

# Моделирование диффузионных свойств точечных дефектов и их температурной зависимости для ОЦК и ГЦК структур

*Валикова Ирина Валентиновна*

*аспирант*

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет), Москва, Россия*

*E-mail: avn46@mail.ru*

Работа посвящена изучению диффузионных характеристик точечных дефектов в металлах, в частности – характеристик, описывающих влияние давления на процесс диффузии. Разработана новая модель, позволяющая самосогласованным образом рассчитать атомарную структуру в окрестности дефекта и константы, определяющие смещения атомов в упругой среде, окружающей расчетную ячейку.

В нашей модели [1] смещения всех атомов в упругой среде сводятся к решениям уравнения статической изотропной упругости, имеющим вид:

$$\mathbf{u}_1 = C_1 \cdot \mathbf{r}/r^3, \quad \mathbf{u}_2 = C_2 \nabla \left[ \frac{1}{r^5} \left( \frac{x^4 + y^4 + z^4}{r^4} - \frac{3}{5} \right) \right], \quad (1)$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  - расстояние до дефекта,  $C_1, C_2$  – константы.

В соответствии с известными из термодинамики выражениями, полные объемы образования и миграции дефекта определяется как сумма двух частей. Первая часть связана с влиянием давления на энергию системы [1], а вторая – с изменением объема системы, связанного с выходом атома на поверхность при образовании вакансии, и с релаксацией атомарной структуры в окрестности дефекта и перескакивающего атома в седловой позиции. Большинство авторов не принимают в расчет первое слагаемое. Однако наши результаты показывают [1], что это слагаемое в объеме образования следует учитывать, т.к. оно сравнимо по величине с объемом релаксации.

При моделировании миграции в нашей модели учитывается, что скачок атома в вакансию происходит за время сравнимо со средним периодом колебаний атомов в узлах кристаллической решетки и, следовательно, только атомы первых координационных сфер, окружающие перескакивающий атом, успевают сместиться заметным образом. Т.е. за время скачка изменения объема кристалла как целого не произойдет. Для того чтобы учесть этот эффект, при перемещении атома в вакансию на каждом шаге проводилась релаксация только тех атомов, которые находятся на расстоянии меньше 5-ти параметров решетки от дефекта. Эта величина выбрана (5 параметров решетки) на основании результатов МД моделирования. Тогда вклад в объем миграции дефекта будет давать только слагаемое, связанное с зависимостью энергии системы от давления.

С использованием парных и многочастичных потенциалов проведено моделирование атомарной структуры и рассчитаны энергии и объемы образования точечных дефектов для различных ОЦК и ГЦК металлов. Полученные результаты подтверждают устойчивую сходимость итерационной процедуры, связанной с последовательной оптимизацией атомарной структуры в окрестности дефекта и параметров, определяющих смещения атомов в упругой среде.

Проведено моделирование процесса перескока атома в вакансию и получены соответствующие потенциальные рельефы, что позволило рассчитать высоты барьеров, определяющих диффузию в этих системах.

Далее в работе решается задача о температурной зависимости структуры и диффузионных характеристик дефектов, в частности, определяющих влияние давления на диффузию. Основываясь на результатах моделирования атомарной структуры при нуле температур и используя известные из эксперимента коэффициенты линейного термического расширения  $\alpha$ , производился расчет нового взаимного расположения атомов (атомарной структуры в окрестности дефекта и перескакивающего атома в седловой позиции) при различных температурах:

$$(x_i - x_j)(T) = (x_i - x_j)(0) (1 + \alpha T), \quad (2)$$

а также определяемых этой структурой характеристик (энергий образования, объемов образования и миграции и высот барьеров) (Рис. 1, 2).

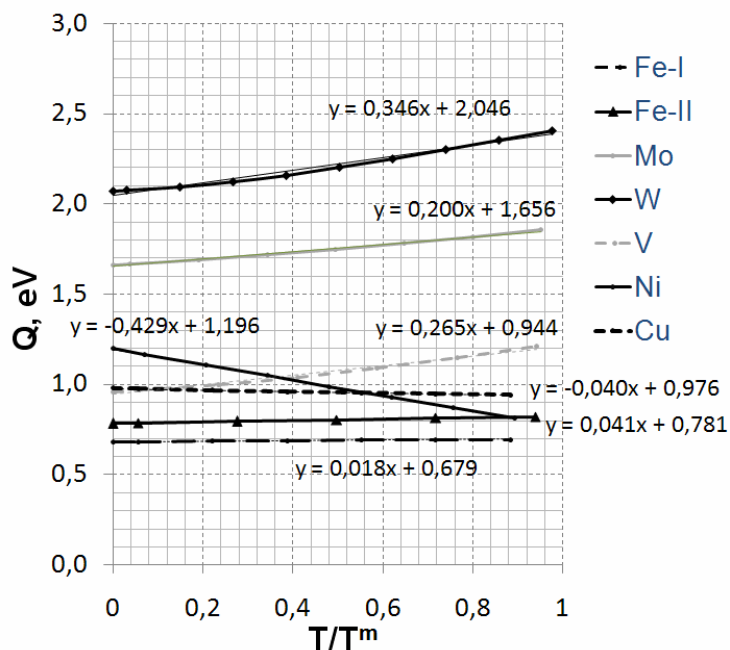


Рис.1. Зависимость высот барьеров от температуры.

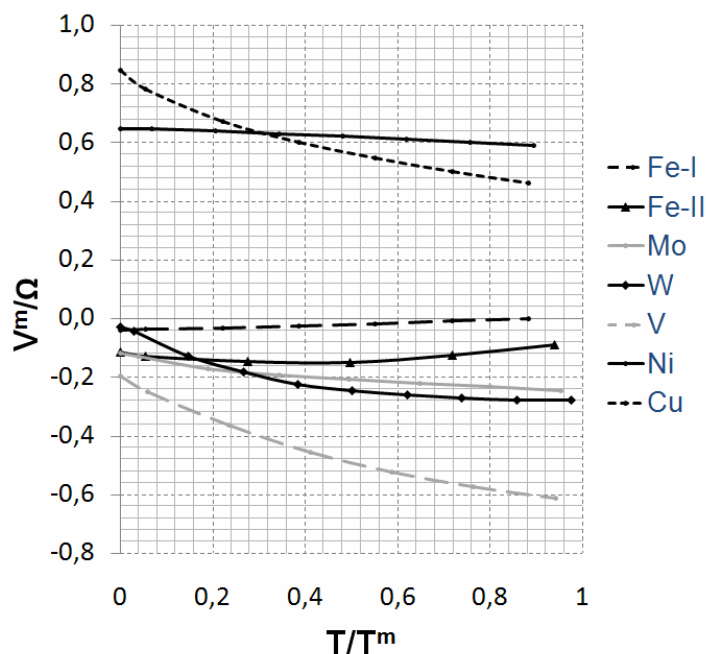


Рис.2. Зависимость объемов миграции от температуры

(Fe-I – потенциал Джонсона, Fe-II, Cu – многочастичные потенциалы Экланда, Mo, W, V – многочастичные потенциалы Дерлета, Ni – потенциал Фаркаш).

Как видно из Рис. 1, высоты потенциальных барьеров возрастают с увеличением температуры в ОЦК металлах и убывают – в ГЦК металлах. В интервале температур от  $1/2 T^m$  до  $T^m$ , где обычно и реализуется объемная диффузия, температурная зависимость высот потенциальных барьеров близка к линейной  $Q = Q_0 + AT$ . Таким образом, энергии миграции, получаемые в эксперименте, не должны зависеть от температуры, а в предэкспоненциальном множителе дополнительный сомножитель, экспоненциально зависящий от параметра  $A$ :  $\exp(-A/k)$ . При этом  $A$  – отрицателен для ГЦК и положителен для ОЦК металлов.

Объемы миграции положительны в ГЦК и отрицательны в ОЦК металлах во всем температурном интервале.

### Литература

1. Валикова И.В., Назаров А.В. (2008) Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на концентрацию и диффузионную подвижность вакансий в ОЦК металлах // Физика металлов и металловедение. Том 105, № 6

## Способ изготовления из металлических икосаэдрических частиц нано- и микроконтейнеров<sup>1</sup>

Власенкова Евгения Юрьевна, Дорогов Максим Владимирович,

Цыбускина Инна Ивановна

аспиранты

Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

e-mail: Vlasencova\_E@tltsu.ru

За последние годы было методом электроосаждения металла получено и исследовано широкое многообразие пентагональных кристаллов [1]. Исследование пентагональных кристаллов икосаэдрической симметрии (рис. 1 а) показало, что в центре пентагональных кристаллов содержится частичная дисклинация. Такая структура обладает большой упругой энергией обусловленной дальнедействующем полем дисклинации, создающем напряжение сжатия в центре и растягивающие напряжения на периферии частицы [2].

При наличии избыточных вакансий и высокой диффузионной активности, поле дисклинации способствует росту полости в частице. Необходимые для этого условия: высокая неравновесная концентрация вакансий образуется уже при получении частиц методом электрокристаллизации металла или последующим нагревом; нагрев так же повышает диффузионную активность.

Эта идея положена в основу создания контейнеров из пентагональных частиц. Предложенный нами способ (в настоящее время патентуется) заключается в следующем:

1. Методом электрокристаллизации металла получают пентагональные икосаэдрические частицы. Внутри них из-за наличия дисклинации и избыточных вакансий формируется рыхлая структура (рис. 1 а).
2. Проводят термообработку полученных частиц при температуре и длительности, обеспечивающих образование полости. Во время термообработки частица теряет огранку (рис. 1 б), на разрезе кристалла четко видно полость, окруженную тонкой оболочкой. При необходимых условиях формируется тонкая оболочка (рис. 1 в), менее 100 нм, по определению такая частица является нанообъектом.

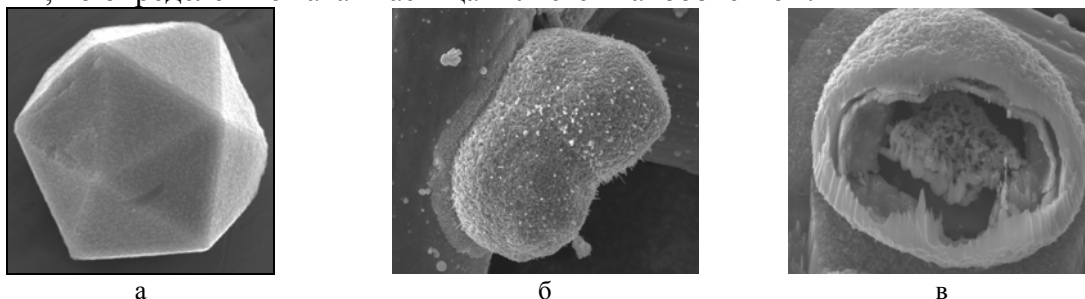


Рис. 1. а – металлическая икосаэдрическая частица после осаждения; б – частица после отжига; в – частица с внутренней полостью, разрезанной с помощью ионной пушки.

Таким образом, из пентагональной микрочастицы получают микро- и наноконтейнеры. Полученные контейнеры можно использовать для хранения и доставки лекарств, радиоактивных веществ и т.д.

### Литература

1. Викарчук А.А., Ясников И.С. Структурообразование в наночастицах и микрокристаллах с пентагональной симметрией, формирующихся при электрокристаллизации металлов. – Тольятти: ТГУ, 2006. – 206с.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке гранта Р-офи № 08-02-99034, под руководством д.ф.м.н., профессора А.А. Викарчука.

2. Колесникова А.Л., Романов А.Е. О релаксации напряжений в пентагональных нитевидных кристаллах. Письма в ЖТФ 2007, т. 33, вып. 20, с. 73-79.

## Моделирование изменения атомарной структуры в окрестности дефектов и их свойств с температурой

**Валикова Ирина Валентиновна<sup>1</sup>, Германов Александр Борисович<sup>2</sup>, Емельянова Марина Владиславовна<sup>2</sup>, Решетникова Елена Васильевна<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>аспирант, <sup>2</sup>студенты

Московский инженерно-физический институт (государственный университет), Москва, Россия

E-mail: [avn46@mail.ru](mailto:avn46@mail.ru)

Многие свойства металлов определяются характеристиками точечных дефектов, которые в свою очередь зависят от атомарной структуры. Изменение этой структуры с температурой позволяет изучить метод молекулярной динамики. Целью этой работы является изучение температурной зависимости атомарной структуры в окрестности дефектов и диффузионных характеристик этих дефектов методами компьютерного моделирования.

В первой части работы методом молекулярной статики изучались особенности атомарной структуры, обусловленные наличием того или иного точечного дефекта. Для этого разработана новая модель, позволяющая самосогласованным образом рассчитать атомарную структуру в окрестности дефекта и константы, определяющие смещения атомов в упругой среде, окружающей расчетную ячейку. При этом предполагается, что смещения всех атомов в упругой среде описываются решениями уравнения статической изотропной теорией упругости, имеющим сферическую и кубическую симметрию [1]:

$$\mathbf{u}_1 = C_1 \cdot \mathbf{r}/r^3 \quad (1)$$

$$\mathbf{u}_2 = C_2 \nabla \left[ \frac{1}{r^5} \left( \frac{x^4 + y^4 + z^4}{r^4} - \frac{3}{5} \right) \right], \quad (2)$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  - расстояние до дефекта,  $C_1, C_2$  - константы.

В соответствии с известными из термодинамики выражениями, объем образования дефекта определяется как сумма двух частей: первая часть  $V_E^f$  связана с влиянием давления на энергию системы [1], а вторая  $V^f$  - с изменением объема системы, связанного с выходом атома на поверхность при образовании вакансии, и с релаксацией атомарной структуры. Большинство авторов не принимают в расчет первое слагаемое. Однако наши результаты показывают [1], что это слагаемое в объеме образования следует учитывать, т.к. оно сравнимо по величине с объемом релаксации. В рамках этой модели определена атомарная структура в окрестности вакансии для ряда ОЦК и ГЦК металлов и рассчитаны объемы  $V_E^f, V^f, V_\Sigma^f$  при нуле температур.

Во второй части работы решается задача о температурной зависимости структуры и характеристик дефектов с использованием результатов, полученных в первой части. Для этого с помощью метода молекулярной динамики сначала моделировалось изменение параметра идеальной решетки с температурой, а затем изменение расстояний между дефектом и атомами первой и второй координационных сфер. При этом соответствующие расстояния определялись как разность усредненных по времени координат атомов. В результате получена зависимость отношений расстояний между дефектом и атомами первой и второй координационных сфер к параметру решетки от температуры (рис. 1). На основании этих данных можно сделать вывод о том, что подобие атомарной структуры в

окрестности дефекта сохраняется с изменением температуры, т.е. все расстояния между атомами системы изменяются пропорционально:

$$(x_i-x_j)(T) = (x_i-x_j)(0) (1+\alpha \cdot T), \quad (3)$$

где  $\alpha$  – линейный коэффициент термического расширения.

Далее, основываясь на результатах моделирования атомарной структуры, полученных на первом этапе, с использованием формулы (3) производился расчет нового взаимного расположения атомов (атомарной структуры в окрестности дефекта) и константы  $C_1$  при различных температурах, а также  $V_E^f, V^f$  и  $V_\Sigma^f$ . Данные расчетов представлены на Рис. 2.

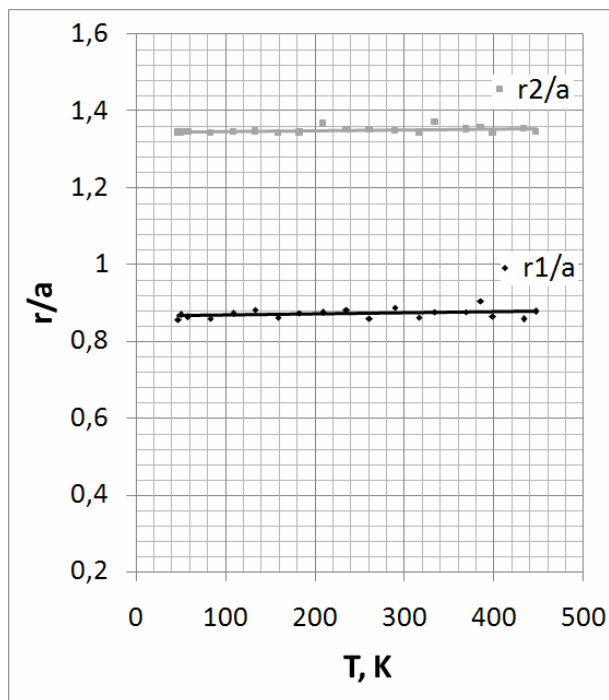


Рис.1. Зависимость отношения расстояний от вакансии до атомов первой и второй координационной сфер к параметру решетки от температуры.

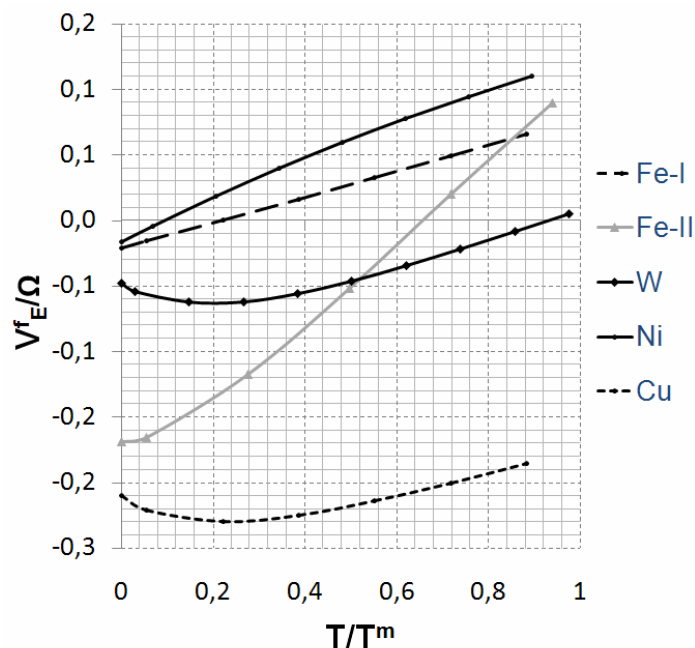


Рис.2. Зависимость  $V_E^f$  от температуры (Fe-I – потенциал Джонсона, Fe-II – многочастичный потенциал Экланда, W – многочастичный потенциал Дерлета, Ni – потенциал Фаркаш, Cu – многочастичный потенциал Экланда).

Из Рис. 2 следует, что величина  $V_E^f$  существенно зависит от температуры. В то время как по вышеприведенным соображениям  $V^f$  от температуры не зависит. Следовательно, температурная зависимость объема образования вакансии определяется зависимостью  $V_E^f$ , вклад которого, как уже отмечалось, в большинстве работ не учитывается.

#### **Литература**

1. Валикова И.В., Назаров А.В. (2008) Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на концентрацию и диффузионную подвижность вакансий в ОЦК металлах // Физика металлов и металловедение. Том 105, № 6

## Роль буферного пористого слоя и легирования диспрозием в гетероструктурах GaInP:Dy/por-GaAs/GaAs(100)

Глотов А.В., Домашевская Э.П., Середин П.В.

