незначительно. По данным химического анализа содержание цинка в кристаллах не превышало 0.4-3.6 %, и имел место дефицит калия в структуре.

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости и проводимости выращенных кристаллов исследовались на частоте 1 МГц в интервале температур от 20 до

950°C. Наблюдалось значительное возрастание релаксационного максимума в области 300 - 600°C, связанного, согласно литературным данным, с вакансиями калия в каналах структуры, увеличивалась и интенсивность сегнетоэлектрического фазового перехода с области 940°C. Проводимость кристаллов возрастала скачком почти на порядок в области малых концентраций цинка и далее почти не изменялась с ростом содержания примеси. Подобное поведение свойств можно понять, исходя из предположения, что цинк создает дополнительные вакансии калия в каналах. При этом он находится либо в самих каналах, и тогда механизм вхождения примеси в структуру KTiOPO_4 с учетом электронейтральности можно представить в виде $\text{K}_{1-x}\text{TiZn}_x\text{OPO}_4$, либо Zn замещает фосфор, что также должно приводить к увеличению числа вакансий K в туннелях. В последнем случае механизм замещения можно описать следующим образом: $\text{KTiZn}_x\text{OP}_{1-x}\text{O}_4$. С целью получения точной схемы вхождения цинка в кристаллическую решетку КТР предполагается провести прецизионное исследование атомной структуры полученных кристаллов.

Исследование фазовых переходов в системе Bi_2WO_6 - Bi_2MoO_6

Рудницкая О.Г.

аспирант

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

физический факультет, Москва, Россия

E-mail: rudnitskaya@polly.phys.msu.ru

Висмутсодержащие соединения со слоистой перовскитоподобной структурой, такие как вольфрамат висмута Bi_2WO_6 и молибдат висмута Bi_2MoO_6 отличаются необычным сочетанием сегнетоэлектрических свойств и аномально высокой электропроводности, связанной с подвижностью анионов кислорода. Каждое из этих соединений отличается сложным полиморфизмом. Bi_2MoO_6 в области температур выше комнатной испытывает три фазовых перехода. Первый переход происходит при температуре 350°C из одной полярной ромбической фазы (P2_{1ab}) в другую ($2mm$), затем при 604°C наблюдается сегнетоэлектрический фазовый переход в неполярную фазу (mmm). Дальнейшее увеличение температуры до 675°C влечет за собой необратимый реконструктивный фазовый переход в моноклинную фазу ($\text{P2}_1/c$). Для вольфрамата висмута известны следующие фазовые переходы: при температуре 700°C из полярной ромбической фазы (P2_{1ab}) в полярную фазу (B2ab), и в области 960°C сегнетоэлектрический фазовый переход с изменением структуры в моноклинную фазу (B2ab). Соответствующий сегнетоэлектрический фазовый переход с изменением структуры из ромбической фазы B2ab в моноклинную B2ab является нетипичным в теории фазовых переходов, поэтому возникает вопрос о наличии у BW двух близко расположенных фазовых переходов в области 960°C.

В данной работе было проведено исследование фазовых переходов твердых растворов в системе Bi_2WO_6 - Bi_2MoO_6 и установлена аналогия в характере и количестве фазовых переходов для вольфрамата и молибдата висмута путем изучения тепловых и электрофизических свойств.

Для выяснения влияния состава на полиморфизм была синтезирована серия керамических образцов $\text{Bi}_2\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_6$ с содержанием молибдена от 0 до 100%. Использовались особо чистые реактивы Bi_2O_3 , WO_3 и MoO_3 . Синтез поликристаллических образцов проводился при температурах 600°C и 800°C. Рентгенофазовый анализ проводился при комнатной температуре на дифрактометре DRON-2.0 ($\text{CuK}\alpha$ -излучение). Калориметрия проведена на синхронном термическом анализаторе NETZSCH STA 449 C в области температур 30-1000°C (кривые снимались при нагреве и охлаждении образцов). Температурные зависимости электропроводности и диэлектрической проницаемости были

измерены в области 30 – 960°C на частоте 1 МГц с помощью моста Тесла ВМ 431 Е на образцах с платиновыми электродами.

