

Тезисы конференции Физика.СПб/2023

23-27 октября 2023 года

Здесь представлены принятые на конференцию тезисы.

В сборнике трудов будут опубликованы только представленные на конференции работы.

Тезисы конференции

Секции

- [Астрономия и астрофизика](#) [32]
- [Биофизика](#) [16]
- [Матфизика и численные методы](#) [30]
- [Наноструктурированные и тонкопленочные материалы](#) [105]
- [Оптика и спектроскопия](#) [49]
- [Оптоэлектронные приборы](#) [29]
- [Поверхностные явления](#) [15]
- [Приборы и материалы ТГц и СВЧ диапазона](#) [9]
- [Примеси и дефекты в твердом теле](#) [19]
- [Физика и технология преобразования энергии](#) [14]
- [Физика квантовых структур](#) [20]
- [Физика плазмы, гидро- и аэродинамика](#) [37]
- [Физика ферроиков](#) [10]
- [Атомная физика и физика элементарных частиц](#) [4]
- [Другие вопросы физики](#) [17]

Астрономия и астрофизика

TAIGA – гибридный комплекс для многоканальной астрономии высоких энергий

Буднев Н. М.¹, Кузьмичев Л.А.²

¹ИГУ, ²НИИЯФ МГУ

e-mail: nbudnev@api.isu.ru

Гибридный комплекс установок TAIGA (Tunka Advanced Instrument for cosmic ray physics and Gamma Astronomy) предназначен для решения широкого круга вопросов в области астрофизики высоких энергий [1,2]. TAIGA объединяет различные типы установок для регистрации черенковского излучения и заряженных частиц ШАЛ. Пилотный комплекс TAIGA-1 расположен в Тункинской долине, примерно в 50 км к западу от озера Байкал. Он включает в себя 120 широкоугольных черенковских станций установки TAIGA-HiSCORE, распределенных на площади 1,1 км², три атмосферных черенковских телескопа (АЧТ) установки TAIGA-IACT, расположенные в вершинах треугольника со сторонами 300, 400 и 500 м и сеть станций для регистрации заряженной компоненты ШАЛ, в том числе мюонов, установок Tunka-Grande и TAIGA-Muon [3].

В гамма-обсерватории TAIGA впервые в истории экспериментальной гамма-астрономии для исследования энергетического спектра галактических гамма-источников используется в полном объеме «гибридный метод» выделения событий от гамма-квантов. Гибридный метод объединяет в анализе данные о пространственно-временных характеристиках черенковского света ШАЛ, которые определяются с помощью установки TAIGA-HiSCORE и о изображении ШАЛ в черенковском свете, регистрируемых с помощью АЧТ установки TAIGA-IACT. Интегральная чувствительность комплекса при гибридном методе регистрации равна $2.5 \cdot 10^{13}$ ТэВ см⁻² сек⁻¹ при энергии 100 ТэВ за 300 часов наблюдения при требуемом избытке числа гамма-квантов над фоном в 5 сигма. При восстановлении энергетического спектра от известных источников можно ограничиться значимостью избытка в 2 сигма. Чувствительность при этом равна 10^{-13} ТэВ см⁻² сек⁻¹. Ожидаемое число событий при энергии 100 ТэВ за 300 часов будет около 10. Чувствительность при энергии выше 10 ТэВ при стерео-методе выделения гамма-квантов составит при 300 часах наблюдения около 10^{-12} ТэВ см⁻² сек⁻¹ при требуемом избытке числа гамма-квантов над фоном в 5 сигма.

Ближайшие планы по развитию комплекса TAIGA-1 включают развертывание еще двух АЧТ и увеличение площади сцинтилляционных детекторов частиц до 500 м². Дальнейшее развитие проекта TAIGA в основном связано с расширением установки TAIGA-HiSCORE. Таким образом, при увеличении площади в 10 раз (с созданием установки TAIGA-10) количество событий от Крабовидной туманности за 100 часов наблюдения достигнет ~300 при энергиях выше 100 ТэВ. Для подавления адронного фона мы планируем также использовать небольшие черенковские телескопы с камерами на базе SiPM с полем зрения 25-30 градусов и эффективной площадью регистрации 1 м².

В докладе представлен текущий статус проекта TAIGA, планы его развития, а также полученные результаты по исследованию энергетического спектра и массового состава космических лучей в области энергий 0,1 - 1000 ПэВ, измерения потоков гамма-квантов и их энергетического спектра от ряда источников и поиска оптических транзиентов наносекундного диапазона.