Студент

Воронежский Государственный Университет, г.Воронеж, Россия

E-mail: [antglotov@gmail.com](mailto:antglotov@gmail.com)

Интерес к гетероструктурам на полупроводниковых материалах  $A^{III}B^V$  обусловлен их использованием при производстве мощных светоизлучающих устройств. Кроме того, так как редкоземельные элементы обладают сильными магнитными свойствами, введение их в полупроводники, а также полупроводниковые твердые растворы на основе  $A^{III}B^V$  может внести новые степени свободы в материал за счет взаимодействия свободных носителей и магнитных ионов, что в свою очередь открывает новые возможности таких материалов в электронной промышленности.

В работе исследовались эпитаксиальные гетероструктуры, полученные методом МОС – гидридной эпитаксии. Эпитаксиальные слои тройных твердых растворов GaInP толщиной  $\sim 0.2 \mu\text{m}$ , легированные диспрозием, были выращены либо непосредственно на монокристаллических подложках GaAs (100), либо на буферным пористом слое GaAs, сформированном анодным травлением подложки GaAs (100).

Простой расчет дифрактограмм показывает, что параметр эпитаксиального слоя GaInP ( $x \sim 0.50$ ) отличается от параметра кристаллической решетки монокристаллической подложки GaAs (100) на  $\Delta a = 0.0064 \text{ \AA}$ . Ввиду заметного различия параметров пленка-подложка в эпитаксиальном слое твердого раствора возникают существенные механические напряжения, и линии  $K\alpha_{1,2}$  – дублета от этого слоя оказываются очень широкими ( $\Delta K\alpha_1 = 0.28^\circ$ ). Легирование эпитаксиального слоя атомами диспрозия ( $n_{\text{Dy}} \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) снижает напряжения в GaInP и почти в три раза уменьшает ширину дифракционной линии твердого раствора ( $\Delta K\alpha_1 = 0.1^\circ$ ). Выращивание того же легированного твердого раствора на пористом буферном слое в гетероструктуре GaInP:Dy/por-GaAs/GaAs(100) приводит к полному снижению напряжений в эпитаксиальном слое. Линии  $K\alpha_{1,2}$  – дублета от этого слоя наиболее узкие -  $\Delta K\alpha_1 = 0.08^\circ$ , не смотря на большое рассогласование параметров.

Таким образом, в образцах с пористым буфером остаточные внутренние напряжения, вызванные различием параметров решетки поверхностного слоя тройного твердого раствора GaInP и монокристаллической подложки GaAs, перераспределяются в пористый слой, который выступает в роли своеобразной “губки” и полностью снимает внутренние напряжения.

Данные, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа (рис.1) показывают, что в буферном пористом слое GaAs наблюдается неоднородное распределение размера пор. Более крупные поры располагаются на границе с подложкой GaAs (100), тогда как поры меньших размеров преобладают в верхней части пористого слоя ближе к границе раздела с эпитаксиальным слоем GaInP.

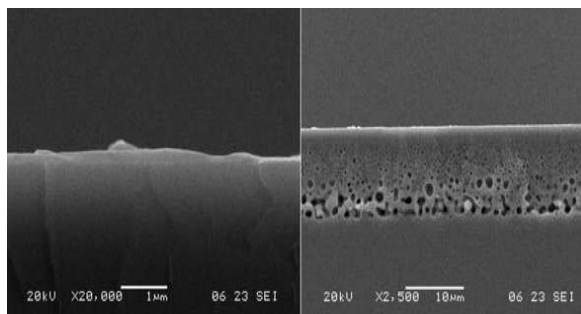


Рис. 1. Изображение поперечного скола образцов гетероструктур GaInP:Dy/GaAs



# Состав и параметры доменов, образующихся в результате спинодального распада четверных твердых растворов в эпитаксиальных гетероструктурах GaInP/Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>/GaInP/GaAs(001)

Гордиенко Н.Н., Домашевская Э.П., Середин П.В.

аспирант

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

E-mail: nikolaygnn@rambler.ru

## Введение

В работе исследовались образцы, изготовленные в Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе РАН методом жидкофазной эпитаксии. Одна партия гетероструктур состояла из двух эпитаксиальных слоев: тройного TP GaInP покрытого слоем четверного TP GaInAsP. Другая партия образцов представляла собой трехслойную эпитаксиальную структуру, состоящую из буферного слоя GaInP, слоя четверного (TP) GaInAsP и покрывающего слоя GaInP.

## Методы

Исследования свойств четверного твердого раствора InGaAsP были выполнены методами фотолюминесценции, просвечивающей электронной микроскопии, сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и дифрактометрии.

## Результаты

В спектрах фотолюминесценции (ФЛ) двухслойных гетероструктур от слоя TP InGaAsP наблюдалась один максимум. Спектры ФЛ образцов трехслойных гетероструктур имеют две полосы: основную, которая присутствует во всех образцах и дополнительную, лежащую в низкоэнергетической области. Твердые растворы InGaAsP, которые имеют в спектрах ФЛ две полосы, представляют собой систему чередующегося твердого раствора и доменов, ориентированных вдоль направления [110] и имеющих микронный размер. Дифрактометрические исследования показали, что в образцах, которые содержат в спектрах ФЛ два пика, имеют два K<sub>α1,2</sub>-дублета от твердого раствора InGaAsP. Один K<sub>α1,2</sub> дублет от TP с большим параметром решетки и второй K<sub>α1,2</sub> дублет от доменов с меньшим параметром решетки.

При образовании TP Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub> в кристаллической решетке происходит замещение атомов Ga и As атомами In и P. При этом значение постоянной кристаллической решетки может изменяться в широком интервале значений в зависимости от состава и подчиняется закону Vegarda, который может быть представлен в первом приближении в виде линейной интерполяции:

$$a(x, y) = a_{InP}(1-x)(1-y) + a_{InAs}(1-x)y + a_{GaAs}xy + a_{GaP}x(1-y)$$

Однако, для четверных TP GaInAsP одному значению постоянной решетки может соответствовать некоторый интервал составов. Поэтому с целью увеличения однозначности следует ввести зависимость состава еще от одной величины – ширины запрещенной зоны. При комнатной температуре это выражение (уравнение Куфала) имеет следующий вид [1]:

$$E_g(x, y) = 1.35 + 0.668x - 1.068y + 0.758x^2 + 0.078y^2 - 0.069xy - 0.0332x^2y + 0.03xy^2$$

## Литература

1. C. Lamberti, Surface Science Reports, 53, (2004).

# Моделирование и рентгеноструктурное исследование кристаллической структуры 2-(*m*-бромбензоиламино)-4,5-диметоксиацетофенона

Гращенко Елена Александровна

доцент

Владимирский филиал Российской Международной Академии Туризма, Владимир,  
Россия

E-mail: lena\_graschenko@mail.ru

В настоящее время широкое распространение получили методы априорного предсказания кристаллических структур [1]. Одним из таких методов является метод дискретного моделирования (МДМ) упаковок молекул в кристалле [2]. Особенностью данного метода является то, что при расчете моделей кристаллической структуры соединения используются дискретная модель молекулы – поликуб (геометрическая фигура, состоящая из маленьких кубиков). Расчет возможных вариантов упаковки поликубов сводится к целочисленным расчетам, не использующим метрические соотношения. После того, как все решения получены, обратный переход от целочисленных соотношений чисел к метрическим, позволяет рассчитать параметры элементарных ячеек и координат атомов для найденных моделей кристаллической структуры. Это позволяет существенно сократить время вычислений по сравнению с традиционными методами генерации, опирающимися на оценки энергии кристаллической решетки или геометрических параметров модели.

Использование МДМ позволяет решать такие задачи как поиск возможных полиморфных модификаций органических соединений и генерации стартовых моделей для уточнения методом наименьших квадратов (МНК) в случае неполных рентгенодифракционных данных. С использованием данного метода были успешно расшифрованы такие структуры как 1-фенил-1-*трет*-бутил-3-метил-1,3-дигидроизобензофурана, *(R)*-[*(R)*-*o*-(1-*N,N*-диметиламиноэтил)фенил]-2,5-диметоксифенил(фенил)метанола. При этом молекулы вышеперечисленных соединений имеют сильно выраженные особенности пространственного строения.

Целью данной работы была проверка возможности использования МДМ для генерации стартовых моделей кристаллической структуры соединения, молекула которого сильно уплощена. В качестве объекта исследования было выбрано соединение 2-(*m*-бромбензоиламино)-4,5-диметоксиацетофенон (I).

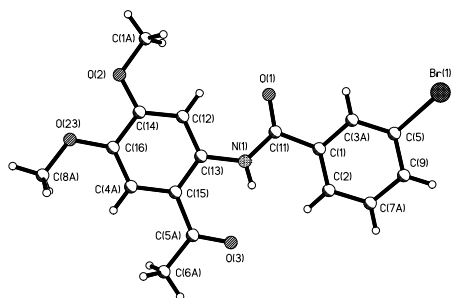


Рис. 1. Вид модели молекулы с нумерацией неводородных атомов

О(2)Н(1)N(1) 144°. Вид модели молекулы с нумерацией неводородных атомов, представлен на рис. 1.

МДМ для данного соединения было рассчитано 575 вариантов его кристаллической структуры, которые были оптимизированы в рамках модели атом-атомных потенциалов. Анализ результатов моделирования будет представлен в докладе.

Модель молекулы исследуемого соединения построена квантово-механическим методом в рамках теории функционала плотности РВЕ при использовании базисного набора *TZ2P* по программе «*PRIRODA*» [3]. Полученная модель молекулы сильно уплощена (максимальное отклонение атомов от средней плоскости 0.44 Å и -0.35 Å) и имеет внутримолекулярную водородную связь N(1)-H(1)...O2, о чем свидетельствуют расстояния N(1)-O(2) 2.607 Å, H(1)-O(2) 1.697 Å и угол

1. Day G.M., Motherwell W.D.S., Ammon H. L. et al.//Acta Cryst. 2005. V. B61. P. 511.
2. Малеев А.В.// Кристаллография. 2001. Т.46. №1. С.19.
3. Laikov D.N.//Chem. Phys. Lett. 1997. 281. P.151-156.

## Емкостная спектроскопия дефектов в кремнии с примесью циркония

*Далиев Шахрух Хожакбарович*

*магистрант II года обучения*

*Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека,  
физический факультет, г.Ташкент, Республика Узбекистан*

*E-mail: dalievshkh@yandex.ru*

Сегодня монокристаллический кремний является основным материалом микроэлектроники. Для контролируемого управления параметрами кремния в последние годы все шире используется легирование нетрадиционными примесями [1-4], примерами таких примесей являются тугоплавкие элементы. Типичные представители этих элементов в кремнии - атомы гафния, молибдена, циркония, ниобия и др.

Поэтому целью данной работы является изучение энергетического спектра дефектов в кремнии, легированном одним из этих элементов – цирконием, введенным в Si диффузионным методом.

В качестве исследуемых образцов использовался монокристаллический кремний n и p-типа проводимости с различными удельными сопротивлениями.

Легирование кремния цирконием производилось диффузионным методом из напыленного слоя Zr особой чистоты в интервале температур  $1000 \div 1250^{\circ}\text{C}$  в течение  $1 \div 50$  часов. Охлаждение образцов после диффузии Zr производилось различными путями. В качестве контрольных использовались образцы n- и p-Si, термообработанные при той же температуре и времени, что и введение Zr в Si.

Результаты измерений показали, что во всех образцах n-Si после легирования цирконием наблюдается увеличение величины удельного сопротивления. В образцах же p-Si значения удельного сопротивления остаются практически неизменными.

Для образцов Si, диффузионно-легированных цирконием, а также подвергнутых контрольной термообработке проводились измерения спектров DLTS и фотоемкости (ФЕ). Анализ спектров DLTS и ФЕ образцов n-Si <Zr> показывает, что присутствие Zr в Si приводит к образованию трех глубоких уровней с фиксированными энергиями ионизации  $E_c - 0.22$  эВ,  $E_c - 0.42$  эВ и  $E_v + 0.30$  эВ, доминирующими являются два последних уровня. Параллельные измерения спектров DLTS и ФЕ в контрольных термообработанных образцах n-Si показали, что в них наблюдается лишь уровень с энергией ионизации  $E_c - 0.22$  эВ, причем его концентрация на порядок выше, чем в образцах, легированных цирконием.

Эксперименты с низкотемпературными обработками (НТО) показали, что изотермический отжиг в интервале температур  $100 \div 300^{\circ}\text{C}$  приводит к уменьшению концентрации глубоких уровней  $E_c - 0.42$  эВ и  $E_v + 0.30$  эВ, а уровень  $E_c - 0.22$  эВ стабилен к воздействию НТО.

Предварительные измерения спектров ИК-поглощения в образцах Si <Zr> показали уменьшение концентрации оптически активного кислорода.

### Литература

1. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. – М., Мир, 1977, 547с.
2. Бургуэн Ж. Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках. Теория. М., Мир, 1984, 264 с.
3. Зайнабидинов С.З., Далиев Х.С. Дефектообразование в кремнии. Ташкент: Университет, 1993. 192 с.
4. Свойства легированных полупроводниковых материалов: Сб.научн.тр. /Под ред. В.С.Земскова. М.: Наука, 1990. 256 с.

## ИК–спектры отражения эпитаксиальных гетероструктур InGaP/GaAs (100)

Журбина И.А., Середин П.В., Домашевская Э.П.

студент

Воронежский государственный университет, физический факультет, Воронеж, Россия  
E-mail: zhurb@mail.ru

Целью данной работы является изучение методом ИК-решеточной спектроскопии эпитаксиальных гетероструктур  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P} / \text{GaAs}$  для определения влияния диспрозия (Dy) и технологии роста гетероструктур на их оптические свойства. Исследовались образцы, выращенные в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе. Эпитаксиальные тонкие пленки  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$  были получены методом жидкофазной и МОС-гидридной эпитаксии на подложках GaAs (100). Толщины пленок у образцов  $1 \div 3$  мкм, составы близкие к половинному ( $x \sim 0.50$ ). ИК – решеточные спектры отражения получали при комнатной температуре в интервале от 50 до  $650 \text{ см}^{-1}$  с помощью ИК-спектрометра Vertex с разрешением в  $1 \text{ см}^{-1}$ .

На основании полученных экспериментальных данных, был проведен дисперсионный анализ ИК-спектров гетероструктур в модели “пленка-подложка”:

$$R(\omega) = \left| \frac{r_f(\omega) + r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)}{1 + r_f(\omega)r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)} \right|^2 \quad r_f = \frac{1 - \sqrt{\varepsilon_f(\omega)}}{1 + \sqrt{\varepsilon_f(\omega)}} \quad r_{fs} = \frac{\sqrt{\varepsilon_f(\omega)} - \sqrt{\varepsilon_s(\omega)}}{\sqrt{\varepsilon_f(\omega)} + \sqrt{\varepsilon_s(\omega)}}$$

$$\beta = \frac{2\pi d \sqrt{\varepsilon_f(\omega)}}{\lambda} \quad \lambda = \frac{10000}{\omega}$$

$$\varepsilon_f = \varepsilon_\infty + \sum_i \frac{4\pi f_i (\omega_{TOi})^2}{(\omega_{TOi})^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_i} - \sum_j \frac{(\omega_{pj})^2 \varepsilon_\infty}{\omega(\omega + i\tau_j)}$$

При построении моделированных спектров варьировались следующие величины: резонансная ТО частота  $i$ -той решеточной колебательной моды -  $\omega_{TOi}$ , сила осциллятора  $f_i$  и коэффициент затухания  $\gamma_i$ . Величины диэлектрической проницаемости подложки  $\varepsilon_s$ , были взяты из расчета экспериментального ИК–спектра решеточного отражения от монокристаллической пластины GaAs (100), проведенного в одноосцилляторном приближении по методу Спитцера, Клеймана, Фроша.

Были определены основные оптические характеристики полупроводниковых пленок в фоновой области ИК–спектра. Показано, что в одном из образцов возникает дополнительная мода колебаний In-P, связанная по нашим предположениям с распадом твердого раствора  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$  на компоненты. Различия экспериментального и расчетного ИК–спектров образца InGaP(Dy)/GaAs вероятнее всего связаны с перераспределением электронной плотности и проявлением магнитных свойств, которые не учитываются в расчетной модели.

### Литература

1. Ю.И. Уханов *Оптические свойства полупроводников* (М., Наука, 1997)
2. Э.П. Домашевская, П.В. Середин, А.Н. Лукин, Л.А. Битюцкая, М.В. Гречкина, И.Н. Арсентьев. ФТП, 40(4), (2006)
3. G. Lucovsky, M.H. Brodsky, M.F. Chen, R.J. Chitotka, A.T. Ward. , Phys. Rev. V4, N6 (1971)
4. T. Hofmann, G. Leibiger, V. Gottschalch, Ines Pietzonka, M. Scubert, Phys Rev 64(155206), (2001)
5. N.L. Rowell, G. Yu, D.J. Lockwood, P.J. Poole, Phys Rev 68 (165320), (2003)

## Исследование влияния на свойства сплавов Ni-Cr концентрации хрома и термообработки.

Задойный Алексей Владимирович, Малышко Оксана Сергеевна

*студент, студентка*

*Московский Инженерно-Физический Институт (Государственный Университет),  
Москва, Россия*

[zadoiniy@mail.ru](mailto:zadoiniy@mail.ru), [oksana\\_malyshko@mail.ru](mailto:oksana_malyshko@mail.ru)

Работа посвящена анализу кинетических процессов в сплаве Ni-Cr в зависимости от содержания в нем хрома (38%, 40% и 42%) и степени термообработки. Происхождение фазового перехода, наблюдаемого в сплаве Ni-Cr при изменении его состава (рост концентрации хрома) и различной термообработки происходит в соответствии с известными закономерностями, характеризующими фазовые переходы второго рода. Для исследования указанных сплавов использовался метод измерения углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ).

Аномально флуктуирующей величиной является в рассматриваемом случае параметр порядка, а в точке фазового перехода (ФП) корреляционный радиус  $R$  для имеющейся при более низких концентрациях хрома фазы дальнего упорядочения (ДУ) обращается в бесконечность.

При росте содержания хрома с 38% до 42% и изменении режимов термообработки (закалка 1050°C; отжиг 500°C в течение 10ч; отжиг 500°C в течение 90ч) в сплаве Ni-Cr осуществляется ФП второго рода, когда центрами зародышей новой фазы являются не атомы примеси, а чисто флуктуационные образования. Сам по себе ФП начинает отчетливо проявляться при содержании хрома 40%, и после достижения концентрации 42% переходит в линейную область.