По данным калориметрии для поликристаллов со структурой ВВ на кривых нагрева в области 960°C обнаружен только один пик, соответствующий фазовому переходу, но при охлаждении наблюдается раздвоение пика. На этом основании можно сделать вывод о наличии двух близко расположенных фазовых переходов. Температуры сегнетоэлектрического фазового перехода из полярной в неполярную фазы для образцов системы $\text{Bi}_2\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_6$ были определены по пикам на кривых диэлектрической проницаемости. Для вольфрамата висмута эта температура составила 930 °С. На температурной зависимости электропроводности при температуре 960°C наблюдается изгиб и при дальнейшем повышении температуры поликристалл разрушается, поэтому указанную аномалию можно связать с реконструктивным фазовым переходом. Таким образом, проведенное комплексное исследование позволило для Bi_2WO_6 разделить фазовый переход в области 960 °С на сегнетоэлектрический фазовый переход при 930°C и реконструктивный фазовый переход при 960°C.

Исследование пленок Si/SiO₂ методом ЭПР спектроскопии.

Скуридина Дарья Дмитриевна

Студентка

Московский Государственный Университет имени Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: skuridinad@rambler.ru

Актуальность исследования пленок Si/SiO₂ обусловлена прежде всего их применением в МДП-структурах. Исследуемые нами пленки кремния были приготовленным методом вакуумно-плазменного осаждения из газовой фазы при температуре 300°C и давлении газов 0.3 Торр. В качестве подложки применялось стекло марки Corning 7059. Использовалась смесь газов в следующих пропорциях: SiH₄ : H₂ : SiF₄= 1:100:5; 1: 80:5; 1: 80: 0,2. Скорость роста пленки 20 нм/мин, толщина пленок составила примерно 1 мкм.

Была изучена природа дефектов в полученных пленках. Обнаружено, что основным типом дефектов являются А-центры (дефекты типа вакансии кислорода [1,2]) (рис.1). Далее в плоскости образца прикладывалась напряженность $U=100$ В. Сравнивая спектр ЭПР исходного образца со спектром образца, подвергнутого воздействию электрического поля, была выявлена следующая особенность: одновременное изменение интенсивности и положения по магнитному полю линий ЭПР, обусловленных разными структурами (атомными конфигурациями) А-центров. На рис.1 наблюдаемые разновидности данных парамагнитных центров обозначены ПЦ1 и ПЦ2. Как видно из рис.1, количество парамагнитных А-центров одного типа увеличивается настолько, насколько уменьшается концентрация другого типа. Меняя величину U , можно управлять концентрацией А-центров различного типа.

Для объяснения механизма перестройки атомной конфигурации А-центров под действием внешнего электрического поля необходимы дальнейшие исследования.

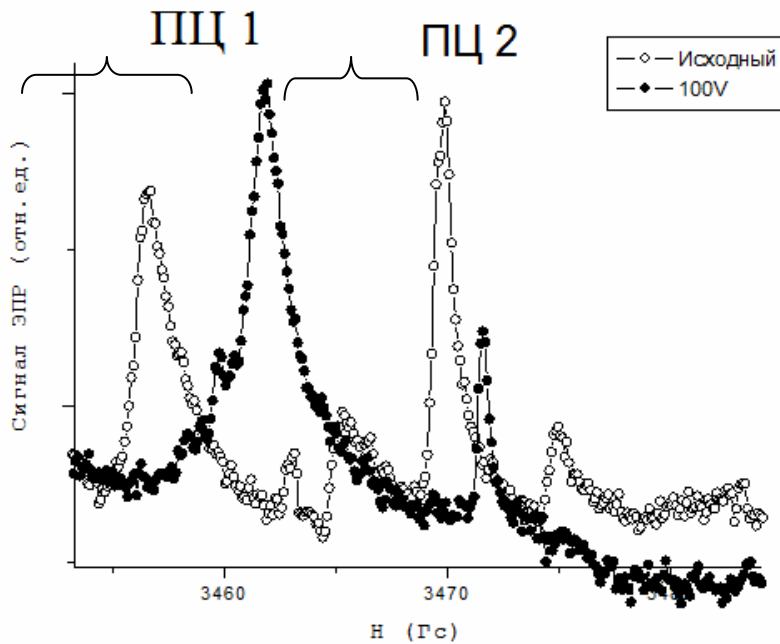


Рис 1. ЭПР спектры образца до и после приложения напряжения.