Список литературы

1. Budnev N. TAIGA—an advanced hybrid detector complex for astroparticle physics and high energy gamma-ray astronomy in the Tunka valley /N. Budnev, I. Astapov, P. Bezyazeev, E. Bonvech // JINST. – 2020. -V.15. -N.09. P. C09031 DOI: 10.1088/1748-0221/15/09/C09031
2. Kuzmichev L. Cherenkov EAS arrays in the Tunka astrophysical center: From Tunka-133 to the TAIGA gamma and cosmic ray hybrid detector / L. Kuzmichev, I. Astapov, P. Bezyazeev, A. Borodin, M. Brückner, N. Budnev et al. // Nucl.Instrum.Meth. A952 (2020) 161830. DOI: 10.1016/j.nima.2019.01.056
3. R. Monkhoev Tunka-Grande and TAIGA-Muon scintillation arrays: status and prospects / R. Monkhoev, I. Astapov, P. Bezyazeev, A. Borodin, M. Brueckner, N. Budnev et al. // J.Phys.Conf.Ser. 1697 (2020) no.1, 012026 DOI: 10.1088/1742-6596/1697/1/012026

Исследование орбитальной динамики астероида 2023 BU, совершившего рекордное сближение с Землей

Мартюшева А. А.¹, Девяткин А.В.¹, Львов В.Н.¹, Горшанов Д.Л.¹, Русов С.А.¹

¹ГАО РАН

e-mail: *alex.mart13@gmail.com*

В рамках Пулковской программы изучения объектов, сближающихся с Землей, на телескопе МТМ-500М было выполнено более 1500 наблюдений астероида 2023 BU [1, 2], открытого в самом начале 2023 года российским астрономом Г.В. Борисовым всего за несколько дней до своего чрезвычайно тесного сближения с Землей на расстоянии около 3.5 тыс. км от ее поверхности. Несмотря на отсутствие риска столкновения, это было одно из самых тесных сближений астероида с Землей среди когда-либо зарегистрированных, что привлекло внимание астрономов по всему миру.

На основе плотных астрометрических рядов наблюдений данного астероида было проведено уточнение его орбиты, а также исследована ее эволюция. Кроме того, были сделаны оценки влияния таких негравитационных эффектов, как давление солнечной радиации и эффект Ярковского, которые вносят существенный вклад в орбитальное движение на длительных промежутках времени, что актуально в связи с проблемой астероидно-кометной опасности.

Мартюшева А.А. выражает благодарность за финансовую поддержку выполненных работ Российскому научному фонду (проект №23-22-00306, <https://rscf.ru/project/23-22-00306/>).

Список литературы

1. https://ssd.jpl.nasa.gov/tools/sbdb_lookup.html#/?sstr=2023BU&view=OPC
2. <https://minorplanetcenter.net/mpec/K23/K23B72.html>

Влияние мелкомасштабного поля на нагрев полярной шапки радиопульсара J0901-4046

Барсуков Д. П.¹, Воронцов М.В.², Морозов И.К.¹, Попов А.Н.¹, Матевосян А.А.²
ФТИ им. А.Ф.Иоффе¹, СПбПУ²

e-mail: bars.astro@mail.ioffe.ru

Пульсар J0901-4046 имеет период вращения $P = 75.8$ сек и является наиболее медленно вращающимся среди одиночных радиопульсаров. Мы рассматриваем влияние величины мелкомасштабного магнитного поля в модели смещенного диполя на обратный ток позитронов во внутреннем зазоре и связанный с ним нагрев полярной шапки пульсара. Пульсар рассматривается в модели "внутреннего зазора" со свободным истечением частиц с поверхности нейтронной звезды. Учитывается только рождение электрон-позитронных пар при поглощении квантов изгибного излучения в магнитном поле. При этом предполагается, что пары рождаются в связанном состоянии — в виде позитрониев, которые затем фотоионизируются тепловыми фотонами с поверхности звезды. Не учитываются влияние поляризации изгибного излучения, расщепление фотонов и распад позитрониев.