Из анализа данных спектров УРАФ для сплава, содержащего 42% Cr, видно, что в ходе отжига концентрация фазы  $Ni_2Cr$  возрастает, в то время как соответствующая величина для «чистого хрома» в пределах ошибки эксперимента не изменяется. Для образца, содержащего 38% Cr (при отсутствии второй фазы дальнего упорядочения) величина концентрации  $Ni_2Cr$  также возрастает, но в заметно меньшей степени. Это означает, что присутствие в сплаве «чистого хрома» катализирует процесс отжига областей ближнего упорядочения (БУ), улучшая прочностные свойства сплава и устойчивость к радиационным воздействиям. В сплаве, содержащем 38% Cr, средняя величина размера кластера в пределах ошибки измерения не изменяется. Однако величина концентрации кластеров (параметр  $I_{p2}$ ) возрастает при малых временах отжига, а впоследствии падает.

В образце, содержащем 42% Cr, имеет место другой эффект. Средний размер кластеров растет (за счет того, что при отжиге первыми исчезают в стоках кластеры меньших размеров), но, так как общая концентрация дефектов такого типа не только не увеличивается, а даже качественно уменьшается, можно сделать вывод о том, что объединения дефектов в кластеры большего размера не происходит, а, значит, в радиационных полях при прочих равных условиях не будет происходить существенного порообразования (усиления радиационной ползучести, распухания и т.д.). Таким образом, можно отметить, что наличие в сплаве второго остова («чистый хром»), с одной стороны, приводит в ходе отжига к быстрому переходу атомов, находящихся в областях БУ в фазу  $Ni_2Cr$ , а, с другой стороны, не приводит к заметному росту концентрации крупных кластеров даже при малых временах отжига, что свидетельствует о более высоком уровне устойчивости такого состава сплава к внешнему радиационному воздействию.

### *Список литературы*

1. В.И.Графутин, Зин Мин У, В.П.Колотушкин и др. Исследование изменений электронной структуры и дефектов структуры сплавов на основе Ni-Cr методом измерения углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ), Физика и химия обработки материалов, 2007, №1, с.68-72.
2. В.И.Графутин, Зин Мин У, У.Н.Курельчук и др. Исследование структурных превращений в сплавах на основе Ni-Cr методом измерения углового распределения аннигиляционных фотонов, Сборник научных трудов, научная сессия МИФИ-2007, Т.5, с.116-117.
3. P.Kirkegaard, N.J.Pedersen, M.Eldrup, PATFIT-88: A data-processing system for positron annihilation spectra on mainframe and personal computers, February 1989 – revised August 1997 - reprinted November 2003, Riso National Laboratory, DK-4000 Roskilde, Denmark.

## Исследование влияния вакансий на процесс образования дефектной структуры в гидриде палладия из первых принципов.

*Исаева Лейла Эйвазовна<sup>1</sup>*  
*студентка*

*Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*  
*E-mail: leyla\_isaeva@yahoo.com*

Перспектива использования водорода в качестве альтернативного источника энергии предполагает создание материала, способного на многочисленные циклы поглощения и выделения водорода из своей матрицы. Поэтому хранение водорода в структурах переходных металлов и сплавов или металлических гидридов, рассматривается как один из перспективных путей создания новых материалов для водородной энергетики [1]. Однако, как показывают экспериментальные исследования, процесс насыщения многих металлов и сплавов приводит к индуцированию аномально большого числа вакансий в матрице, что отражается на технологических циклах внедрения и извлечения водорода [2]. В этой связи возникает необходимость получения полной информации о типах и атомной структуре дефектных комплексов в конкретных материалах и их влияние на процесс водородной сорбции. Поэтому в данной работе проводится теоретическое исследование процесса образования и устойчивости дефектной  $L1_2$  структуры  $Pd_3VacH_x$ , наблюдаемой экспериментально [3].

С этой целью нами был использован метод первопринципной молекулярной динамики, базирующийся на теории функционала плотности и методе псевдопотенциалов [5]. В рамках первопринципного подхода для расчетов энергий образования дефектной структуры  $Pd_3VacH_x$  в зависимости от концентрации водорода использовалось приближение локальной плотности для описания обмен-корреляционного взаимодействия [6]. Кристаллическая ячейка задавалась путем удаления атомов палладия из узлов решетки, а водород помещался в тетраэдрических порах ГЦК-решетки. Оптимизация параметров решетки проводилась с использованием сетки  $4 \times 4 \times 4$   $k$ -точек в зоне Бриллюэна, которые генерировались по схеме Монхорста-Пака [7]. Динамические свойства дефектной структуры  $Pd_3VacH_x$  были изучены с помощью методики, основанной на принципе линейного отклика [8].

В нашей работе представлены результаты теоретических расчетов энтальпий образования, энергии нулевых колебаний, а также фононных спектров дефектной фазы гидрида палладия.

Проведенные расчеты энтальпий образования таких систем показывают, что энергетически наиболее выгодным является расположение водорода в октаэдрических и тетраэдрических порах дефектной структуры. Проведено исследование термодинамической стабильности дефектной структуры в зависимости от температуры и давления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 07-02-01452).

### Литература:

1. Morinaga, H Yukawa, Materials Sci. And Engin. 268, A329-331, 2002



2. Y.Fukai, N.Okuma. Formation of superabundant vacancies in Pd hydride under high hydrogen pressures.// Phys.Rev.Lett., Vol.73, 1640-1643, 1994
3. D.S. dos Santos, S.Miraglia, D.Fruchart. A high pressure investigation of Pd and the Pd-H system.// J. Alloys Comp. 291, L1-L5, 1999
4. R.Caputo, A.Alavi. Where do the H atoms reside in PdH<sub>x</sub> systems?// Molecular Physics, Vol.101, 1781-1787, 2003
5. M.C.Payne, M.P.Teter, D.C.Allan, T.A.Arias, J.D.Joannopoulos. Iterative minimization techniques for *ab-initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients.  
//Rev.Mod.Phys., Vol.64, No.4, 1045-1097,1992
6. J. P. Perdew, A. Zunger. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems.// Rev. B, Vol.23, 5048, 1981
7. H.Monkhorst, J.Pack. Special points for Brillouin-zone integrations.// Phys.Rev.B, Vol.13, 5188, 1976
8. S. Baroni, S. de Gironcoli, and A. Dal Corso, P. Giannozzi, Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory.// Rev. Mod. Phys. Vol.73, 515 – 562, 2001

**Анализ элементного состава конструкционных материалов ядерной техники на основе сплава Ni-Cr методом рентгеновской флуоресценции.**

**Корец Антон Васильевич, Столярова Анастасия Валерьевна**

*студент, студентка*

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет),*

*Москва, Россия*

[akorets@post.ru](mailto:akorets@post.ru), [xa-a@mail.ru](mailto:xa-a@mail.ru)

В проведенных исследованиях изучалось влияние технологических параметров приготовления образцов на элементный состав сплавов состава Ni-Cr с помощью метода полного отражения рентгеновского излучения от изучаемой поверхности.

Наибольший угол, под которым все еще имеет место полное внешнее отражение падающего излучения, называется критическим углом полного отражения. Так как рентгеновские фотоны проникают в отражатель на глубину порядка одного микрона, вклад от рассеянного падающего излучения минимизирован. В результате двойного возбуждения образца и первичными фотонами и отраженными лучами, флуоресцентный сигнал фактически вдвое превышает по плотности потока энергии излучения тот, который получается при использовании классической методики.

Были получены экспериментальные данные анализа состава указанных материалов никель-хромовых сплавов, используемых для конструирования реакторов на быстрых нейтронах, транспортных реакторов.

Ниже приведены спектры элементного состава сплавов, полученных методом рентгеновской-флуоресценции.

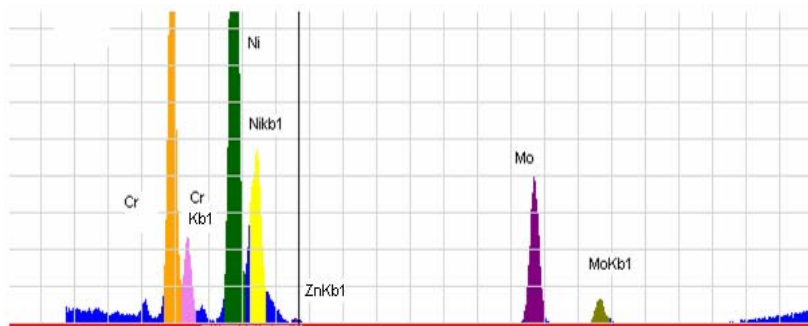


Рис 1 Спектр РФА 41Cr-1Mo

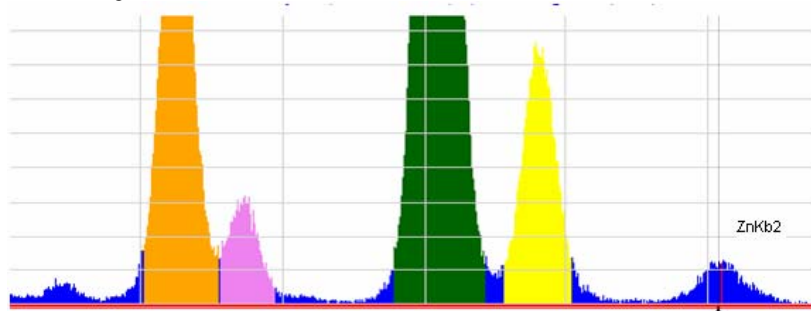


Рис 2 Спектр РФА Ni-38Cr-ZnKb1.

Сделаны выводы о наличии примесей и даны объяснения причин их появления в исследованных образцах, содержащих хром и прошедших различную термообработку, а также легированных молибденом.

Основными примесями в представленных образцах, как оказалось, являются атомы железа и цинка. Наличие этих примесей объясняется спецификой технологии производства образцов, и наиболее вероятно, они появились при прокатке образцов.

В работе проведена оценка эффективности регистрации флуоресцентного излучения экспериментальной установки и показано, что она составляет приблизительно 67%.

#### *Список литературы*

1. Дуглас Райлли, Норберт Энслин, Хэйстингс Смит, Сара Крайнер “Пассивный неразрушающий анализ ядерных материалов”, Москва 2000.
2. Vincze L., Janssens K., Adams F.// Adv. X-Ray Anal., 1994, 37
3. Афонин В.П., Комяк Н.И., Николаев В.П., Плотников Р.И. Рентгенофлуоресцентный анализ. – Новосибирск: Наука, Сиб. отд., 1991. – 173 с.

## Скользящие взаимодействия ион-поверхность твёрдого тела: возможности для диагностики и модификации.

***Кузнецов Артём Павлович<sup>2</sup>, Натальченко Максим Александрович<sup>1</sup>, Еликбаев Куаныш Нурланович<sup>1</sup>***

*Студенты*

*Казахстанско-Британский Технический Университет, Факультет Энергетики и Нефтегазовой Индустрии, Алматы, Казахстан*

*E-mail: [harmful87@mail.ru](mailto:harmful87@mail.ru)*

Исследование процессов рассеяния и распыления при скользящей бомбардировке ионами низких и средних энергий ( $E_0 \leq 100$  кэВ) чистых и адсорбированных поверхностей является весьма актуальными. Применение скользящих углов падения ионов на поверхность твердого тела ( $\psi < 20^\circ$ ) открывает новые перспективы в исследовании тонких слоев вещества, особенно в исследовании структуры и топографии реальных поверхностей, ионной полировке и при контроле ионными пучками, при диагностике нарушений элементного состава и структуры поверхностных слоев в атомном масштабе, предшествующих начальным стадиям адсорбции и коррозии металлов, используемых в различных областях промышленности, включая нефтегазовую индустрию. Быстрый прогресс в физике наноструктур позволит в ближайшем будущем получать монокристаллические плёнки толщиной в несколько десятков нанометров с чистыми поверхностями и хорошо упорядоченными адсорбционными структурами. Скользящая ионная бомбардировка позволяет исследовать элементный состав и структуру таких наноструктур, что важно для развития нанотехнологий.

В настоящей работе с помощью компьютерного моделирования исследованы механизмы и модели процессов низкоэнергетического малоуглового коррелированного рассеяния и каналирования ионов, а также ионного распыления и возможности их использования для диагностики и модификации поверхностей монокристаллов. Определены потери энергии и деканалирование ионов, движущихся под моноатомными ступеньками. При рассеянии ионов  $Ar^+$  ( $E_0=10$  кэВ) на поверхности  $Cu(100)$  определена пространственная протяженность ступенек на поверхности  $L=15 - 45 \text{ \AA}$ . Выявлены оптимальные условия для послойного распыления поверхности монокристаллов при скользящей ионной бомбардировке. При рассеянии ионов  $He^+$  и  $Ne^+$  на поверхности  $Ni(100)$  с адсорбированными атомами дейтерия и кислорода выявлена возможность контроля начальных стадий адсорбции и анализа адсорбционных структур. Показано, что процесс каналирования низкоэнергетических ионов в металлах и полупроводниках является основой метода локальной ионной имплантации в тонкие пленки.

### **Литература**

1. E.S. Parilis, L.M. Kishinevsky, N.Yu. Turaev, B.E. Baklitsky, F.F. Umarov, V.Kh. Verleger, S.L. Nizhnaya, I.S. Bitensky, Atomic Collisions on Solid Surfaces, North-Holland, Amsterdam, 1993.
2. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твёрдых тел. М., Энергоатомиздат, 1995.

---

<sup>2</sup> Авторы выражают признательность д.ф.-м.н., профессору, Умарову Ф.Ф. за научное руководство и помощь в подготовке тезисов.

## Эволюция спектральных характеристик при аморфизации молибдата гадолиния, легированного европием.

*Курмашева<sup>1</sup> Д.М., Киселев<sup>2</sup> А.П.*

*студент, аспирант*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
физико-химический факультет, Москва*

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

*E-mail: darya\_mk@inbox.ru*

Многие материалы, находящиеся в аморфном и нанокристаллическом состояниях, обладают уникальными физическими свойствами. Этим обусловлено их широкое применение в микроэлектронике, электронной технике, при создании сверхпрочных и легких материалов и т.д. В последние годы разработана новая методика аморфизации кристаллов путем воздействия на образец высокого давления (~9ГПа). О том, как изменяются электронные свойства материала при таком способе аморфизации, известно крайне мало. Для выяснения особенностей поведения электронной подсистемы при аморфизации кристаллов путем воздействия высокого давления в Институте физики твердого тела разработана методика спектральных исследований с использованием оптически активных и структурно - чувствительных “меток” – ионов редкоземельных элементов ( $Re^{3+}$ ). Установлено, что при переходе молибдата европия ( $Eu_2(MoO_4)_3$  – ЕМО) из кристаллического в аморфное состояние происходит смещение красной границы фундаментального поглощения на ~0.8эВ в область меньших энергий, а также наблюдаются радикальные изменения спектров люминесценции (СЛ) и спектров возбуждения люминесценции (СВЛ).

Представляется целесообразным использовать эту методику для изучения изменения электронных свойств других молибдатов при их аморфизации. Такие исследования проведены в настоящей работе на молибдате гадолиния, легированном 0.5% Eu. В отличие от молибдата европия, где каждая элементарная ячейка содержит 8 ионов  $Eu^{3+}$ , в  $Gd_{1.99}Eu_{0.01}(MoO_4)_3$  – (ГМО:Eu) один ион  $Eu^{3+}$  приходится на ~25 элементарных ячеек. В этом случае оптически активные ионы европия являются структурно – чувствительными “метками”, которые позволяют следить за изменением электронных свойств и локальной симметрии ГМО при барических воздействиях.

Спектр люминесценции (СЛ) кристаллов ГМО:Eu в исследованной нами спектральной области 605-630нм содержит семь полос, наиболее интенсивными из которых являются полосы с  $\lambda_{max} = 614.0$  и  $616.2$ нм, их полуширины равны ~0.7нм. После перевода ГМО:Eu в аморфное состояние в СЛ вместо семи линий наблюдается одна широкая полоса с максимумом при  $\lambda_{max} = 612.7$ нм и полушириной ~ 10.4нм. В спектре возбуждения люминесценции (СВЛ) исчезают все резонансные полосы с  $\lambda_{max} < 400$ нм, остается только одна полоса с  $\lambda_{max} = 466$ нм. Отсутствие в СВЛ аморфного ГМО:Eu самой интенсивной в СВЛ исходного образца полосы с  $\lambda_{max} = 395$ нм свидетельствует о том, что красная граница фундаментального поглощения аморфного молибдата гадолиния ( $E_A$ ) находится при  $\lambda > 400$ нм. Этот вывод подтверждается прямым определением  $E_A$  по спектру пропускания аморфного ГМО:Eu согласно которым  $E_A = 410$ нм (3.02эВ). Таким образом, при аморфизации ГМО происходит значительный сдвиг красной границы поглощения от 4.13эВ в исходном кристалле до 3.02эВ в аморфном молибдате гадолиния. Отжиг аморфного ГМО:Eu при  $T \sim 900^\circ C$  – температуре, при которой стабильна высокотемпературная модификация ГМО, - приводит к восстановлению всех спектральных характеристик ГМО:Eu.

## Рентгеноструктурные исследования наноразмерных Pt<sub>3</sub>Co/C электрокатализаторов для низкотемпературных топливных элементов

Леонтьев Игорь Николаевич\*, Михейкин Алексей Сергеевич\*\*

\*старший преподаватель, канд. физ.-мат. наук, \*\* студент

Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, E-mail: i.leontyev@rambler.ru

Композиционные материалы, содержащие наночастицы платины, осажденные на высокоразвитую поверхность углеродных носителей, являются наиболее перспективными катализаторами для низкотемпературных топливных элементов (ТЭ). Основными причинами, затрудняющими коммерческое использование платиноуглеродных катализаторов, являются их высокая стоимость, быстрая деградация в процессе работы. Кроме того, склонность к агломерации частиц катализаторов на основе чистой Pt, способствует уменьшению активной поверхности катализатора, приводящей к уменьшению каталитической активности. Одним из способов устранения вышеперечисленных трудностей является замена чистой Pt ее сплавами с переходными металлами, такими как Co, Ni и др.[1]. Все вышеперечисленное обуславливает актуальность и практическую значимость исследования наноразмерных Pt<sub>3</sub>Co/C электрокатализаторов. Цель настоящего исследования – изучение размерных эффектов в Pt<sub>3</sub>Co/C электрокатализаторах.

Pt-Co катализаторы на углеродной подложке изготавливали методом химического восстановления прекурсоров металлов из углеродной суспензии на основе их растворов. Для этого графитизированный порошкообразный углерод с высокоразвитой поверхностью (Timrex HSAG-300) импрегнировали платинохлороводородной кислотой H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub>\*6H<sub>2</sub>O и Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>\*6H<sub>2</sub>O. Углеродную суспензию готовили таким образом, чтобы молярное соотношение Pt:Co равнялось 3:1. Металлы восстанавливались при помощи водного раствора боргидрида натрия. Соотношение водной и неводной (этиленгликоль) компонент растворителя было соответственно 1:5 для образца, который мы обозначим E23, 1:1 для E25, и 5:1 для E27. Для оценки коррозионной материалов образцы E23, E25 и E27 обрабатывались одномолярным раствором H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> в течении 1 часа при температуре 100 °С. Полученные образцы получали соответственно обозначения E24, E26 и E28.