Литература

1. A.G. Kolosyuk, A.M. Kraitchinskii, M.M. Kras'ko, V.B. Neimash, V.V. Voitovych, V. YU. Povarchuk, O.M. Kabaldin, "Temperature influence on the formation of defects in n-Si irradiated with electrons" // ISSN 0503-1265. Ukr. J. Phys. 2007. V. 52, N 7.
2. C. A. Londos, M. S. Potsidi, J. Bak-Misiuk, A. Misiuk, and V. V. Emtsev, "Pressure assisted evolution of defects in silicon" // Cryst. Res. Technol. 38, 1058 (2003).

Исследование свойств атомной и электронной структуры золотых нанопроводов методом первопринципной молекулярной динамики

Смелова Е.М., Цысарь К.М.

Студент, аспирант

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия*

E-mail: smelova_e_m@mail.ru

Уникальные физические свойства наноструктур, такие как магнетизм, квантовая проводимость, высокая адсорбционная способность привлекают к их изучению большое количество научных групп во всем мире [1-6]. Исследование свойств магнитных наноструктур открывает большие перспективы в наноиндустрии и нанотехнологии. Особый интерес представляет изучение одномерных наноструктур - нанопроводов и наноконтактов [1,5,6]. В моей работе проводится теоретическое исследование свойств атомной и электронной структуры золотых одномерных нанопроводов.

Расчеты выполнены методом первопринципной молекулярной динамики на основе теории функционала электронной плотности Томаса Ферми. Для вычислений была использована программа, итерационно решающая самосогласованную систему уравнений Кона-Шэма с использованием PAW - псевдопотенциалов в базисе плоских волн [7,8]. В вычислениях использовались приближения локальной плотности (ЛП) и обобщенного градиента (ОГ) потенциала обменно-корреляционного взаимодействия. Для интегрирования в обратном пространстве задавалась специальная сетка k-точек $4 \times 4 \times 1$ по схеме, предложенной Монкхорстом и Паком [9].

Таблица 1

	ЛП	ОГ	эксп.
параметр решетки, Å	4,07	4,17	4,08
магнитный момент, μB	0	0	0

Первоначально в работе были проведены расчеты основных свойств кристаллической структуры золота в ЛП и ОГ приближениях. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными в таблице 1.

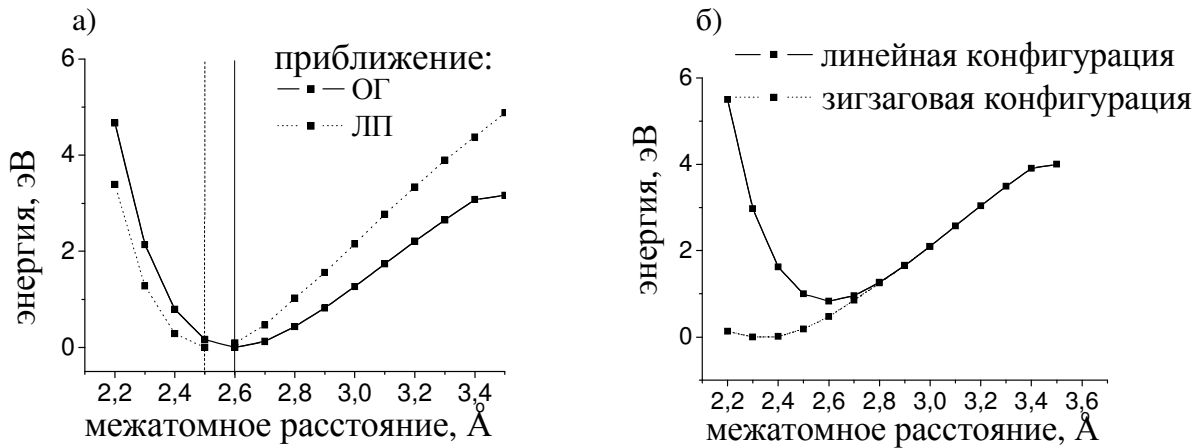


Рис.1 Зависимость полной энергии Au нанопровода от межатомного расстояния: (а) линейная конфигурация (вертикальными линиями отмечены равновесные межатомные расстояния); (б) сравнение энергий линейной и зигзаговой конфигураций.