Рентгеноструктурные исследования проводились на Швейцарско-Норвежской линии Европейского центра синхротронного излучения (SNBL ESRF) с использованием монохроматизированного рентгеновского излучения с длиной волны  $\lambda=0.72287 \text{ \AA}$ . Детектор излучения – Image Plate Mar-345. Инструментальная функция уширения определялась при помощи крупнокристаллического порошка LaB<sub>6</sub>.

Анализ рентгенограммы углеродного носителя показал, что Timrex представляет из себя смесь двух углеродных фаз – орторомбической *Fmmm* ( $a=2.456 \text{ \AA}$ ,  $b=4.254 \text{ \AA}$ ,  $c=6.696 \text{ \AA}$ ) и ромбоэдрической *R3m* ( $a=3.6420\pm 0.0001 \text{ \AA}$ ,  $\alpha=39^{\circ}30'$ ). К сожалению, в литературе на этот факт не обращается внимания, что может приводить к ошибочному определению полной ширины на половине максимума дифракционного пика (FWHM) и последующему занижению размеров частиц.

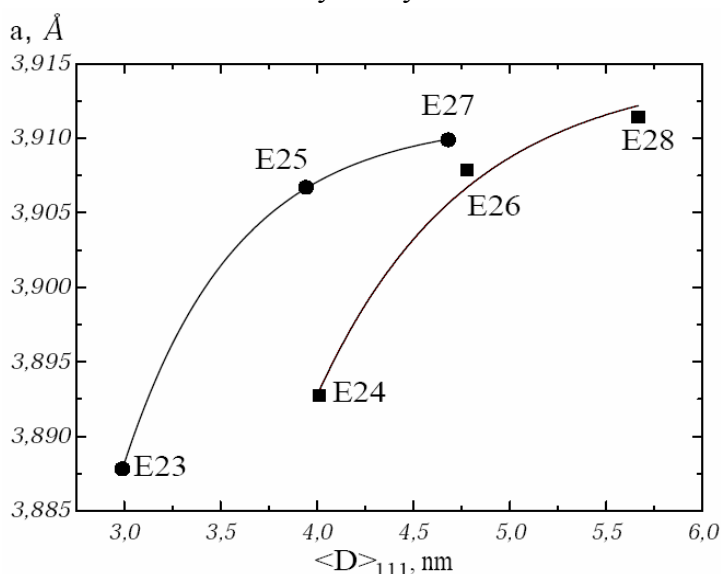
Для описания профиля рефлексов использовали модифицированный псевдо-Фойгт Томпсона –Кокса-Хастингса [2]:  $PV = \eta L + (1 - \eta)G$ , где  $\eta$  - относительный вклад функции Лоренца в общую интенсивность отражения.

Анализ значений FWHM, полученных для всех исследованных образцов, показал существенную анизотропию уширения дифракционных максимумов, т.е. рефлексы типа (111) имеют систематически меньшую FWHM, чем другие рефлексы, причем с ростом размера частиц анизотропия растет. Причинами наблюдаемого явления может быть: 1) наличие дефектов упаковки; 2) наличие дислокаций; 3) зависимость размера частиц от кристаллографического направления.

Средний размер частиц  $\langle D \rangle_{111}$  определяли по формуле Шеррера [3], распределение частиц по размерам - по методике предложенной в [4]. Для расчета использовали значение FWHM для рефлекса (111). Результаты для всех образцов представлены в таблице.

Размер частиц		Образец					
		E23	E24	E25	E26	E27	E28
по [3]	$\langle D \rangle_{111}, \text{nm}$	3,0	4,0	3,9	4,8	4,7	5,7
по [4]	$\langle D \rangle_{111}, \text{nm}$	3,2	4,3	4,3	5,1	4,9	6,0
	$\sigma, \text{nm}$	1,5	2,1	2,1	2,5	2,5	3,0

Как видно из таблицы средний размер частиц, рассчитанный по методике [4] несколько больше, чем рассчитанный по формуле Шеррера. Размер частиц растет как по мере увеличения неводного компонента растворителя, так и после обработки частиц кислотой. В обоих случаях увеличение составляет приблизительно 0,8-1 нм.



Аппроксимация функцией псевдо-Фойгта позволила также точно определить положение каждого дифракционного максимума  $\theta$ , после чего нами был выполнен расчет параметра кристаллической решетки  $a$  для всех рефлексов рентгенограммы каждого образца. Значения параметра  $a$ , найденного таким образом, имеет систематическую погрешность, связанную с неидеальностью установки образца, которая была нивелирована с помощью экстраполяционной функции Нельсона-Райли

$0.5(\cos^2 \theta / \sin \theta + \cos^2 \theta / \theta)$ . Анализ параметров элементарной

**Рис.1** ячейки для всех образцов, а также зависимости  $a(\langle D \rangle_{111})$ , представленной на рис.1, позволяет сделать следующие выводы. Параметры ячейки  $a$  полученных наночастиц меньше чем параметр  $a$  чистой платины. Зависимость  $a(\langle D \rangle_{111})$ , одинаково нелинейна, как для образцов прошедших обработку так и для необработанных образцов, иными словами наблюдается заметный размерный эффект, который объясняется, по-видимому, нескомпенсированностью межатомных связей атомов на поверхности в отличие от атомов, расположенных внутри частиц, и, как следствие этого, сокращением расстояний между атомными плоскостями вблизи поверхности частицы. Параметр ячейки  $a$  для обработанных кислотой частиц выше, чем для необработанных при одинаковом размере, что свидетельствует о меньшем содержании Со в обработанных образцах.

#### Литература

1. Stamenkovic V R. et al (2007) Trends in electrocatalysis on extended and nanoscale Pt-bimetallic alloy surfaces// *Nature*, V6, p. 241-247.
2. Thompson P., Cox D.E., Hastings J.B. (1987) Rietveld Refinement of Debye-Scherrer Synchrotron X-ray Data from  $\text{Al}_2\text{O}_3$ // *J. Appl. Cryst.* V.20, p.79-83.
3. Klug H. P., Alexander L. E. (1974) X-ray Diffraction Procedures from Polycrystalline and Amorphous Materials p. 275. New York: John Wiley.
4. R. Pielaszek, (2004) FW1/54/5M method for determination of the grain size distribution from powder diffraction line profile, *Journal of Alloys and Compounds*, V.382, p. 128–132.

# Расчет изменения размера пор в бетонах при замерзании воды<sup>1</sup>

*Леханов Юрий Борисович*

*студент*

*Якутский государственный университет им.М.К. Аммосова, Якутск, Россия*

*E-mail: [lekhanov@mail.ru](mailto:lekhanov@mail.ru)*

Исследования влияния знакопеременных температурных воздействий на горные породы, грунты, бетоны и другие пористые, влагосодержащие материалы вплоть до настоящего времени остается актуальной задачей. Вода, содержащаяся в порах, при фазовом превращении в лед, оказывает крайне разрушительное действие на твердую фазу пористых материалов. Их способность противостоять этим воздействиям является гарантией надежности и устойчивости горнотехнических и иных сооружений.

Общим подходом к исследованию механизмов влияния циклического замораживания – оттаивания на пористые материалы является предположение о росте дефектности (трещиноватости) и взаимодействии дефектов в результате криогенного роста кристаллов льда в порах и трещинах.

Целью моей работы является решение кинетического уравнения для функции распределения пор по размеру (при выводе произведен учет слияния пор и зависимость температуры замерзания от радиуса пор).

Кинетическое уравнение для плотности распределения пор по размерам в зависимости от числа циклов замораживания – оттаивания можно представить в виде

$$\frac{df}{dn} = B_1 + B_2 + B_3 + B_4$$

где  $B_1$  - представляет собой прирост радиуса поры за один цикл замораживания (цикловая скорость роста радиуса пор). Определяет конвективное движение функции распределения пор в пространстве размеров радиусов  $B_1 = \frac{df}{dr} * \frac{dr}{dn}$ ;

$B_2$  - представляет собой член типа источника, определяющий прирост функции распределения пор по размерам в зоне необратимого пластического деформирования объемом  $V_{np} = 4\pi r^2 \beta r$ ;

$B_3$  - представляет собой член типа источника и определяет вклад в функцию распределения за счет прироста пор радиуса  $r$  в зоне необратимого пластического деформирования объемом  $V_{np} = 4\pi r^2 \beta r$  в результате «реакции»  $r_1 + r_2$  – слияния пор;

$B_4$  - представляет сток количества пор с радиусом  $r$  за счет их слияния с другими, т.е. «реакция»  $r + r_1 = r_2$  в зоне необратимого пластического деформирования объемом  $V_{np} = 4\pi r^2 \beta r$ .

Кинетическое уравнение для функции распределения пор по размеру:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dn} = & \\ \frac{df}{dr} * \frac{dr}{dn} + \lambda f(r, n) \int_{r_{np}}^{\infty} f(r_1, n) 4\pi \beta r_1^3 dr_1 + & \\ \kappa \int_{r_{np}}^{\infty} 4\pi r_2^3 \beta \left( \frac{1}{2} \int_0^r \omega(r_1 + \sqrt{r^2 - r_1^2}) f(r_1, n) f(\sqrt{r^2 - r_1^2}, n) dr_1 - f(r, n) \int_0^{\infty} \omega(r + r_1) f(r_1, n) dr_1 \right) f(r_2, n) dr_2 & \end{aligned}$$

Вывод: Решение кинетического уравнения позволит моделировать динамику преобразования структуры порового пространства при циклическом замораживании –



оттаивании. Моделировать поведение ансамбля пор в зависимости от температуры замораживания, и начального распределения.

#### **Литература**

1. Курилко А.С., Попов В.И. (2004) Исследование прочности пород после воздействия циклов замораживания – оттаивания. ГИАБ.
2. Кишкин Б. П. (1975) О проблеме прочности и разрушения. Упругость и неупругость. Издательство Московского Университета.

<sup>1</sup> Автор выражает признательность д.т.н. Степанову А.В. за помощь в подготовке тезиса.

## Изучение взаимодействия адатомов углерода на поверхностях железа (001) и (111) методом первопринципной молекулярной динамики

Мутигуллин Илья Васылович<sup>1</sup>

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: mutigullin@gmail.com

Использование металлических катализаторов при выращивании углеродных наноструктур становится широко распространенным в последние годы [1, 2]. Однако процессы, приводящие к образованию графитовых слоев и, как следствие, углеродных наноструктур на атомарном уровне до сих пор не ясны. Поэтому особый интерес представляет теоретическое изучение характера взаимодействия отдельных атомов углерода на поверхностях металла.

В данной работе методом первопринципной динамики на основе теории функционала плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов исследовалось взаимодействие адатомов углерода и сорбция углеродных монослоев на поверхностях (001) и (111) ОЦК-железа.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что на поверхностях (001) и (111) железа адатомам углерода энергетически не выгодно располагаться в положении ближайших соседей, что находится в согласии с результатами, полученными для углерода на поверхности (001) железа в работах [3, 4]. На поверхности (001) железа углероду более выгодно образовывать разреженные монослои, а не полный монослой. В частности, наиболее предпочтительным представляется равномерное заполнение половины монослоя (расстояния между адатомами соответствуют вторым соседям). В случае адсорбции одного монослоя углерода на поверхности (001) железа наблюдается тенденция к перемешиванию атомов в верхних слоях.

### Литература:

1. M. Yudasaka, Y. Kasuya, F. Kokai, K. Takahashi, M. Takizawa, S. Bandow, S. Iijima (2002) Causes of different catalytic activities of metals in formation of single-wall carbon nanotubes // *Appl. Phys. A* **74**, 377-385.
2. Z.P. Huang, D.Z. Wang, J.G. Wen, M. Sennett, H. Gibson, Z.F. Ren (2002) Effect of nickel, iron and cobalt on growth of aligned carbon nanotubes // *Appl. Phys. A* **74**, 387-391.
3. G. Panaccione, J. Fujii, I. Vobornik, G. Trimarchi, N. Binggeli, A. Goldoni, R. Larciprete, G. Rossi (2006) Local and long-range order of carbon impurities on Fe(100): Analysis of self-organization at a nanometer scale // *Phys. Rev. B* **73**, 035431.
4. C. Uebing (1994) Equilibrium surface segregation of interstitials on bcc (001) surfaces: A lattice-gas approach // *Phys. Rev. B* **50**, 12138.

## Пространственное размещение структурных подрешеток в кристаллах со структурой $YBa_2Cu_3O_7$

*Николаева Елена Владимировна*

*аспирант*

*Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия*

*E-mail: Elena\_eruk@mail.ru*

Любое кристаллическое соединение, состоящее из двух и более химических элементов, можно построить путем вложения друг в друга трансляционно совместимых подрешеток Бравэ одинаковых или различных сингоний. Простейшими классическими примерами кристаллов, состоящих из подрешеток одинакового типа Бравэ, могут служить кристаллы со структурой каменной соли, алмаза, сфалерита, а из подрешеток различного типа Бравэ – кристаллы флюорита и антифлюорита.

Представление кристаллов в виде совокупности подрешеток различного типа Бравэ позволяет описать имеющуюся в них дополнительную, «скрытую» симметрию и предсказать вызванные ею особенности некоторых физических и физико-химических свойств кристаллов, что находит свое подтверждение при анализе зонных спектров данных кристаллов [1], химической связи в них [2] и других физических и физико-химических свойств. Так, донорная и акцепторная проводимости связаны с разными подрешетками; ионная проводимость, химические реакции и другие процессы часто обусловлены одной из подрешеток, когда другие играют роль остова или катализатора.

Ранее была решена задача определения возможных вариантов сочетания подрешеток Бравэ в кристаллах, учитывая их трансляционную совместимость [3]. Учет полной пространственной симметрии кристалла, выраженной в **пространственной группе (ПГ)**, позволяет дополнительно к этому определить все возможные варианты пространственного размещения подрешеток Бравэ того или иного типа в избранной ПГ. Наборы соответствующих векторов смещения подрешеток представляют собой обобщение системы эквивалентных кристаллографических позиций. В настоящее время на кафедре теоретической физики КемГУ начата работа по составлению соответствующего кристаллографического справочника для всех 230 ПГ. Уже получены результаты для ПГ триклинной и моноклинной сингоний, а также для кристаллов простого ромбического типа Бравэ.

В базе данных Crystal Lattice Structures [4] среди кристаллических соединений простого ромбического типа были найдены кристаллы с различающимся типом подрешеток Бравэ:  $FeS_2$ ,  $Fe_2C$ ,  $CaCl_2$ ,  $AlPS_4$ ,  $YBa_2Cu_3O_7$ ,  $CaTiO_3$ . Данная работа посвящена группе **высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП)** со структурой  $YBa_2Cu_3O_7$ :  $YBa_2Cu_3O_7$ ,  $GaSr_2(Y,Ca)Cu_2O_7$ . На основе оксидных ВТСП ведется разработка магнитометров, радиометров, болометров, микроволновых резонаторов и т.п. Важным направлением исследования высокотемпературной сверхпроводимости является изучение физико-химических свойств ВТСП, а также взаимосвязи химического состава с электрофизическими и магнитными свойствами. Особенностью оксидных ВТСП является чрезвычайно сильная взаимосвязь кислородной стехиометрии, структуры и электрофизических свойств. ВТСП со структурой  $YBa_2Cu_3O_7$  имеют простую ромбическую решетку, ПГ № 47 ( $D_{2h}^1$ ).

Базисные векторы из [4] имеют вид:

$$\mathbf{V}_1=(0; 0; 0) - \text{Cu-I (1a)}$$

$$\mathbf{V}_2=(0; 0; z_1) - \text{Cu-II (2q)}$$

$$\mathbf{V}_3=(0; 0; -z_1) - \text{Cu-II (2q)}$$

$$\mathbf{V}_4=(a/2; b/2; c/2) - \text{Y (1h)}$$

$$\mathbf{V}_5=(a/2; b/2; z_2) - \text{Ba (2t)}$$

$$\mathbf{V}_8=(0; b/2; 0) - \text{O-II (1e)}$$

$$\mathbf{V}_9=(a/2; 0; z_3) - \text{O-III (2s)}$$

$$\mathbf{V}_{10}=(a/2; 0; -z_3) - \text{O-IV (2s)}$$

$$\mathbf{V}_{11}=(0; b/2; z_4) - \text{O-V (2r)}$$

$$\mathbf{V}_{12}=(0; b/2; -z_4) - \text{O-V (2r)}$$

$$\mathbf{B}_6=(a/2; b/2; -z_2) - \text{Ba} (2t)$$

$$\mathbf{B}_7=(a/2; 0; 0) - \text{O-I} (1b)$$

$$\mathbf{B}_{13}=(0; 0; z_5) - \text{O-VI} (2q)$$

$$\mathbf{B}_{14}=(0; 0; -z_5) - \text{O-VI} (2q)$$

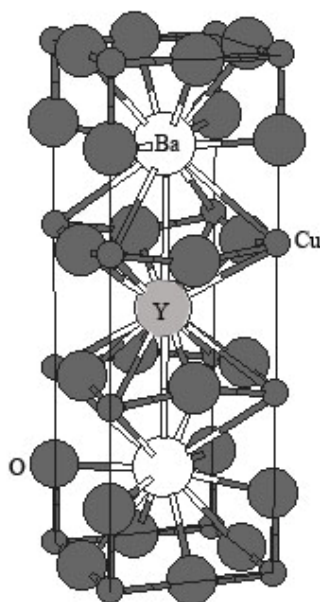


Рис.1. Элементарная ячейка ВСТП со структурой  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Подрешетки Ca с базисными векторами  $\mathbf{B}_7$  и  $\mathbf{B}_8$  совмещены в одну базоцентрированную ромбическую подрешетку, при этом пространственные периоды подрешетки и кристаллической решетки совпадают. При теоретическом расчете данного возможного сочетания кристаллической решетки и подрешетки на основе метода из [5] получены следующие векторы смещения:  $(n_1(a/2l), n_2(b/2m), n_3(c/2n))$ , где  $l, m, n$  – целые числа, связывающие пространственные периоды подрешеток с соответствующими периодами кристалла:  $a_s = a/l, b_s = b/m, c_s = c/n$  (в данном кристалле  $l=m=n=1$ ),  $n_i$  – целые числа, определяющие положения подрешеток. Реально полученные имеющиеся в кристалле базисные векторы  $\mathbf{B}_7$  и  $\mathbf{B}_8$  получаются из векторов смещения как частный случай при следующих значениях параметров: 1)  $n_2=n_3=0, n_1=1$  и 2)  $n_1=n_3=0, n_2=1$  соответственно.

Три подрешетки Cu, одна подрешетка Y, две подрешетки Ba и шесть подрешеток O совпадают по своему типу и пространственным периодам с кристаллической решеткой.

#### Литература

1. Басалаев Ю.М., Журавлев Ю.Н., Кособуцкий А.В., Поплавной А.С. Генезис энергетических зон из подрешеточных состояний в оксидах и сульфидах щелочно-земельных металлов // Физика твердого тела. – Т. 46, № 5. – С. 826-829 (2004).
2. Журавлев Ю.Н., Поплавной А.С. Распределение валентной электронной плотности в преимущественно ионных кристаллах с различающимися подрешетками Браве // Физика твердого тела. – Т. 45, № 1. – С. 37-41 (2003).
3. Поплавной А.С., Силинин А.В. Подрешетки в кристаллах // Кристаллография. – Т. 50, № 5. – С. 782-787 (2005).
4. База данных «Crystal Lattice Structures» в Интернет на сайте <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/>
5. Поплавной А.С., Силинин А.В. Подрешетки в кристаллах низкосимметричных сингоний // Известия вузов. Физика. – Т. 50, № 4. – С. 55-62 (2007).

# Исследование формирования нанокристаллов кремния при отжиге плёнок $\text{SiO}_x$ <sup>1</sup>

Панков К.Н.,<sup>a</sup> Терехов В.А.,<sup>a</sup> Турищев С.Ю.,<sup>a</sup> Кашкаров В.М.,<sup>a</sup>  
Домашевская Э.П.,<sup>a</sup> Тетельбаум Д.И.,<sup>b</sup> Михайлов А.Н.,<sup>b</sup> Белов А.И.<sup>b</sup>  
аспирант 3 г. обучения

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

<sup>b</sup> Нижегородский государственный университет, Н. Новгород, Россия

E-mail: pankov@phys.vsu.ru

Образование нанокластеров элементарного кремния в субоксидных плёнках, полученных методом термического испарения порошка  $\text{SiO}_x$  в вакууме, исследовалось методами рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES) и эмиссии (XES). Проведено исследование энергетического спектра электронов в зоне проводимости (XANES) и в валентной зоне (XES) после термических отжигов. Спектры XANES в

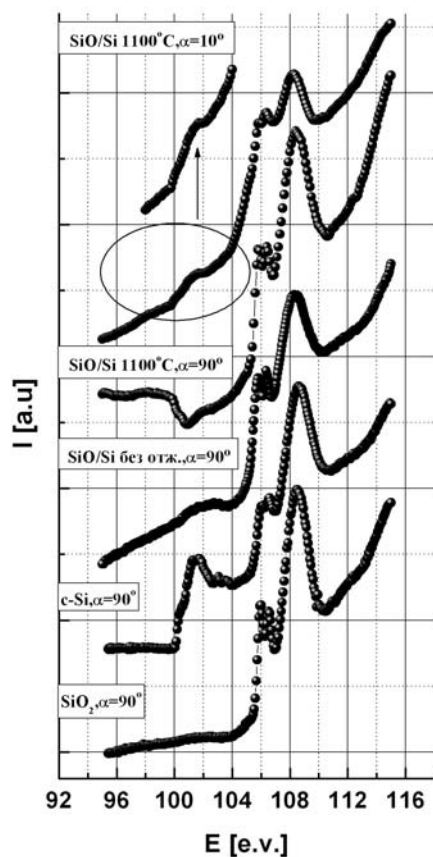


Рис. 1. Si  $L_{2,3}$  – XANES

области Si  $L_{2,3}$ -края были получены с помощью синхротронного излучения на синхротронах BESSY-II (Берлин, Германия) и SRC (Стоутон, США). Полученные данные о локальной плотности занятых и свободных электронных состояний позволили получить информацию о характере трансформации ближнего окружения у атомов кремния в плёнках  $\text{SiO}_x$  после отжигов в интервале температур 900-1100°C. После отжигов в спектрах XANES появляется структура, соответствующая элементарному кремнию, которая усиливается с ростом температуры отжига. Анализ этой структуры свидетельствует о том, что часть атомов элементарного кремния находится в нанокластерах в неупорядоченном состоянии.

Особенно следует подчеркнуть, что формирующаяся при отжиге наносистема  $\text{SiO}_x+\text{Si}$  способствует интерференции рентгеновского излучения с  $\lambda \div 12.4-11.8$  нм, при углах скольжения близких к нормальному. В результате спектр квантового выхода внешнего рентгеновского фотоэффекта в этой области длин волн приобретает аномальный ход и становится зеркально обращённым спектру поглощения (рис. 1). При этом обычный ход коэффициента поглощения наблюдается при очень малых углах скольжения ( $\alpha \sim 10^\circ$ ).

<sup>1</sup> Данная работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых ученых № МК-4932.2007.2

## Оценка деформации и повреждения пористой наноструктурной керамики при высокоскоростном нагружении

Пасько Евгений Геннадьевич<sup>3</sup>, Козулин Александр Анатольевич

*студент пятого курса, старший преподаватель*

*Томский государственный университет, Томск, E-mail: kozulyn@ftf.tsu.ru*

В настоящее время нет единого мнения, о влиянии структуры нанокристаллических керамических материалов на механические свойства при динамическом нагружении. На сегодняшний день механические свойства нанокристаллических керамических материалов при высокоскоростной деформации не достаточно исследованы. Экспериментальные исследования механического поведения нанокерамик при динамическом нагружении являются дорогостоящими и не всегда возможны. В этой связи является актуальным исследовать механическое поведение таких материалов при высокоскоростной деформации с использованием компьютерного моделирования.

Так как универсальной физико-механической модели, которая могла бы описать механическое поведение разных классов в условиях высокоскоростной деформации, не найдено. Целью данной работы является: разработать модель, адекватно описывающую поведение нанокристаллических керамических материалов при импульсных нагрузках; провести исследования влияния структуры материала на деформирование керамики под действием плоских ударных волн.

Структура керамических материалов нерегулярна, но в большинстве случаев можно выделить структурную ячейку, характеристики которой и будут достаточно строго определять механические свойства и деформацию материала в условиях высокоскоростной деформации. В рамках данной работы рассмотрены различные типы структуры пористости, которые формируются при различных режимах спекания кристаллических прессовок оксидной керамики и приводят к различным вариациям физико-механических свойств. Рассмотрены три характерные структуры пористости: с расположением пор в зоне тройных стыков зерен, на стыках и границах зерен, на границах и внутри рекристаллизованного зерна. Важно отметить, что процентное соотношение пор одинаково для всех типов структуры и составляет 5%.

Результаты исследования получены численно с использованием конечно-разностного метода по расчетной схеме фон Неймана-Рихтмайера. Разработаны модели механического поведения пористой наноструктурной керамики, позволяющие изучать процессы деформирования и повреждения при импульсных нагрузках. Для каждой из моделей вычислительный эксперимент проводился со значением начальной скорости:  $v_0=300$  м/с. Время прохождения плоского фронта волны  $\Delta t = x/C_0 = 6.9 \cdot 10^{-9}$  с где  $C_0$  – продольная скорость звука в материале. ( $\Delta t = x/C_0 = 6.9 \cdot 10^{-9}$  с).

Проведены исследования влияния структуры пористости на деформирование керамики под действием плоских ударных волн. В результате проведенных исследований обнаружено, что распределение массовой скорости во фронте ударной волны отклоняется от нормального и образует бимодальное распределение, что является следствием образования новых мод деформации в процессе импульсного нагружения деформируемой керамики, представляющей открытую термодинамическую систему.

Также выявлено, что предел упругости Гюгонио зависит не только от интегрального соотношения пористости, но и от соотношения размеров пор и размеров зерна. Исследовано влияние распределения пор на механизмы разрушения керамики. Полученные результаты показывают, что концентрация пор в области границ зерна вызывает снижение сдвиговой прочности. Наличие пор внутри рекристаллизованного зерна делает возможным процесс его неупругого деформирования.

---

<sup>3</sup> Автор выражает признательность профессору, д.ф.-м.н. Скрипняку В.А. за помощь в подготовке тезисов.

## Моделирование динамического нагружения оксидной структурированной керамики

Пилипенко Анатолий Игоревич<sup>4</sup>, Козулин Александр Анатольевич

магистрант, старший преподаватель

Томский государственный университет, Томск, Россия

E-mail: kozulyn@ftf.tsu.ru

В представленной работе выполнена постановка задачи о динамическом нагружении элемента структурированной поликристаллической оксид-алюминиевой керамики. На мезоскопическом уровне моделируется нагружение структурированного образца  $Al_2O_3$  керамики плоской ударной волной.

Процесс формирования высокоскоростного напряжённо-деформированного состояния поликристаллической керамики это цепь сложных физических явлений, проявляющихся на различных масштабных уровнях. Одной из составляющих этого процесса является неоднородное распределение напряжённостей в материале вследствие неоднородности его компонентов, в нашем случае имеются в виду границы и сами зёрна поликристаллической керамики. С использованием экспериментальных данных о структуре поликристаллической оксид-алюминиевой керамики создана модель, учитывающая отличие физико-механических свойств зернограницных и внутрикристаллических фаз. Показанная на рис. 1а структура поликристаллической керамики имитируется модельным образцом представленным на рис. 1б. Его структура образована зёрнами альфа фазы  $Al_2O_3$  разделенными слоями зернограницной фазы. Зёрна и их границы отмечены разными цветами.

На верхнюю границу образца воздействует плоская ударная волна. Амплитуда массовой скорости ударной волны составляет  $\sim 300$  м/с. Боковые грани моделируются как свободные, нижняя грань закреплена неподвижно.

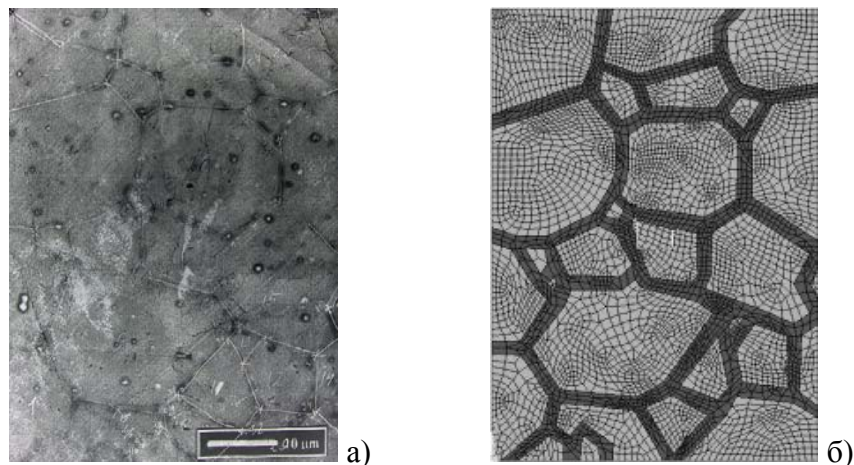


Рис. 1. Модельный образец: а) микроструктура образца  $Al_2O_3$ , б) конечно-элементная модель

Моделирование процессов деформации оксидной структурированной керамики при динамических нагружениях позволяет исследовать вероятные механизмы структурных превращений, которые влияют на физико-механические свойства материалов. С помощью предложенной модели распространения плоских волн нагружения в образце структурированной среды появляется возможность оценки напряжения течения, компонент массовой скорости, скорости фронта волны нагружения.

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

## Рост и исследование эпитаксиальных пленок гадолиний-галлиевого граната, легированного титаном

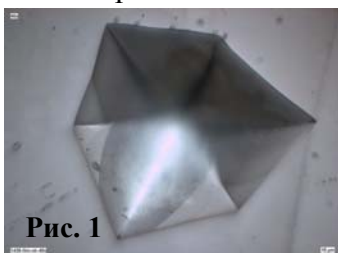
*Платонова Анастасия Владимировна*<sup>5</sup>  
студент

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,  
E-MAIL: [NASYPL@YANDEX.RU](mailto:NASYPL@YANDEX.RU)

Первый перестраиваемый по частоте источник когерентного оптического излучения был создан Джорджмейном и Миллером в 1965 г на кристалле ниобата лития  $\text{LiNbO}_3$ . Дальнейшим достижением в науке явился: лазер на александрите, перестраиваемый в диапазоне 710-820 нм, а также лазер на сапфире с ионами титана ( $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Ti}^{3+}$ ), полоса перестройки которого простирается от 660 до 1060 нм. Люминесценция иона  $\text{Ti}^{3+}$  в сапфире  $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Ti}^{3+}$  [1,2] и гранате  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ti}^{3+}$  [3,4] давно изучена, в то время как люминесценция иона  $\text{Ti}^{3+}$  в гранате  $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$  (ГГГ) не исследовалась.

Целью настоящей работы являлось выращивание эпитаксиальных монокристаллических пленок гадолиний-галлиевого граната с различной концентрацией иона  $\text{Ti}^{3+}$  из переохлажденных растворов-расплавов на основе системы  $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5$  на подложках ГГГ с ориентацией (111) и исследование химического состава выращенных пленок. Было выращено 54 образца монокристаллических пленок методом жидкофазной эпитаксии. Концентрация оксида титана  $\text{TiO}_2$  в шихте варьировалась от 0.1 до 8 мол. %.

Химический состав выращенных эпитаксиальных пленок исследовался на установке САМЕВАХ. Показано, что в выращенных пленках наблюдается увеличение концентрации иона  $\text{Ti}^{3+}$  в октаэдрической подрешетке (от 0,6 до 25,9 ат. %) с ростом концентрации оксида титана в шихте.



При изучении поверхности эпитаксиальных пленок, во всех образцах, толщина которых превышала 1 мкм, были обнаружены образования в виде шестигранных пирамид, с уходящей вглубь вершиной (рис. 1). Обнаружено, что в пленках, не обработанных в горячей  $\text{HNO}_3$ , которая используется для удаления раствора-расплава с поверхности образцов, пирамиды заполнены веществом, состоящим из оксида висмута с примесями Gd и Ga. В обработанных кислотой пленках пирамиды полые.



При выращивании эпитаксиальных гранатовых пленок при определенных переохлаждениях в объеме тигля и на платиновой оснастке спонтанно растут кристаллы двух фаз, одна из которых гранатовая с формой кристаллов в виде ромбододекаэдров с гранями  $\{110\}$ , другая пластинчатая (рис. 2). Рост второй фазы наблюдается при концентрации  $\text{TiO}_2$  в шихте с 5 мол. %.

### Литература

1. Moulton P. F. Ti-doped Sapphire Tunable Solid-State laser // Optical News. – 1982. – Vol. 8, № 6. – P. 9.
2. Багдасаров Х. С., Красиков Ю. И., Кузнецов Н. Т. и др. Лазерные свойства кристаллов  $\alpha - \text{Al}_2\text{O}_3 : \text{Ti}^{3+}$  // ДАН СССР. – 1985. – Т. 284, № 4. – С. 848-850.

<sup>5</sup> Автор выражает благодарность профессору, д.ф.-м.н. Сысоеву Н.Н., в. н. с., д.ф.-м.н. Рандошкину В.В., с.н.с., к.ф.-м.н. Васильевой Н.В., с.н.с., к.ф.-м.н. Бушуевой Г.В. за помощь в подготовке работы.



3. Bantien F., Albers P., Huber G. Optical transitions in titanium-doped YAG // J. Lumines. – 1987. – Vol. 36, – P.363.
4. Кулагин Н.А., Дойчилович Я. Структурные и радиационные центры окраски и диэлектрические свойства примесных кристаллов алюмоиттриевого граната // ФТТ. – 2007. – Т. 49, Вып. 2. – С.234.

## Исследование методом ЭПР диоксида титана, легированного азотом

Рогова Н.С.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра Общей физики и молекулярной электроники.

Диоксид титана ( $\text{TiO}_2$ ) широко используется в качестве фотокатализатора для разложения органических загрязнений в воде и атмосфере вследствие его высокой активности в фотокаталитических реакциях. Однако использование солнечного света в фотокаталитических процессах с участием  $\text{TiO}_2$  ограничено из-за большой запрещенной зоны (примерно 3,2 эВ), что требует использования УФ излучения для создания электрон-дырочной пары. Для создания чувствительных к видимому свету фотокатализаторов на основе  $\text{TiO}_2$  были проведены различные виды легирования оксидной матрицы ионами переходных металлов, неметаллическими элементами, такими как углерод, азот, сера и т.д. [1, 2]. Такая модификация структуры образцов  $\text{TiO}_2$

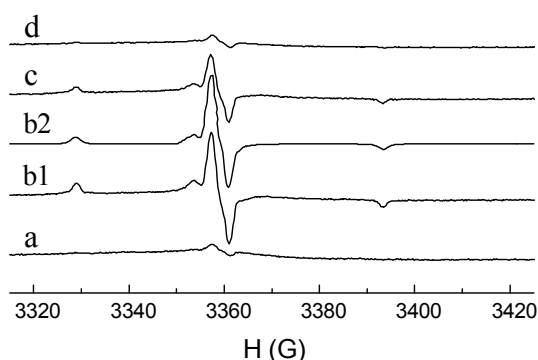


Рис. 1 Спектры ЭПР образцов  $\text{TiO}_2$ , легированных азотом, полученные при температуре 300 К: *a* – в темноте, *b1* – под действием света видимого диапазона, *b2* – компьютерная симуляция экспериментального спектра *b1*, *c* – через 15 мин., *d* – через 1 час после выключения освещения.

центров в легированном азотом  $\text{TiO}_2$  ( $\text{N-TiO}_2$ ) в темновых условиях и при освещении светом с различными длинами волн.

В ходе эксперимента было показано, что сигнал ЭПР от образцов  $\text{TiO}_2$ , легированных азотом, носит комплексный характер. Сигнал ЭПР содержит вклады от парамагнитных центров типа  $\text{N}^\bullet$  - и  $\text{NO}^\bullet$  - радикалов. Концентрация  $\text{N}^\bullet$  - и  $\text{NO}^\bullet$  - радикалов вырастает от  $N_s \approx 1.8 \cdot 10^{15}$  спин/г (в темноте) до  $N_s = 8.6 \cdot 10^{15}$  спин/г при освещении галогеновой лампой в диапазоне  $400 < \lambda < 1000$  нм при температуре 77 К (рис. 1). Эффект освещения был обратим в течение 1 часа. Это позволяет говорить о процессах перезарядки указанных радикалов. Таким образом, в исследуемых образцах  $\text{N-TiO}_2$  обнаружены радикалы  $\text{N}^\bullet$  и  $\text{NO}^\bullet$ . Высокую фотокаталитическую активность данных образцов в видимой области спектра можно объяснить примесным поглощением света за счет создания в запрещенной зоне локальных уровней в процессе введения примесей.

Список литературы.

- [1] S. Sakthivel, H. Kisch // *Angew. Chem.* 2003. **115**. p. 5057.
- [2] S. Sakthivel, H. Kisch // *Chem. Phys. Chem.* 2003. **4**. p. 487.
- [3] D.W. Bahnemann, S.N. Kholuiskaya, R. Dillert, A.I. Kulak, A.I. Kokorin // *Appl. Catalysis B.* 2002. **36**. p. 161.