В работе исследована атомная структура золотых нанопроводов. Были получены равновесные межатомные расстояния для случая линейного золотого нанопровода, которые реализуют минимум полной энергии системы: $2,6\text{Å}$ (ОГ приближение), $2,5\text{Å}$ (ЛП приближение) (Рис.1(а)). Далее в работе была исследована «зигзаговая» конфигурация нанопровода, которая является энергетически выгодной в случае сильно сжатой цепи золотого одномерного провода для межатомных расстояний меньших $2,8\text{Å}$ (Рис.1(б)). Равновесное межатомное расстояние для зигзаговой конфигурации $2,3\text{Å}$ (ОГ приближение). При растяжении цепи Au нанопровод переходит в линейную конфигурацию.

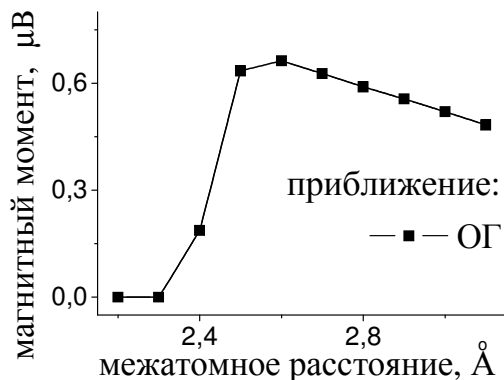


Рис.2 Зависимость магнитного момента Au нанопровода от межатомного расстояния.

В ходе первопринципных вычислений было обнаружено наличие магнитных свойств у Au нанопроводов и доказано, что для Au проводов существует магнитное решение. В работе было зафиксировано появление локальных магнитных моментов значительной величины $\sim 0,6\mu\text{B}$ (Рис.2). Серия магнитных расчетов показала, что величина магнитного момента зависит от расстояния между атомами золота в цепи нанопровода (Рис.2).

Литература

1. Tomoko Matsuda and Tokushi Kizuka, Palladium Wires of Single Atom Width as Mechanically Controlled Switching Devices. *Japance Journal of Applied Physics*, 45, 50.

2. Varlei Rodrigues, Jefferson Bettini, Paulo C. Silva, and Daniel Ugarte, Avidence for Spontaneous Spin-Pollarized Transport in Magnetic Nanowires, *Phys. Rev. Let.*, 91,096801, (2003).

3. Delin, E. Tosatti, R. Weht, Delin, *Phys. Rev. Let.*, 96,079702 (2006).

4. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, W. Hergert, A. M. Saletsky, P. Bruno and I. Mertig, Magnetism and structure of atomic-size nanocontacts. *Phys. Rev. B*, 70, 195420 (2004).

5. N. V. Skorodumova, S. I. Simak, A. E. Kochetov, and B. Johansson, *Phys. Rev. B*, 75, 235440 (2007).

6. Y. Takai, [T. Kawasaki](#), [Y. Kimura](#), [T. Ikuta](#), and [Ryuichi Shimizu](#), *Phys. Rev. Let.*, 87, 106105 (2001)

7. G. Kresse and J. Furthmuller. Ef_ficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54:11169, (1996).

8. P. Blochl. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 50, 17953 (1994).

9. H.J. Monkhorst and J.D. Pack, *Phys. Rev. B*, 13, 5188 (1976).

Расчет термодинамических свойств меди методом молекулярной динамики

Степанюк Олег Валерьевич

Физик

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

Физический Факультет, Москва, Россия

E-mail: olegsomewere@gmail.com

Компьютерные методы моделирования физических свойств конденсированных систем представляют большой интерес для фундаментальных и прикладных исследований новых материалов. В работе показано, что использование многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия в молекулярно-динамических расчетах позволяет с хорошей точностью описывать термодинамические характеристики систем.

Для нахождения термодинамических характеристик ключевым является определение функции состояний (статистической суммы Z):

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \exp\left(-\frac{H(p, q, T)}{kT}\right) d\Gamma, \quad (1)$$

где $H(p, q, T) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + E(q_1, q_2, \dots, q_N)$ – классическая функция Гамильтона системы,

$d\Gamma = d^{3N}p \, d^{3N}q$ – элемент фазового объема ($d^{3N}p = \prod_{i=1}^N dp_{xi} dp_{yi} dp_{zi}$, $d^{3N}q = \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dz_i$), h –

постоянная Планка, k – постоянная Больцмана. В данной работе предлагается использовать метод МД для вычисления интеграла (1) и находить термодинамические характеристики, которые определяются производными от $\ln(Z)$. Значение C_v , полученное

в нашем расчете для $T = 300$ К, равняется $395 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$, то есть очень близко к

экспериментальному значению $380 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$. Это показывает, что предложенный в работе

метод позволяет вычислять C_v с высокой точностью. В исследуемом температурном интервале C_v практически не изменяется с температурой, что согласуется с экспериментальными данными и другими расчетами.

Показан и другой способ определения C_v по изменению энергии системы с температурой $C = \frac{\partial E(T)}{\partial T}$ и продемонстрировано, что температурные изменения C_v , рассчитанные двумя подходами очень близки.

Наш метод может быть так же использован для расчета ТД свойств наноструктур при различных температурах.

Литература

1. D.W Heerman. // Computer simulation methods in Theoretical Physics. Springer Verlag. 1990.
2. D.W Brenner. // Phys.Stat.Sol(b) 217, 23 (2000).
3. L. Miao, V.R. Bhetanabota, B. Joseph. // Phys. Rev. B 72, 134109 (2005)
4. J. Wang, X. Chen, G. Wang, B. Wang, W. Lu, J. Zhao // Phys. Rev B 66, 085408 (2002)
5. H. E. Aeper, P. Politzer // Int. J. Quant. Chem, 760, 670 (2000)
6. H. E. Alper. P. Politzer // J. Mol. Struct (Theochem) 487, 117 (1999)
7. F. Cleri, V. Rosato // Phys. Rev. B 48, 22 (1993)
8. В.Г. Левич, Курс Теоретической Физики, Т.1, Наука (1969).

Влияние гидрирования на характер фазовых превращений в фольгах сплава Pd-Y¹¹

Степенко С.О., Уманская Н.А.

Студент, студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: evans86@mail.ru, natalie-umanskaya@yandex.ru

В настоящее время ведется активный поиск возобновляемых, экологически чистых источников энергии, одним из которых рассматривается водород. Для получения высокочистого водорода используются фольги из палладия и сплавов на его основе, которые обладают высокой степенью водородопроницаемости. С этой точки зрения одними из перспективных являются сплавы системы Pd-Y, способность которых поглощать водород в некотором интервале концентраций иттрия в 2-3 раза выше, чем у сплавов системы Pd-Ag и В1, используемых в промышленности в настоящее время. Кроме того, легирование палладия атомами иттрия увеличивает прочностные характеристики сплавов, что должно положительно сказаться при эксплуатации мембран для получения высокочистого водорода. Однако в таких системах после их гидрирования в процессе релаксации могут происходить фазовые превращения, поскольку большое число вакансий, поступающих в матрицу сплава при гидрировании, и большое число атомов водорода увеличивают диффузионную подвижность атомов компонент сплава.

Методами рентгендифракционного анализа было проведено изучение характера фазовых превращений, идущих в фольгах сплава Pd-8,8ат.%Y после трехкратного насыщения их водородом электролитическим методом в процессе длительной дегидрогенизации.

Впервые для сплава Pd-8,8ат.%Y, находящегося при температуре насыщения водородом вблизи двухфазной области в процессе релаксации после гидрирования, наблюдали немонотонные фазовые превращения. Было установлено, что насыщение водородом исследуемой фольги и ее релаксация в течение 800ч. при комнатной температуре приводят к образованию в ней следующих фаз: фазы Pd₇Y-H, обогащенной водородом, α-твердого раствора Pd-8ат.%Y-H, и фазы, в которой концентрация иттрия понижается до 4ат.%. При дальнейшем увеличении времени релаксации обнаружено, что фаза Pd₇Y-H преобразуется в фазу Pd₃Y, которая практически не содержит водород. Для фазы Pd-4ат.%Y-H наблюдали уменьшение как концентрации атомов иттрия, так и водорода. Через 13600ч. релаксации для этой фазы установлено существенное

¹¹ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№ 09-02-90441).

уменьшение периода решетки, что свидетельствует о ее преобразовании в фазу практически чистого палладия с большим количеством вакансий (до 6 ат.%).

Также обнаружено, что атомы иттрия в исходном состоянии исследуемого образца распределены неравномерно, что ведет к неравномерному распределению атомов водорода при гидрировании. После насыщения атомы водорода двигаются в те области, где концентрация иттрия выше, поскольку он имеет большее сродство с водородом, чем палладий. Было установлено, что растворимость водорода в исследуемой фольге зависит не только от состава сплава, но и от его структурного состояния.

Дано объяснение полученных результатов.