## **Влияние технологических режимов на согласование параметров в эпитаксиальных гетероструктурах $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs$ .**

*В.Е. Руднева, Вал.Е. Руднева, П.В. Середин  
Воронежский государственный университет.*

В работе проведены дифрактометрические исследования влияния температуры подложки и скорости потока фосфина при эпитаксиальном выращивании твердых растворов (ТР) вблизи половинного состава  $x \sim 0.5$  в гетероструктурах  $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs$  (100) на элементный состав ТР и величину параметров.

Образцы получены методом МОС – гидридной эпитаксии (разложением металл-органических соединений и гидридов) на монокристаллической подложке GaAs (100) в ФТИ им. Иоффе. Интервал температур подложки GaAs (100) при эпитаксиальном наращивании слоев  $Ga_xIn_{1-x}P$  составлял  $600 \div 750^\circ C$ , скорость потока фосфина варьировалась от 20 до 450 мл/сек.

На дифрактометре ДРОН-4-07 регистрировали зависимость интенсивности от углового положения дифракционных линий (600) излучения  $Cu K_{\alpha 1,2}$  в исследуемых гетероструктурах. Были исследованы 6 образцов гетероструктур  $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs$  (100), полученных при различных технологических условиях наращивания эпитаксиальных слоев.

В результате разложения дифракционных линий (600) на компоненты, определены параметры решеток эпитаксиальных ТР в зависимости от технологических условий их получения (температура роста слоя и количества фосфина  $PH_3$  в потоке газа). Установлен интервал изменений значений  $x = 0.49 \div 0.56$

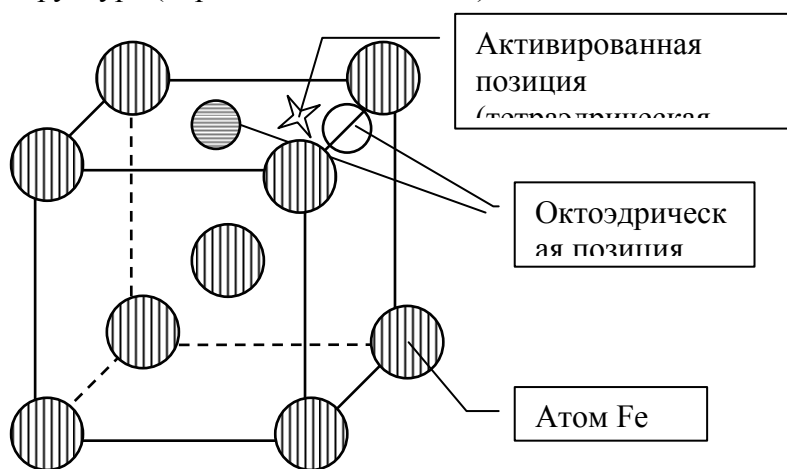
В некоторых образцах с наиболее рассогласованными параметрами пленки и подложки обнаружен спинодальный распад твердых растворов на два и даже на три состава с различными значениями  $x$ . В результате проведенных исследований гетероструктур  $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs$  (100) с различными величинами  $x$  были найдены оптимальные условия получения ТР с наиболее согласованными параметрами решеток пленки и подложки. Такими параметрами обладает образец ЕМ 794 со значением  $x = 0.51$ :  $Ga_{0.51}In_{0.49}P/GaAs$  (100), полученный при температуре подложки  $T = 700^\circ C$  и скорости потока фосфина в реакторе  $PH_3 = 20$  мл/сек.

**Моделирование перераспределения внедренных атомов примеси в упругих полях трещины в кубических кристаллах**  
**М.Ю. Рябов, А.В. Назаров**

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет)*

В работе предложена модель для расчета коэффициентов  $K$ , определяющих зависимость компонент матрицы коэффициентов диффузии от компонент тензора деформации, то есть влияние упругих полей на диффузионные потоки. С помощью нелинейного уравнения диффузии, с использованием полученных коэффициентов  $K$ , проведено моделирование перераспределения внедренных атомов примеси в устье трещины для систем железо - углерод, железо - водород, никель - углерод, никель - водород.

В работе используется новый теоретический подход, позволяющий учитывать влияние упругих полей на диффузионные потоки внедренных атомов примеси. Ниже представлены уравнения, полученные в рамках подхода для системы Fe-C, ОЦК структура (переход типа О - Т - О).



Диффузии внедренных атомов углерода в железе (см. рис. 1), происходит за счет перескока атома углерода из одной октоэдрической позиции в другую.

Плотность потока внедренных атомов в направлении  $X$  для произвольного поля смещения [1]:

Рис. 1. Октоэдрические позиции углерода в железе

$$J_1 = -\frac{1}{\Omega} \left[ \frac{\partial(D_{11}c)}{\partial x} + \frac{\partial(D_{12}c)}{\partial y} + \frac{\partial(D_{13}c)}{\partial z} \right]$$

где  $\Omega$  - атомный объем.

В системе железо углерод только диагональные компоненты матрицы диффузии отличны от нуля, так коэффициент  $D_{11}$  имеет вид [1]:

$$D_{11} \equiv D/2 \exp\left(-\frac{K_1 \varepsilon_{11}}{kT}\right) \left[ \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{22} + K_3 \varepsilon_{33}}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{33} + K_3 \varepsilon_{22}}{kT}\right) \right]$$

$$D \equiv \frac{a^2}{4} \varphi \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии внедренных атомов для совершенного кристалла,  $Q$  - активационный барьер перескока атома в совершенном кристалле и  $\varphi$  - частотный фактор.

Для системы железо углерод только три коэффициента  $K_1, K_2, K_3$  определяют влияние деформации на диффузию [1]:

$$K_j = a \left( \sum_p A_j^p \frac{\partial E_s}{\partial R_{ks}} \Big|_{R_{ks} = R_p^W} - \sum_q B_j^q \frac{\partial E_s}{\partial R_{ks}} \Big|_{R_{ks} = R_q^0} \right), \quad j = 1, 2, 3 \quad (1)$$

где  $E_s$  – энергия перескакивающего атома,  $A_j^p$ ,  $B_j^q$  зависят от взаимного расположения соседних атомов и от количества атомов в координационной сфере.

Главной особенностью данного подхода является учет влияния деформации на структуру активированного состояния, что приводит к существенному различию уравнений для потоков внедренных атомов в разных кристаллографических структурах и разных типов скачков.

Для решения задачи в рамках данной теории нужно двухуровневое моделирование:

- моделирование на атомарном уровне - определение коэффициентов К (Strain influence on diffusion (SID) coefficients) для внедренных атомов примеси типа углерода и водорода в ОЦК и ГЦК металлах;
- моделирование на мезоуровне - перераспределения внедренных атомов в упругом поле трещины на основе решения нелинейного уравнения диффузии.

Так как коэффициенты К очень чувствительны к атомарной структуре, то в рамках первого этапа самосогласованным образом была рассчитана атомарная структура в окрестности внедренного атома примеси с использованием модели [2]. После оптимизации атомарной структуры по формуле (1) были рассчитаны коэффициенты К.

Используя полученные коэффициенты К и решения классической теории упругости, описывающие упругое поле трещины, на втором этапе было проведено моделирование перераспределения внедренного атома примеси в упругом поле на основе решения нелинейного уравнения диффузии сеточным методом.

Ниже представлена иллюстрация перераспределения внедренного Н и С в устье трещины Fe для комнатной температуры.

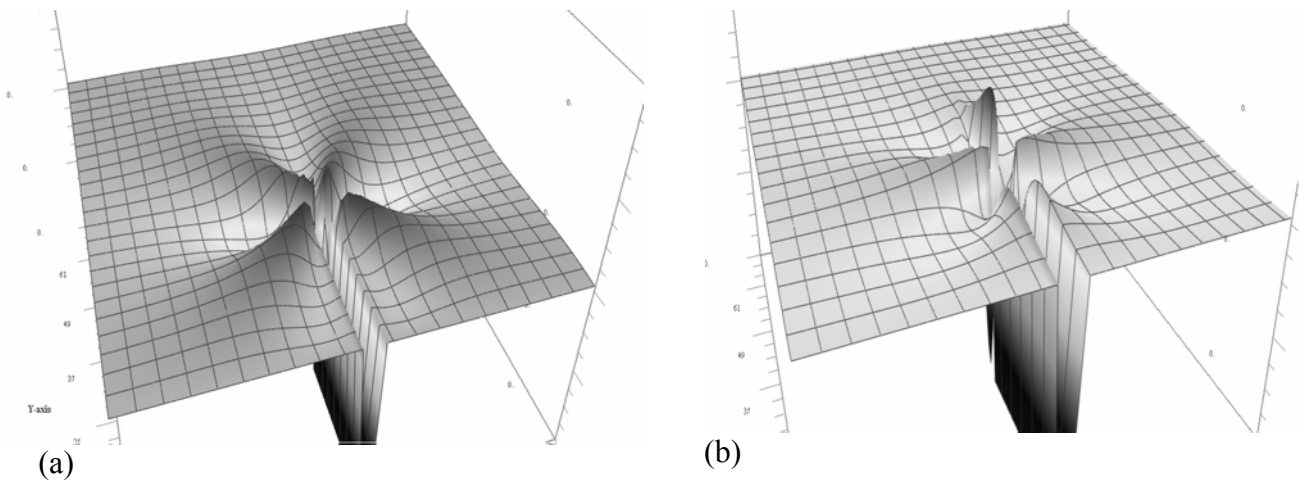


Рис. 2. Перераспределение (а) Н и (b) С в устье трещины в Fe

Модель [2] была применена для сплавов, образующих твердые растворы внедрения. Результаты моделирования, представленные на рисунке 2, показывают, что поведение внедренных атомов примеси в упругом поле трещины в различных системах имеет сложный и качественно разный характер. Данная модель позволяет описывать кинетику перераспределения внедренных атомов примеси.

1. Nazarov A.V., Mikheev A.A. Effect of elastic stress field on diffusion // Defect and Diffusion Forum. 1997. V. 143 - 147. P. 177 - 184.

2. И.В. Валикова, А.В. Назаров, Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на концентрацию и диффузионную подвижность вакансий в ОЦК металлах. Будет опубликована: ФММ, том 106, № 1, 2008

## Исследование упругих свойств нанокристаллической меди, полученной методом равноканального углового (РКУ) прессования.

Салимов Илья Эркинович<sup>1</sup>, Колыванов Евгений Леонидович<sup>2</sup>

*студент, научный сотрудник*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,*

*физико-химический факультет, Москва*

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

E-mail: [ilyushok@mail.ru](mailto:ilyushok@mail.ru)

Известно, что в нано- и субмикроструктурных металлах, получаемых способами сильного пластического деформирования, наблюдается аномальное понижение модуля упругости и модуля сдвига, по сравнению с крупнокристаллическими образцами, достигающее 10-15%. Механизмы этого эффекта пока не установлены. Целью данной работы было исследование упругих свойств нанокристаллического (размер зерна ~200 nm) сплава Cu-0.18wt.%Zr, полученного методом РКУ-прессования. Особенностью данного сплава является то, что при термических обработках вплоть до 500С в нем, в отличие от чистой меди, не меняется размер зерна. Образцы были приготовлены с помощью 8 проходов РКУ-прессования по маршруту В<sub>с</sub>.

Упругие характеристики материала оценивались акустическим методом по измерению скорости распространения ультразвуковых волн на частоте 5 МГц. Применявшаяся для измерений установка предполагала использование коротких (~1μs) ультразвуковых импульсов, что требовало специальных низкодобротных пьезодатчиков. Такие преобразователи были специально изготовлены в рамках данной работы, что позволило выполнить измерения скоростей звука с точностью не хуже 0.2-0.5%.

Были определены продольные и поперечные скорости распространения звука в 3 различных (взаимноперпендикулярных) направлениях относительно ориентации образца при РКУ-прессовании в исходном (после РКУ-обработки) состоянии и после отжига в течение 30 min при 300С. Наблюдалась заметная анизотропия упругих характеристик, присутствующая как в исходном, так и отожженном состояниях. Обнаружено, что в результате отжига происходит увеличение скорости звука во всех направлениях, достигающее 4%. Т.к. размер зерна в результате термической обработки не изменился, наблюдаемый эффект не связан непосредственно с размером зерна. Обсуждаются возможные механизмы этого явления.

6

---

<sup>6</sup> Физико-химический факультет МГУ, Москва

<sup>2</sup> Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

# Моделирование атомарной структуры и характеристик комплексов водород-вакансия в ГЦК-никеле и ОЦК-железе

*Селезнева Людмила Владимировна<sup>7</sup>*  
аспирантка

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет), Кафедра физических проблем материаловедения, Москва, Россия*

*E-mail: Selezneva\_LV@bk.ru*

## Введение

Наличие водорода в металлах и сплавах является одной из основных причин ухудшения их эксплуатационных характеристик, связанных с возникновением пор и других макродефектов их структуры.

Взаимодействие атомов растворенного водорода с дефектами кристаллической решетки определяет особенности поведения водорода в металлах и сплавах, которые по своей сути являются неравновесными структурами.

Так как небольшие возмущения электронного спектра в кристалле приводят к изменениям его макроскопических свойств, то существуют несколько проблем, требующих пристального внимания:

- механизмы возникновения и аннигиляции различных искажений в строении твердых тел;
- изучение влияния различных искажений кристаллической решетки на физические свойства кристаллов.

Более полную и надежную информацию об энергиях образования, форме и путях эволюции комплексов точечных дефектов можно получить с помощью методов компьютерного моделирования. Эти методы позволяют получить не только статистические характеристики комплексов (форма, размер, энергия образования), но и кинетические.

## Методы

В нашей работе мы использовали широко известный метод молекулярной статики (ММС), который позволяет наблюдать взаимное смещение атомов металла при диффузионных скачках точечных дефектов (вакансия, внедренный атом примеси). Взаимодействия между атомами рассматриваемых систем Ni-H и Fe-H описываются эмпирическими парными потенциалами, а также многочастичными потенциалами типа МПА (т.е. метод погруженного атома).

Атомы центральной части кристаллита имеют три степени свободы и взаимодействуют друг с другом и с атомами, находящимися во внешнем слое. Атомы внешнего слоя закреплены неподвижно. Диффузионный скачок атома представляет собой переход атома из одной равновесной позиции в другую равновесную позицию в решетке. В процессе этого перехода атому необходимо преодолеть, так называемый потенциальный барьер, создаваемый силами межатомного взаимодействия соседних атомов. С помощью ММС рассчитывалась высота данного потенциального барьера.

На каждом шаге после релаксации решетки рассчитывают и запоминают координаты и энергию перетаскиваемого атома, а также энергию системы. Таким образом, получают график зависимости  $E$  от  $r$ , из которого вычисляют высоту потенциального барьера  $E^{\text{МИГ}}$ , как разность между энергией в основном состоянии и энергией в седловой точке (вершина барьера).

---

<sup>7</sup> Автор выражает признательность доценту, к.ф.-м.н. Назарову А.В. за помощь в подготовке тезисов.



Принципиальным преимуществом разработанной физико-математической модели [1] является учет взаимного влияния точечных дефектов друг на друга. Кроме того, данный метод позволяет определить атомную структуру вокруг дефекта и смещение атомов при диффузионном скачке дефекта как функцию расстояния до дефекта.

### Результаты

Основными результатами расчета разработанного программного комплекса являются:

- определение спектров потенциальных барьеров для различных переходов атома примеси в зависимости от различного расположения комплекса вакансии – атом водорода,
- определение спектров потенциальных барьеров для различных переходов вакансии в зависимости от различного расположения комплекса вакансии – атом водорода,
- определение структуры решетки вокруг дефектов,
- определение траекторий перемещения атомов по кристаллической решетке при переходе из одного равновесного положения в другое,

Некоторые из полученных результатов показаны на рисунке 1 и в таблице 1.

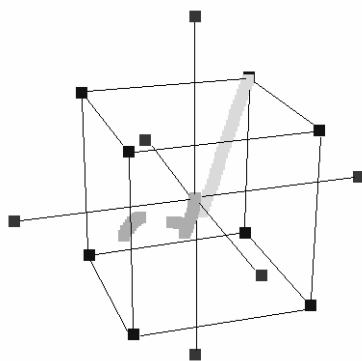


Рисунок 1. Траектория движения перемещаемого атома железа в вакансию (светло-серая линия) и траектория смещения атома водорода из вакансии (темно-серая линия) в ОЦК-железе

Таблица 1.

Энергии, эВ	Эта работа	Другие
$E_v^m$ в $\alpha$ -Fe	0.67	0.68
$E_v^m$ в Ni	0.8	1.5
$E_H^m$ в $\alpha$ -Fe	0.07	-
$E_H^m$ в Ni	0.39	0.41
$E_{H-v}$ в $\alpha$ -Fe	0.59	0.63
$E_{H-v}$ в Ni	0.83	0.44

Полученные результаты свидетельствуют о взаимном влиянии вакансии и атома водорода на их диффузионную подвижность в решетке. Так вакансия является ловушкой для атома водорода, но при диффузионном скачке ближайшего атома железа в вакансию атом водорода выталкивается из вакансии в равновесную позицию своей подрешетки. При этом смещение атома водорода происходит не за счет диффузионного скачка самого атома водорода. Активационная энергия этого перехода для атома водорода 0,62 эВ по сравнению с этим значением в решетке без дефекта 0,07 эВ. Такой же эффект наблюдается в никеле.

### Литература

1. Selezneva, L.V. Nazarov, A.V. (2005) Simulation of interstitial atom diffusion in FCC metals with point defects // Defect and Diffusion Forum, Vols.237-240, p. 1275-1280

## Исследование структурных изменений в кристаллах $K_3H(SO_4)_2$ с температурой

Симонов Аркадий Аркадьевич

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: [aglietto@gmail.com](mailto:aglietto@gmail.com)

В настоящее время известно целое семейство кристаллов с общей структурной формулой  $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$  ( $M = K, Cs, Rb, NH_4$ ;  $X = S, Se, As$ ), представители которого обладают низкотемпературными сегнето- или антисегнетоэлектрическими фазовыми переходами, которые обусловлены упорядочением протонов в двухминимумном потенциале на водородных связях, и высокотемпературными сегнетоэластическими фазовыми переходами, обусловленными изменениями системы водородных связей.

Несмотря на интересную физику и распространенность кристаллов данного семейства, изучение взаимосвязи их свойств и структуры, начавшись несколько десятилетий назад, активно продолжается и в настоящее время, пополняясь новой информацией. Например, пространственная группа и параметры элементарной ячейки кристаллов  $K_3H(SO_4)_2$  были определены в 1960 году [1], структура низкотемпературной фазы была расшифрована в 1990-м году [2], а структура высокотемпературной фазы до настоящего времени была неизвестна.