Литература

1. Авдюхина В.М., Ревкевич Г.П., Назмутдинов А.З., Бурханов Г.С., Рошан Н.Р., Кольчугина Н.Б. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2007, № 10, с.9.

Исследование структурных, оптических и магнитных свойств титаната бария, имплантированного ионами кобальта¹

Халитов Н. И.²

студент

Казанский Государственный Университет им. В.И. Ульянова-Ленина, Казань, Россия

E-mail: khalitovn@gmail.com

В настоящее время мультиферроики – наноконпозиты на основе дисперсии магнитных наночастиц в сегнетоэлектрических (или пьезоэлектрических) матрицах являются предметом интенсивных научных исследований. Титанат бария (BaTiO_3) является сегнетоэлектриком и диамагнетиком при комнатной температуре. С целью синтеза на его основе нового мультиферроэлектрического материала в приповерхностный слой монокристаллических пластинок BaTiO_3 были имплантированы ионы магнитной примеси кобальта с высокой концентрацией. Имплантация ионов Co^+ , ускоренных до энергии 40 кэВ, в (100)-пластинки BaTiO_3 проводилась на ионно-лучевом ускорителе ИЛУ-3 при плотности ионного тока 8 мкА/см^2 с дозами в интервале $0.5\text{-}1.5 \times 10^{17}$ ион/см².

В данной работе представлены результаты исследования влияния имплантации кобальта и последующего термического отжига на модификацию структурных, оптических и магнитных свойств монокристаллических пластинок титаната бария. Термический отжиг был выполнен в муфельной печи с кварцевым держателем образцов в атмосфере воздуха. Отжиг образцов осуществлялся в несколько стадий с целью детального исследования влияния температуры и продолжительности отжига на их физические свойства. С использованием программного пакета SRIM-2006 были выполнены расчеты глубинных профилей распределения внедренной примеси кобальта в матрице BaTiO_3 с учетом интенсивного распыления подложки во время ионного облучения. Элементный состав и морфология поверхности как имплантированных кобальтом, так и последовательно отожженных пластинок BaTiO_3 были исследованы на сканирующем электронном микроскопе «Zeiss» EVO-50XVP. Оптические спектры отражения и поглощения были записаны на спектрофотометре Hitachi 330. Магнитные свойства исследовались методами индукционной магнитометрии на экспериментальном магнитометре при комнатной температуре.

Анализ результатов проведенных исследований показал, что с увеличением дозы имплантации происходит рост концентрации кобальта в облученном слое – исходно бледно-желтые пластинки титаната бария приобретают серый цвет с металлическим блеском. При этом оптическая прозрачность пластинок существенно снижается из-за радиационного повреждения кристаллической структуры титаната бария. Основным радиационным дефектом является кислородная вакансия. После термического отжига

имеет место незначительное снижение концентрации кобальта и формирование на поверхности пластинок BaTiO_3 развитого рельефа. Прозрачность пластинок в видимом диапазоне длин волн восстанавливается. С другой стороны, в ультрафиолетовом диапазоне длин волн обнаружен необычный оптический эффект – существенное снижение отражательной способности пластинок BaTiO_3 , содержащих примесь кобальта. С ростом дозы (концентрации) внедренного кобальта имплантированные пластинки BaTiO_3 проявляют последовательно суперпарамагнитный и ферромагнитный отклик при комнатной температуре. Анализ угловых зависимостей формы и параметров регистрируемых петель магнитного гистерезиса, а также моделирования кривых намагничивания свидетельствует о формировании гранулярной пленки кобальта в имплантированном слое титаната бария.

¹ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в ходе выполнения курсовых работ в лаборатории Радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН в 2008-2009 гг.

² Автор выражает признательность РФФИ, грант 07-02-00559а, за финансовую поддержку исследований и к.ф.-м.н. Хайбуллину Р.И за помощь в подготовке тезисов.

МЕССБАУЭРОВСКИЕ И МАГНИТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ СПИНОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КОМПЛЕКСАХ ЖЕЛЕЗА (II) С ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМЕДАЗОЛА

Хенкин Л. В.

студент

*Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия*

E-mail: Lev_ne@mail.ru

Спиновые кроссоверы - комплексы переходных металлов, обладающие способностью изменять спиновое состояние центрального катиона металла под действием каких-либо внешних факторов (давления, температуры, излучения и др.). Эти соединения находят практическое применение в качестве сенсоров, оптических элементов дисплеев, датчиков давлений и температур [1].