Целью нашего исследования было определение структурных изменений, происходящих в кристаллах  $K_3H(SO_4)_2$  с повышением температуры. С использованием метода рентгеноструктурного анализа был проведено исследование монокристаллов  $K_3H(SO_4)_2$  в интервале температур 293 – 473 К на дифрактометрах Xcalibur с двумерным CCD-детектором и BRUKER с точечным детектором. По экспериментальным данным была уточнена структура низкотемпературной фазы: пр. гр.  $C2/c$ ,  $z=4$ ,  $a=14.698(1)\text{Å}$ ,  $b=5.683(1)\text{Å}$ ,  $c=9.783(1)\text{Å}$ ,  $\beta=103.01(1)^\circ$  ( $R_{\text{сред}}=1.16\%$ ,  $R_w/R=1.73/1.87\%$ , BRUKER;  $R_{\text{сред}}=2.87\%$ ,  $R_w/R=1.44/1.67\%$ , Xcalibur) и определена структура высокотемпературной фазы: пр. гр.  $R-3m$ ,  $z=3$ ,  $a=5.73(1)\text{Å}$ ,  $c=21.51(1)\text{Å}$ , ( $R_{\text{сред}}=2.29\%$ ,  $R_w/R=4.32/4.52\%$ , Xcalibur)(рис. 1). На рис. 2 и 3 показана часть обратного пространства кристалла  $K_3H(SO_4)_2$ : набор дифракционных отражений при 443 К и 453 К, соответственно ниже и выше фазового перехода из моноклинной в тригональную фазу, в проекции вдоль оси  $c^*$  высокотемпературной фазы.

Полученные экспериментальные данные позволили выявить структурные изменения при фазовом переходе и проанализировать структурный механизм появления в кристаллах  $K_3H(SO_4)_2$  протонной проводимости.



Рис. 1

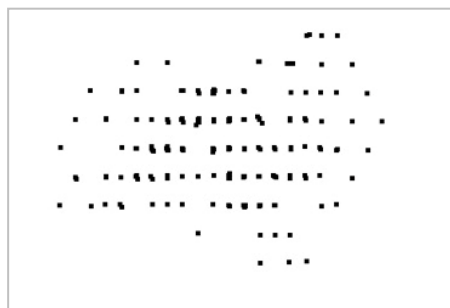


Рис. 2

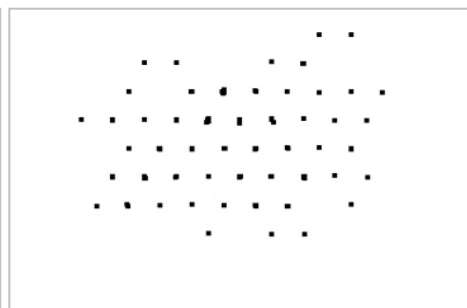


Рис. 3

### Литература

1. Parry G.S., Glasser L. (1960) // Z.Kristallogr., v.113, p.57.
2. Noda Y., Uchiyama S., Kaffuku K., Kasatani H., Terauchi H. (1990). //J. of the Phys. Soc. of Japan, v.59, №8, p.2804-2810.

# Теоретическое исследование взаимосвязи между магнитными свойствами и атомной структурой в Pd наноконтактах.

Смелова Ксения Михайловна<sup>1</sup>

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: smelova\_k\_m@mail.ru

## Введение

Развитие современных технологий и методов позволяет создавать различные наноструктуры и изучать их свойства. В последние годы большое количество статей посвящено теоретическому [1,2,3,4] и экспериментальному [5,6,7,8] исследованию структур низкой размерности, у которых обнаружены уникальные физические свойства (квантовая проводимость, наномagnetизм). Исследование свойств магнитных наноструктур открывает большие перспективы в nanoиндустрии и нанотехнологии. Особый интерес представляет исследование нанопроводов и наноконтактов.

В моей работе проведено теоретическое исследование магнитных свойств палладиевых наноконтактов.

## Методы

Расчеты выполнены методом первопринципной молекулярной динамики на основе теории функционала электронной плотности [9]. Для вычислений была использована программа, итерационно решающая самосогласованную систему уравнений Кона-Шэма с использованием псевдопотенциалов в базисе плоских волн [10,11]. Для обмена и корреляции использовались приближения локальной плотности (ЛП) и обобщенного градиента (ОГ). Для интегрирования в обратном пространстве выбирались специальные k-точки по схеме, предложенной Монкхорстом и Паком [12].

## Результаты

В данной работе были проведены исследования магнитных свойств палладиевых наноконтактов, особенностей их атомной и электронной структуры. Для расчетов использовались две модели наноконтактов (Рис.1).

В ходе первопринципных расчетов было обнаружено неоднородное распределение длин связи между атомами в цепи наноконтакта (Рис.2) и обнаружен переход палладиевых

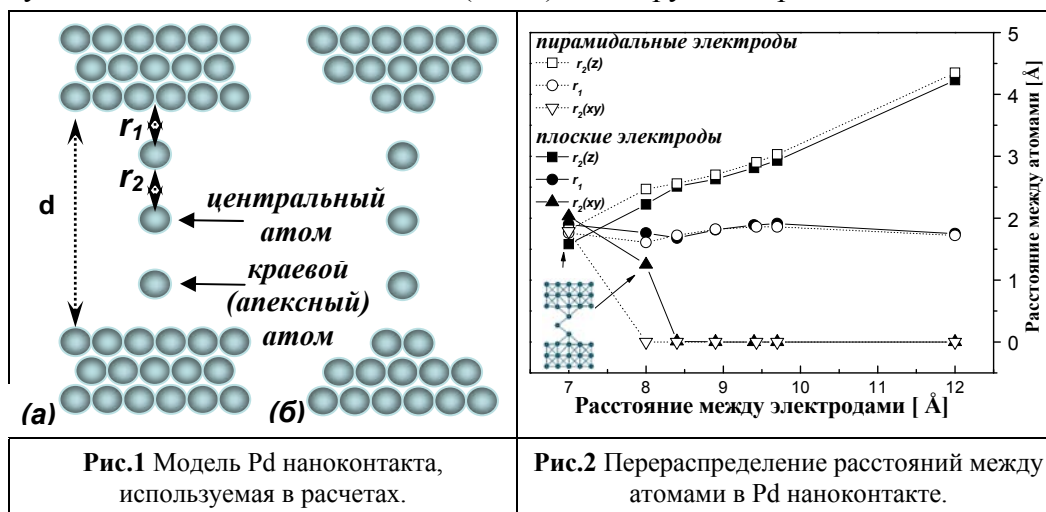
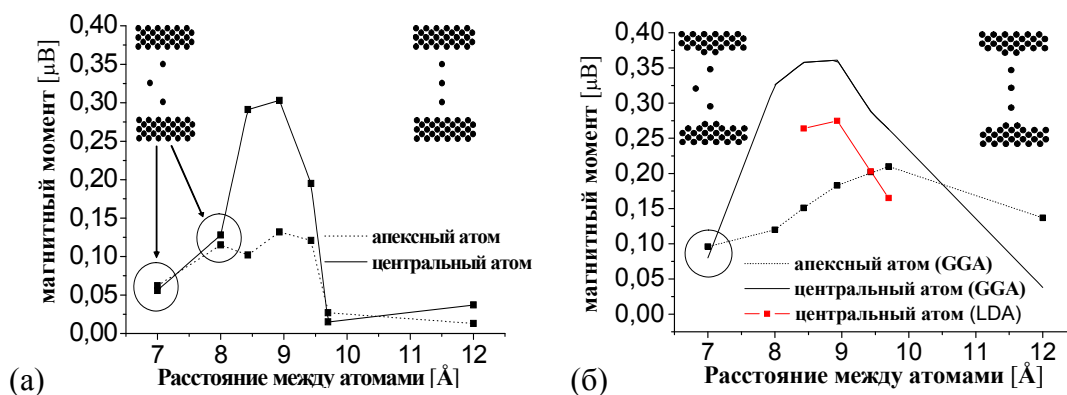


Рис.1 Модель Pd наноконтакта, используемая в расчетах.

Рис.2 Перераспределение расстояний между атомами в Pd наноконтакте.

наноконтактов из линейной конфигурации в зигзаговую при сжатии электродов (расстояние между электродами  $\sim 8\text{\AA}$ ). В работе была установлена зависимость величины магнитного момента от расстояния между электродами в Pd наноконтакте. В результате расчетов было

обнаружено наличие магнитных свойств у Pd наноконтактов и доказано, что для Pd наноконтактов существует магнитное решение вне зависимости от используемых моделей и методик расчета в широком диапазоне расстояний между электродами. В работе было зафиксировано появление локальных магнитных моментов значительной величины 3,6 $\mu_B$  (Рис.3).



**Рис.3** Зависимость величины магнитного момента от расстояния между электродами для модели плоских электродов (а) и для модели пирамидальных электродов (б)\*

\*Кругом отмечен момент перехода из линейной конфигурации в зигзаговую

Кроме того, было подробно изучено влияние примесного атома Н на свойства атомной и электронной структуры Pd наноконтактов. В ходе расчетов было обнаружено, что в присутствии примесного атома Н палладиевый нанокontakt изменяет свою атомную структуру и теряет свои магнитные свойства.

### Литература

1. Delin, E. Tosatti, R. Weht, Magnetism in Atomic-Size Palladium Contacts and Nanowires. *Phys. Rev. Let.*, 92, №5,057201 (2004).
2. Simone S. Alexandre, Maurizio Mattesini, Comment on “Magnetism in Atomic-Size Palladium Contacts and Nanowires”. *Phys. Rev. Let.*, 96,079701 (2006).
3. 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).
4. Delin, E. Tosatti, R. Weht, Delin, Tosatti, and Weht Reply, *Phys. Rev. Let.*, 96,079702 (2006).
5. Tomoko Matsuda and Tokushi Kizuka, Palladium Wires of Single Atom Width as Mechanically Controlled Switching Devices. *Japanese Journal of Applied Physics*, 45, 50.
6. Varlei Rodrigues, Jefferson Bettini, Paulo C. Silva, and Daniel Ugarte, Evidence for Spontaneous Spin-Polarized Transport in Magnetic Nanowires, *Phys. Rev. Let.*, 91,096801, (2003).
7. F. Sato, A. S. Moreira, J. Bettini, P. Z. Coura, S. O. Dantas, D. Ugarte, and D. S. G, On the Formation of Copper Linear Atomic Suspended Chains, *Phys. Rev. Let.*, 91,096801, (2003).
8. K. M. Smelova, D. I. Bazhanov, V. S. Stepanyuk, W. Hergert, A. M. Saletsky, and P. Bruno, [Interplay between magnetism and structure in atomic-size Pd contacts: Ab initio studies](#), *Phys. Rev. B* 77, 033408 (2008)
9. A. Gonis, Theoretical materials science, 2000.
10. G. Kresse and J. Furthmuller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54:11169, (1996).
11. P. Blochl. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B* 50, 17953 (1994).
12. Hendrik J. Monkhorst, James D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13, 5188 (1976)

## Критические индексы с учетом динамического скейлинга для адсорбции на нанокластерах

**Таскин Андрей Николаевич, Удодов Владимир Николаевич, Потекаев Александр Иванович**  
старший преподаватель

Хакасский государственный университет им. Н.Ф.Катанова, Абакан, Россия

E-mail: tahk@rambler.ru; udodov@khsu.ru

Изучение фазовых превращений в низкоразмерных системах интенсивно проводится в последнее время. И особенно это касается одномерных структур – 1D (квантовые нити, линейные цепочки атомов). Такие структуры могут появляться на Различных поверхностях.

Согласно современным представлениям теории фазовых переходов индекс  $z$  определяет поведение времени релаксации вблизи от точки фазового перехода

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1)$$

где  $\xi$  - корреляционная длина,  $z$  – динамический критический индекс. Для многих моделей в термодинамическом пределе (в частности, в теории Ландау-Халатникова)  $z=2$ . Для моделей конечного размера время релаксации параметра порядка в критической области ( $\xi = L = N$ , где  $L$  – длина системы,  $N$  – число узлов в одномерной модели) определяется формулой

$$\tau \sim L^z = N^z. \quad (2)$$

Вначале рассчитывалось время релаксации как функция размера системы.

Рассчитывался динамический критический индекс  $z_0$  в нулевом приближении  $z_0 \approx 2$ . Затем учитывались поправки, следующие из гипотезы скейлинга (подобия)

$$\tau = N^z f\left(\frac{\xi}{N}, \varepsilon N^{-z}\right), \quad (3)$$

где  $\tau$  – время релаксации,  $z$  – динамический критический индекс,  $\xi$  - корреляционная длина. Время релаксации  $\tau$  разложено в ряд по малому параметру  $\alpha$ , зависящему от температуры, числа узлов и динамического критического индекса  $z$

$$\langle \tau \rangle = N^z \cdot (f_0 + f_1 \cdot \alpha + f_2 \cdot \alpha^2 + \dots), \quad (4)$$

где  $z = c \cdot z_0$ ,  $z_0$  – индекс  $z$  без учета скейлинговых поправок (т.е. в нулевом приближении),

$$\alpha = N^{-z - \frac{1}{\nu}}, \quad (5)$$

$c, f_1, f_2, \dots$  – подгоночные параметры,

$$f_0 = \frac{N^{z_0}}{\langle \tau \rangle}, \quad (6)$$

– коэффициент пропорциональности в нулевом приближении  $\nu$  – индекс, определяющий поведение корреляционной длины при изменении температуры. Полученный ряд должен сходиться.

Из уравнения (4), взяв  $f_2=f_3=\dots=0$ , зная  $z$  в нулевом приближении, можно найти  $z$  в первом приближении, меняя параметр  $f_1$  и выбирая, те  $z$ , для которых среднее квадратичное отклонение будет минимально, а ряд (4) сходящийся. Затем, взяв  $f_3=f_4=\dots=0$ , находим  $z$  во втором приближении, меняя параметр  $f_2$ . И так далее.

Данным методом был найден  $z$  в первом приближении. В среднем  $z_1 \approx 2,2 \pm 0,4$ , т.е.  $z_1$  в первом приближении увеличивается по сравнению с  $z_0$  в нулевом приближении.

Показано, что индекс  $z$  может увеличиться в 5-6 раз и более по сравнению со значением в нулевом приближении, что существенно больше, чем для макросистем. Это означает, что зависимость времени релаксации от размера системы для адсорбции на малых кластерах гораздо сильнее, чем для макросистем. Таким образом, адсорбция на нанокластерах может протекать иначе, чем обычная адсорбция в макросистемах.

## Резонансная дифракция рентгеновского излучения в кристаллах RDP

Трошков Егор Викторович

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: [Webegor@yandex.ru](mailto:Webegor@yandex.ru)

Резонансная дифракция рентгеновского излучения – интенсивно развивающийся метод исследования структуры и свойств конденсированных сред, который реализуется, в основном, в центрах синхротронного излучения. Его отличие от нерезонансной дифракции рентгеновских лучей состоит в том, что в рассеянии излучения участвуют только те атомы, которые имеют края поглощения, близкие к энергии падающего излучения. Метод является селективным, и позволяет изучать отдельные группы атомов.

Чисто резонансные отражения возникают вблизи края вследствие того, что атомный фактор становится тензором, свойства которого определяются симметрией локального окружения резонансного атома. Тензор атомного фактора можно представить в виде суммы диполь-дипольного вклада и вкладов высших порядков [1]. Локальные искажения структуры, обусловленные тепловыми колебаниями, дефектами и другими факторами, также могут дать вклад в чисто резонансные отражения.

В настоящей работе рассматривается появление чисто резонансных отражений в кристалле  $\text{RbD}_2\text{PO}_4$  (RDP) вблизи К-края рубидия. При  $T > 123$  К этот кристалл имеет симметрию  $I-42d$ . Атомы водорода могут флуктуировать между двумя положениями в элементарной ячейке, и структура локально искажена. Нами рассчитаны различные вклады в тензорный атомный фактор вблизи К-края рубидия и показано, что рефлексy  $00l$ ,  $l=4n+2$ ;  $h-h0$ ,  $h=2n+1$ ;  $hhl$ ,  $2h+l=4n+2$  остаются запрещенными в диполь-дипольном приближении, но могут возникнуть благодаря диполь-квадрупольному вкладу. Было проведено численное моделирование энергетических спектров отражений 5-50, 006, 666 (спектры соответствующих рефлексов показаны на рис. 1).

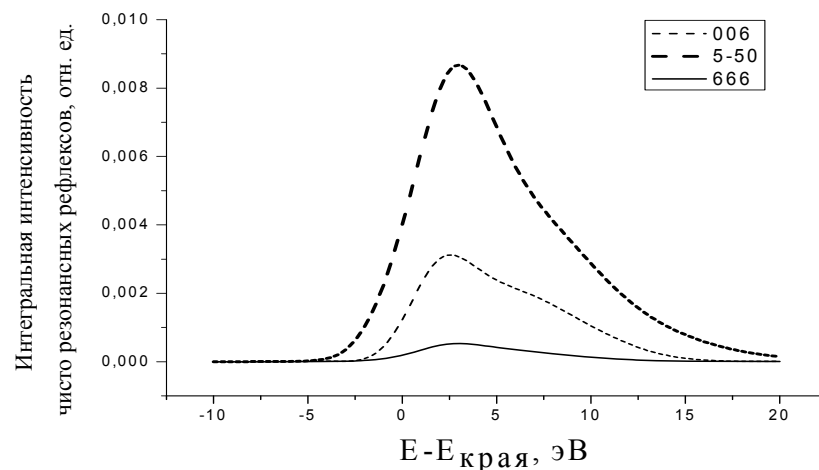


Рис.1 Спектры рефлексов 006, 5-50 и 666 в диполь-квадрупольном приближении

Теоретическое рассмотрение показывает, что указанные рефлексy могут возникать также благодаря тепловым колебаниям атомов и квантовым флуктуациям водорода. Все типы вкладов по-разному зависят от температуры, поэтому их разделение возможно. Предварительные

эксперименты, выполненные на синхротроне в «Курчатовском центре СИ и НТ» подтвердили существование предсказанных рефлексов.

Работа поддержана грантом РФФИ 07-02-00324-а

[1] Dmitrienko V.E., Ishida K., Kirfel A., Ovchinnikova E.N. Acta Cryst. 2005. A61.481 – 49

# Оптические свойства фуллеритовых пленок разной степени совершенства Чертопалов Сергей Васильевич<sup>8</sup>

научный сотрудник

Донецкий национальный университет, Донецк, Украина

E-mail: chsv@dongu.donetsk.ua

## Введение

В многочисленных работах, начиная с 1991 года, в спектрах оптического поглощения наблюдали плавно спадающие зависимости  $\alpha(E)$  в области энергий ниже фундаментальных переходов, которые называют «хвостом» Урбаха, а также подзонным поглощением на дефектах. Относительно причины появления хвостов поглощения нет единого мнения [1-3].

Анализ литературных данных затруднен в связи с тем, что во многих работах вместе с оптическим поглощением, фотопроводимостью, проводимостью или иными физическими параметрами не анализируется структура пленок, что приводит к большому разбросу экспериментальных данных.

Работа посвящена установлению взаимосвязи оптических свойств фуллеритовых пленок с их структурным состоянием и выявлению природы поглощения в длинноволновой области спектра видимого излучения.

## Методы

Фуллеритовые пленки получали методом термического осаждения на стеклянную подложку. Для получения пленок разной степени совершенства изменяли температуру подложки и проводили последующий отжиг пленок.

Степень совершенства пленок и их фазовый состав контролировали методами электронной микроскопии и микродифракции при помощи электронного микроскопа JEM – 200. Толщину полученных пленок - при помощи микроинтерферометра МИИ-4.

## Результаты

Независимо от температуры подложки на стеклянной подложке формируются аморфно-кристаллические фуллеритовые пленки. Кристаллическая фаза представлена  $C_{60}$  с ГЦК- решеткой, параметр которой  $1,434 \pm 0,003$  нм. Доля аморфной фазы существенно зависит от температуры подложки и последующего отжига.

Повышение температуры подложки от  $20^\circ\text{C}$  до  $160^\circ\text{C}$  способствует уменьшению доли аморфной фазы, оцененной методом секущих, от  $(20 \pm 3)\%$  до  $(9 \pm 0,5)\%$ , что подтверждается заметным снижением интенсивности диффузных максимумов.

Дефекты кристаллической фазы пленки представлены дислокациями, дефектами упаковки и двойниками. Дислокации располагаются как по границам кристаллитов, так и внутри них. Средняя плотность дислокаций в фуллеритовой пленке на подложке комнатной температуры достигает  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ , а для пленок на нагретой подложке -  $(4,3 \pm 0,5) \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

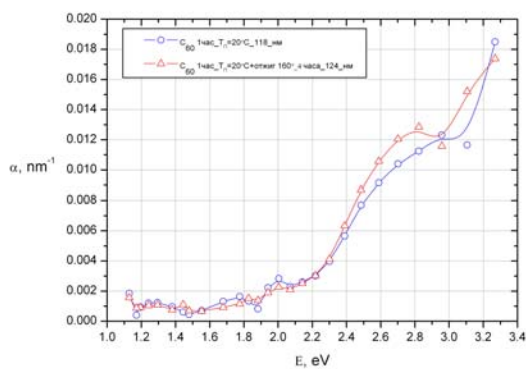
Отжиг с одной стороны, способствует снижению плотности уже имеющихся дислокаций вследствие релаксации структуры и укрупнения зерен, а с другой, инициируя дальнейшую кристаллизацию аморфной фазы, способствует образованию мелких кристаллитов, а значит, большого числа межкристаллитных границ, которые имеют дислокационную природу. При отжиге пленок, осажденных на нагретую подложку, преобладает второй фактор.

На рисунке приведены спектры поглощения фуллеритовых пленок, полученных осаждением в вакууме на подложки при разных температурах.

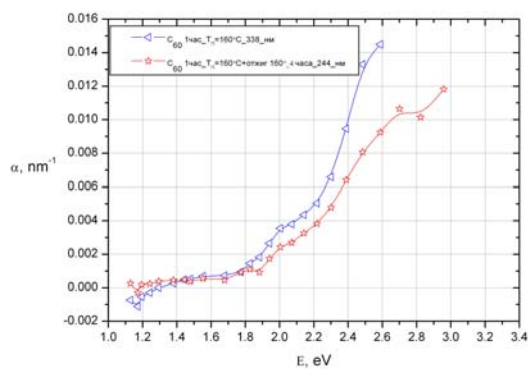
---

<sup>8</sup> Автор выражает признательность Бажину А.И., Беседе Е.А., Глазуновой В.А., Ступаку В.А., Троцан А.Н. за помощь в подготовке тезисов.





а



б

Рисунок. Спектры поглощения фуллеритовых пленок разной степени совершенства (рисунок а – для  $T_{\text{п}}=20^{\circ}\text{C}$ , б -  $T_{\text{п}}=160^{\circ}\text{C}$ ).

Установлено, что ширина запрещенной зоны фуллеритовых пленок практически не зависит от температуры подложки и составляет для пленки, осажденной на не нагретую подложку ( $2,24 \pm 0,02$ ) эВ, а для пленки на подложке  $T_{\text{п}}=160^{\circ}\text{C}$  - ( $2,26 \pm 0,05$ ) эВ, что согласуется с литературными данными [1]. Для выявления возможных электронных переходов экспериментальные спектры оптического поглощения разкладывали на гауссовы составляющие с помощью математических пакетов Origin и PeakFit.

Для пленок, осажденных на не нагретую подложку ( $T_{\text{п}}=20^{\circ}\text{C}$ ;  $h=118$  нм) обнаружены оптические переходы с энергиями 1,29 эВ, 1,77 эВ, 2,00 эВ, 2,48 и 2,96 эВ. Для пленок сформированных на нагретой подложке ( $T_{\text{п}}=160^{\circ}\text{C}$ ;  $h=338$  нм) выявлены четыре оптических перехода с энергиями 1,55 эВ, 1,83 эВ, 2,00 эВ и 2,48 эВ. Оптический переход с энергией 2,00 эВ соответствует внутримолекулярному переходу  $h_u \rightarrow t_{1u}$  внутри зоны  $\gamma_3$  и не зависит от совершенства структуры пленок.

Низкоэнергетические переходы с энергиями 1,29 эВ и 1,77 эВ для более дефектной пленки смещаются при повышении совершенства пленок в область больших энергий, а величина коэффициентов поглощения соответствующих квантов видимого света снижается.

Влияние отжига (в течение четырех часов) на спектры поглощения проявляется в сглаживании особенностей длинноволновой области спектра и уменьшении поглощения в этой области. Установлено, что коэффициент поглощения при энергиях квантов видимого света, соответствующих энергии первого перехода  $E_1$ , линейно зависит от доли аморфной фазы в фуллеритовых пленках, поэтому можно полагать, что этот переход соответствует переходу электрона из валентной зоны на уровень, созданный аморфной фазой в запрещенной зоне.

## Литература

1. Макарова Т.Л. Электрические и оптические свойства мономерных и полимеризованных фуллеренов // Физика и техника полупроводников.-2001.-Т.35, вып.3.- С.257-293.
2. Бусыгина Е.Л. Моделирование оптических свойств и электронной структуры фуллеритов: Автореф. Дис...к.ф.-м.н.:01.04.01/ Удмуртский гос.унив.- Ижевск, 2005 г.-19с.
3. Орлов В.И., Никитенко В.И., Николаев Р.К. Экспериментальное изучение дислокаций в монокристаллах фуллерена  $C_{60}$  и механизмов их пластической деформации // Письма в ЖЭТФ.- 1994.-Т.59, вып.10.-С.667-670.

## Кинетика тепло- и массообмена в условиях химической реакции

Чуркина Н.В.

аспирант

Тольяттинский государственный университет, Физико-технический институт, г.Тольятти, Россия.

E-mail: [natalia.churkina@gmail.com](mailto:natalia.churkina@gmail.com)

Явления тепло- и массообмена достаточно широко распространены в природе и на производстве. Решение уравнений тепло- и массопереноса при фазовых превращениях или в условиях химической реакции представляет сложную задачу, так как в общем случае нужно найти решение системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. В интересных для практики случаях процесс фазового превращения или химической реакции начинается с поверхности частицы. В этом случае для частицы решается внутренняя задача о тепло- и массообмене в условиях фазового превращения или химической реакции. В работе предлагается приближенный метод решения системы уравнений кинетики, который дает возможность численного анализа процесса химической реакции, а также фазовых превращений.

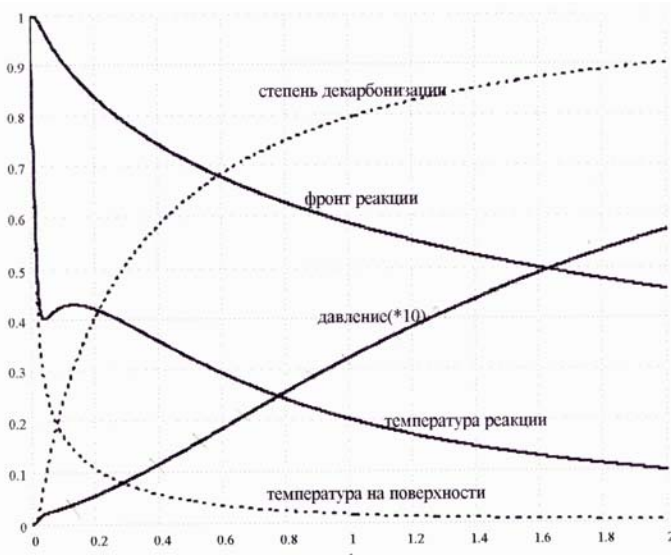


Рис.1 Зависимость параметров, характеризующих кинетику обжига  $\text{CaCO}_3$  от безразмерного времени

для случая декарбонизации частиц известняка размером  $2 \cdot 10^{-4}$  м, при  $T_f=950$  К,  $T_0=600$  К. Полученные зависимости соответствуют представлениям о физике реального процесса. Время декарбонизации  $F_0=0.2$ ,  $t=0.4$  с по порядку величины согласуется с результатами для циклонных декарбонизаторов [2].

В методе квазиравновесного приближения существенно упрощается математический аппарат. В итоге получается система уравнений, достаточно простая для численных расчетов. Изменяя начальные условия и безразмерные параметры массо- и теплообмена, можно проследить изменение кинетики процесса и оптимизировать условия, исходя из поставленной конкретной технологической цели.

### Литература

1. Физические величины. Справочник под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. –М.: Энергоатомиздат, 1991.
2. Скиданенко В.И., Шепелев Н.Н. Исследование кинетики диссоциации известняка. – Труды НИИЦЕММАШа. – вып. XXIII. – Тольятти, 1980.

**Моделирование тепловых процессов в материалах при облучении тяжелыми ионами  
высоких энергий в рамках обобщенной модели термического пика**

**Шарипов Зариф Алимжонович**

стипендиат

Лаборатория Информационных Технологий,

Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия

E-mail: [zarif@jinr.ru](mailto:zarif@jinr.ru)

**Введение**

В последние годы с возрастающим интересом проводятся экспериментальные исследования для изучения воздействий тяжелых заряженных частиц на материалы [1]. Один из моделей описывающий тепловые процессы при воздействии тяжелых заряженных частиц на материалы это модель термического пика [1, 2].

При прохождении тяжелых заряженных частиц через вещество теряемая частицей энергия в основном расходуется при непосредственном взаимодействии с ионами решетки (ядерные столкновения) и путем взаимодействия с электронами (ионизация, поляризация). Компьютерная программа SRIM-2003 [3] позволяет вычислять потери энергии тяжелых ионов, которые затрачиваются на основные процессы, вызываемые тяжелым ионом при его прохождении через конденсированные среды, а именно:

- на неупругие ( $S_{inel}(z) \equiv (-\partial E(z) / \partial z)_{inel}$ ),
- на упругие потери энергии ( $S_{elastic}(z) \equiv (-\partial E(z) / \partial z)_{elastic}$ ),
- на фононные возбуждения – потери энергии ( $S_{phonons}(z) \equiv (-\partial E(z) / \partial z)_{phonons}$ ).

При облучении никеля ионами урана с энергией 700 МэВ полные потери энергии следующие (SRIM-2003):  $E_{inel} \approx 690$  МэВ (98,48%) и  $E_{phonons} \approx 10$  МэВ (1,52%)

Целью настоящей работы является применение модели термического пика для исследования тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ с учетом потери энергии на фононные колебания.

**Постановка задачи**

С учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат в обоих слоях может быть записана в виде [1]:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e^\perp(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e^\parallel(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_{e,i})(T_e - T_i) + A_e(r, z, t) \quad (1)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_i^\perp(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_i^\parallel(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + g(T_{e,i})(T_e - T_i) + A_i(r, z, t) \quad (2)$$

$$A_e(r, z, t) \equiv b_e S_{inel0} \exp \left[ -\frac{(t - t_{e0})^2}{2\sigma_{et}^2} \right] \exp \left( -\frac{r}{r_{e0}} \right) \mu_1(z),$$

$$A_i(r, z, t) \equiv b_i S_{phonons0} \exp \left[ -\frac{(t - t_{i0})^2}{2\sigma_{it}^2} \right] \exp \left( -\frac{r}{r_{i0}} \right) \mu_2(z),$$

где  $A_e(r, z, t)$  и  $A_i(r, z, t)$  источник энергии, вносимый налетающим ионом урана в электронную и решеточную подсистему соответственно.

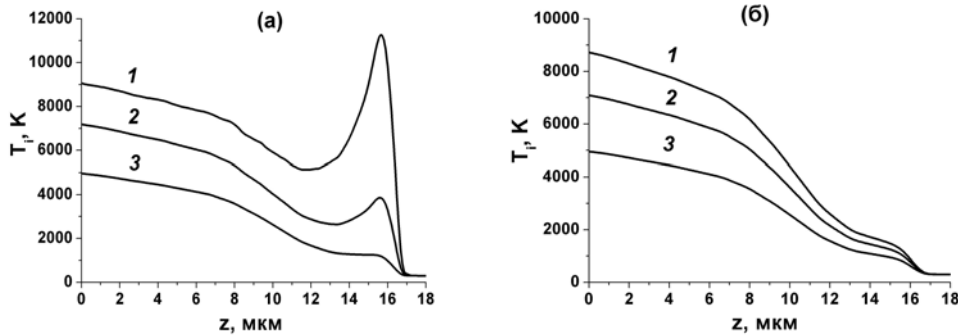
Система (1)-(2) решается со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300K, \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad T_{e,i}(R_{\max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\max}, t) = T_0 \quad (4)$$

### Метод численного решения и обсуждения результатов

Для численного решения системы уравнений (1) – (4) была использована конечно-разностная схема переменных направлений с порядком аппроксимации  $O(h_t^2 + h_r^2 + h_z^2)$  [4].



**Рис.1.** Температурные зависимости по глубине мишени в разных расстояниях от оси  $OZ$  ( $1 - r = 0$ ,  $2 - r = 25 \text{ \AA}$ ,  $3 - r = 50 \text{ \AA}$ ) с учетом потери энергии на фононы (а) и без учета (б) в момент времени  $t = 6 \times 10^{-15} \text{ c}$ .

На рис.1. представлено температурные зависимости по глубине мишени в разных расстояниях от оси  $OZ$  с учетом потери энергии на фононы и без учета. Из представленного рисунка видно, что учет потери энергии на фоновые возбуждения приводит резкому росту температуры в глубине мишени в рамках данной предложенной модели. Проведенные численное исследование показывает сильную зависимость модели от потери энергии на фоновые возбуждения (или от действия источника на решеточную подсистему), т.е. учет около 10 МэВ энергетических потерь на решеточную подсистему поднимает температуру в разы в области остановки иона (рис.1.а).

### Заключение

В работе на основе обобщенной модели термического пика получены результаты численного исследования температур электронного газа и кристаллической решетки никеля при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ. Выполнен численный анализ схем вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. Учет энергетических потерь на возбуждение фоновых колебаний приводит к возрастанию температуры в глубине мишени.
2. При учете энергетических потерь на фоновые колебания, размер области, где температура мишени превышает температуру плавления материала больше относительно модели, где не учитывается энергетические потери на фоновые колебания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 06-01-00228 и № 05-01-00645-а.

### Литература

- [1] Амирханов И.В и др. Письма в ЭЧАЯ, 2006, т.3, №1(130), с.63-75.
- [2] Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В. Теория релаксационных изменений в металлах. Атомная Энергия, 1959, Т.6, с.391-402.
- [3] Biersack J.P., Haggmark L.G. A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., 1980, B174, pp.257-269. (<http://www.srim.org>)
- [4] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989, с.372-373.

## Исследование химического состава поверхности низкоразмерных частиц серебра

**Юдин Андрей Леонидович**

доцент, к.ф.-м.н.

Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия

E-mail: [andrey@kemsu.ru](mailto:andrey@kemsu.ru)

Основной тенденцией в современных научных направлениях является изучение свойств наноструктур и теорий явлений в малых объектах (низкоразмерных системах). Уникальность свойств и характеристик таких объектов во многом определяется их поверхностным или межфазным составом. В свою очередь, протекающие на поверхности наноструктур процессы играют значительную роль в высокодисперсных системах – адсорбентах и катализаторах, композиционных материалах, пленочных системах. Наноразмерные частицы целого ряда металлов (Ag, Pd, Ni, Cu), нанесенные на различные поверхности проявляют избирательную эффективность в каталитических процессах превращений углеводородов и в реакциях конверсии газов.

Благодаря поверхностной чувствительности с помощью метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) можно получать не только информацию об электронном строении частиц металла, но и идентифицировать состояние адсорбатов. В данной работе методом РФЭС было выполнено исследование химического состава зольей серебра, восстановленных из ионов металла в растворе, до и после адсорбции кислорода в процессе термообработки.

Метод получения порошков металлического серебра заключался в восстановлении нитрата серебра гидрохиноном, в присутствии лимоннокислого натрия и желатины. Электронно-микроскопическое исследование показало, что средний размер серебряных частиц варьировался от 500 до 800 Å. Адсорбция кислорода осуществлялась при атмосферном давлении, путем напуска газа в камеру подготовки спектрометра. Последующий нагрев образцов до 300 °С осуществлялся как в камере подготовки, так и в муфельной печи. После каждого этапа обработки проводилась запись РФЭ-спектров.

Был идентифицирован химический состав поверхности наночастиц серебра и установлена природа хемосорбированных поверхностных состояний кислорода в диапазоне 25-300 °С. Хорошо известно, что хемосорбированный на поверхности металлических частиц кислород является реакционным центром многих каталитических реакций. Для избавления от вклада "камерного фонового" кислорода все спектры O 1s были проанализированы в разностной форме. Анализ сигнала O 1s в области 529-530 эВ позволяет утверждать об образовании на поверхности серебряных частиц при комнатных температурах адсорбции молекулярно хемосорбированной формы кислорода O<sub>2алс</sub> с энергией связи 1s линии ~ 530 эВ. Нагрев образцов в интервале 100-150 °С приводят к трансформации этой формы в O<sub>2</sub><sup>-</sup> или атомарную форму O<sup>-</sup> с энергией связи 1s уровня 529 эВ. При температуре отжига более 150 °С указанные состояния кислорода вырождаются.

Установлено отклонение электронных свойств наноразмерных зольей серебра от свойств массивного металла, характеризующееся ухудшением проводимости, что проявляется в эффекте дифференциальной подзарядки, изменении структура валентной 4d-зоны и Оже-параметра, а также смещением энергии связи 3d-уровня в сторону больших величин относительно массивного металла. Результаты экспериментов показывают для энергии связи 3d<sub>5/2</sub> уровня зольей серебра с размерами 50-80 нм значение 368,4 эВ. Был произведен расчет химического сдвига для зольей серебра относительно металла, основанный на учете изменения энергия связи 3d<sub>5/2</sub> уровня, Оже-линии M<sub>5VV</sub>, модифицированного параметра Вагнера, распределения плотности 4d-состояний, положения уровня Ферми и наличия релаксации в конечном

состоянии. Ширина 3d-линий серебряных зольев превосходит ширину линий для нанесенных металлических частиц серебра и массивного металла. Проявление подобных качеств определяется в основном условиями получения зольев и существованием нескольких фаз серебра отличных по валентности.