Изменение спинового состояния центрального катиона металла в этих комплексах приводит к закономерному изменению физико-химических свойств всего соединения в целом (магнитных, оптических, реакционной способности и т.д.). Для Fe(II) комплексов происходит изменение в процессе спинового перехода магнитных свойств: в низкоспиновом состоянии они являются диамагнетиками ($S=0$), а в высокоспиновом состоянии – парамагнетиками ($S=2$). Целью настоящей работы явилось исследование структурных и магнитных свойств впервые синтезированных комплексов Fe(II) с лигандами на основе бензимидазола, имеющих разные анионные группы (Cl_2 и ClO_4), а также разную длину алкильного «хвоста» лиганда.

Основными методами исследования были мессбауэровская спектроскопия с регистрацией спектров в широком интервале температур (80-600 К) и измерение магнитной восприимчивости. Эти измерения выявили температурные интервалы спиновых превращений для синтезированных соединений и позволили установить зависимости между их строением (химическим составом) и температурными условиями изменения спинового состояния. Было выявлено также, что ионы железа находятся в двух структурно-неэквивалентных положениях.

Литература

1. J.A.Real, A.B.Gaspar, M.C.Munoz. Thermal, pressure and light switchable spin-crossover materials//Dalton Trans, 2005, p.2062-2079.

Влияние фотоэффекта на чувствительность фликкер-шумового газового сенсора.

Чапкевич А. А.

Научный сотрудник

*Российский государственный университет нефти и газа имени И.М.Губкина,
кафедра физической и коллоидной химии, Москва, Россия*

E-mail: chapkevich@mail.ru

В представленной работе анализируются новые данные, полученные в экспериментах по изучению рабочих характеристик фликкер-шумовых газовых сенсоров изготовленных из особоочищенного монокристаллического кремния (удельное сопротивление больше 20 кОм см; концентрация кислорода меньше 10^{15} см⁻³) p-типа проводимости, марки БДМав. Значения концентрации носителей заряда (дырок) при комнатной температуре (T=300К) составляют в таком материале $p = 1,55 \times 10^{11}$ см⁻³; подвижность дырок $\mu_p = 600$ см²/Вс, подвижность электронов $\mu_n = 1500$ см²/Вс. Пластины вырезались в плоскости {111}.

Экспериментальные данные показывают, что в охлажденном до 248К газочувствительном слое ШГС за счет фотогенерации носителей заряда на длине волны 0,63 мкм детектируемый сигнала примерно в 10 раз выше по сравнению с аналогичным при 273К и в 100 раз выше на длине волны 0,54 мкм.. Кроме того, при постоянном потоке анализируемого газа, эффект усиления сигнала ШГС от воздействия световых импульсов с длиной волны 0,54 мкм, примерно на два порядка превышает эффект усиления возникающий при периодически изменяющемся потоке без засветки. При облучении газочувствительного слоя ШГС красным светом при одинаковой температуре режим напуска анализируемого газа не влияет уровень фликкер-шума..

Рассматривая ФШГС, подвергающийся оптическому воздействию, как источник фотоЭДС можно оценить его количественные характеристики. Расчеты показывают, что в частотном диапазоне 0,1 – 1,0 Гц выходное напряжение ФШГС при комнатной температуре увеличивается в от 20 до 40 раз. При понижении температуры до 248К этот же показатель увеличивается еще в 10 раз. При этом обнаружен эффект возникновения автоколебаний в спектре НЧ фликкер-шума с характеристическим временем порядка 1 сек при подаче световых импульсов с частотой 1 Гц.

В работе не рассматривается механизм передачи энергии за счет возбуждения объемных дефектов без генерации свободных носителей, т.к. используемый нами высокоомный кремний имеет минимальное количество таких дефектов. Предполагается, что наличие нескольких слоев уже адсорбированных поверхностью молекул в целом не отменяет процессов отбора носителей заряда из объема полупроводника и их последовательного перехода по слоям молекул от внутренних к наружным.

Представленные в работе данные позволяют:

1. Использовать фотостимулирование на поверхности ШГС адсорбционно-десорбционных процессов и осуществлять регулирование чувствительности ШГС при измерениях в различных условиях.
2. Оптимизировать режимы работы шумового газового сенсора для различных условий измерений и веществ.

Литература:

1. Патент на полезную модель № 79182, приоритет от 11.07.2008 г. «Газовый сенсор и устройство для контроля газовой среды». Авторы: Чапкевич А.Л., Чапкевич А.А., Маковийчук М.И.

2. Makoviychuk M.I., Chapkevich A.A. Low frequency current noise in silicon micro sensors: a new perspective on individual defects and flicker noise. // Proceed. Third Int. Workshop “Relaxed, Nonlinear and Acoustic Optical Processes; Materials - Growth and Optical

Properties” – RNAOPM-2006. (September 06 – 10, 2006, Lutsk, Ukraine). - Lutsk: Volyn University Press “Vezha”, 2006. – P.42 – 45.

Влияние термомеханической обработки углеродного волокна на текстуру

Чуриков В.В.¹²

Аспирант

Челябинский Государственный Университет,
физический факультет, Челябинск, Россия

E-mail: briket_85@mail.ru

Уникальные физико-механические свойства наноструктурированного углеродного волокна (УВ) обусловлены в том числе высокой степенью текстуры материала, которая, как и размеры областей когерентного рассеивания (ОКР), зависит от режимов термомеханической обработки. Для рассмотрения влияния скорости повышения и продолжительности высокоскоростной термомеханической обработки (ТМО) на текстуру материала изготовлены образцы волокна, отличающихся временем переноса с комнатной температуры на высокую и продолжительностью пребывания в печи при $\sim 3000^\circ\text{C}$ в условиях изотермического поля.

Текстурные исследования выполнены с помощью рентгеновского дифрактометра D8 ADVANCE (фильтрованное CuK_α -излучение), программное обеспечение XRD Commander (модуль XRD Wizard). Для характеристики текстуры материала использовали отношение площадей дифракционных максимумов 002 ОКР, ориентированных под углом φ к оси волокна, равным 0 и 1 градус, к сумме площадей всех максимумов ОКР, регистрируемых с шагом 1 градус. Относительное удлинение нити Δl в процессе ТМО составило от 5,48 до 7,6%.

В результате термообработки в течение 2,2 с формируется волокно, средние размеры ОКР которого при значении $\varphi = 0$ градусов L_{002} и L_{110} составляют ~ 8 и ~ 15 нм соответственно, а величина F достигает 0,31. При более быстром перемещении волокна в печь и уменьшении продолжительности термообработки до 1,8 с процесс перекристаллизации материала развивается более активно, средние размеры L_{002} и L_{110} возрастают до ~ 9 и ~ 16 нм соответственно, а величина F в пределах 0,31 – 0,35. Дальнейшее сокращение времени переноса волокна в печь и продолжительности термообработки обуславливает формирование меньших по размеру ОКР, при этом значение F также уменьшается.

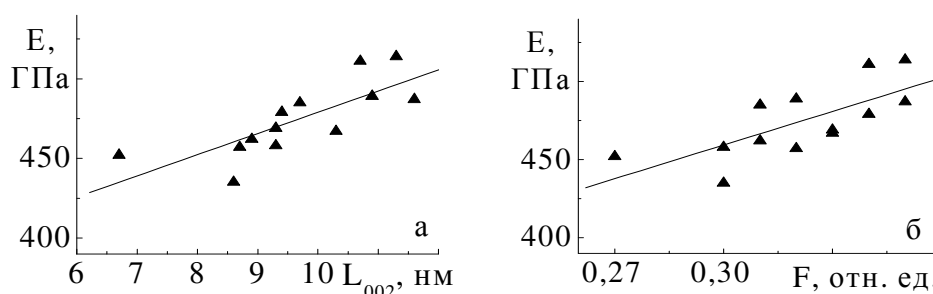


Рис.1. Взаимосвязь модуля Юнга E с размерами областей когерентного рассеивания (а) и степенью текстуры филамента (б).

По мере увеличения угла φ средние размеры ОКР L_{002} всех исследованных образцов постепенно уменьшаются, а значение межслоевого расстояния d_{002} увеличивается.

¹² Автор выражает признательность профессору, д.х.н. Тюменцеву В.А. за помощь в подготовке тезисов.

Увеличение относительного удлинения волокна Δl при каждом временном режиме термообработки обуславливает формирование более крупных ОКР. Между средними размерами ОКР L_{002} , степенью текстуры F и значением модуля Юнга углеродного волокна наблюдается достаточно четкая взаимосвязь (рис.1).