Анализ динамических параметров метеорного комплекса Канкрид и его дрейфового движения

Сергиенко М. В.¹, Андреев А.О.¹

¹Казанский федеральный университет

e-mail: *star1955@mail.ru*

Исследованию астрофизических характеристик малых небесных тел в настоящее время придается особое значение, так как они содержат первозданное вещество Солнечной системы, что важно при построении эволюционной теории. Целью данной работы является определение динамических параметров метеорного комплекса Канкрид (МПК) и изучение его дрейфового движения [1] с использованием методов регрессионного моделирования. Комплекс МПК представляет собой малый поток с 2 ветвями [2]. В исследованиях использовались радиолокационные и телевизионные наблюдения [3]. Минимальная зарегистрированная магнитуда для МПК составила $+3.4^m$, погрешность определения геоцентрической скорости около 1,0 км/с. Координаты радиантов и их суточные вариации для каждой ветви определялись как по координатам отдельных радиантов, так и по координатам, усредненным до 1^0 солнечной долготы. Для изучения распределения радиантов и элементов орбиты применялись методы робастного анализа. В результате получены следующие результаты. Для южной ветви МПК суточный радиантный дрейф определяется более надежно, чем для северной из-за наличия большей наблюдательной базы ее орбиты. Изучение зависимости больших полуосей и эксцентриситетов в диапазоне звездных величин от -4^m до $+4^m$ показало, что для южной ветви значения больших полуосей и эксцентриситетов уменьшаются на 0,22 а.е. и 0,02 соответственно. Геоцентрические скорости для обоих рукавов практически совпадают. Радианты каждой ветви распределены равномерно, субрадианты не обнаружены. Для южной ветви орбиты уменьшаются в зависимости от массы метеоров, что может быть вызвано негравитационным эффектом из-за значительного возраста потока. Метеорный комплекс Канкрид имеет период обращения около 4 лет и подвергаются сильным гравитационным возмущениям со стороны Юпитера. Южная ветвь расположена в зоне сильных резонансов 2:1 и 1:1. Получены радианты для ВМПК, которые согласуются с данными, полученными другими авторами [4]. Уточнены значения суточного хода радиантов, определены площади радиации. Можно предположить, что южная и северная ветви МПК образовались при различных эволюционных процессах, например при вторичном распаде родительского тела. Авторы выражают благодарность за поддержку выполненных работ Российскому научному фонду, грант 22-72-10059.

Список литературы

1. Dumitru B.A., Birlan M., Popescu M., Nedelcu D. A. Association between meteor showers and asteroids using multivariate criteria// *Astronomy & Astrophysics*, 607, A5 (2017).
2. Weissman P.R, Lowry S. C. Structure and Density of Cometary Nuclei // *Meteorit. Planet. Sci.*, Vol. 43, pp. 1033–1047 (2008).
3. Bel'kovich O.I., Ishmukhametova M.G., Suleimanov N.I. Present-Day Methods of Processing of Visual Observations of Meteor Streams and Their Potentialities// *Solar System Research*, Vol. 35, Issue 5, pp. 400-407 (2001).
4. Sergienko M., Sokolova M., Kholshchevnikov K.// *Astronomy Reports*, Vol. 64/ 5, pp. 458-465 (2020).

Молекулы HD в Млечном Пути

Косенко Д. Н.¹, Балашев С.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *kosenkodn@yandex.ru*

Изучение межзвездной среды (МЗС) является неотъемлемой частью исследования эволюции галактик, так как МЗС неразрывно связана с процессами звездообразования. МЗС разделяется на несколько фаз, отличающихся плотностью и температурой. В работе исследуется холодная диффузная среда ($n \sim 100 \text{ см}^{-3}$, $T \sim 100 \text{ К}$), основным трейсером которой является молекулярный водород, H_2 . При достаточной концентрации H_2 в спектре также можно задетектировать его изотополог, молекулы HD. Отношение концентраций HD/ H_2 чувствительно к условиям в среде, что позволяет оценивать физические параметры по измеренным лучевым концентрациям HD и H_2 , используя полуаналитический формализм, основанный на уравнении баланса для молекул HD. Ранее мы провели такие оценки для систем на больших красных смещениях и в Магеллановых Облаках. В этой работе мы выполнили оценку параметров в нашей Галактике, используя лучевые концентрации HD и H_2 , полученные из архивных данных телескопа FUSE, а также населенности уровней тонкой структуры нейтрального углерода, C I, и металличности, найденные в архивных данных космического телескопа Хаббл.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-22-00164

Список литературы

1. S.A. Balashev, D.N. Kosenko, MNRAS: Letters, 2020, vol.492, p.L45-L49
2. D.N. Kosenko, S.A. Balashev, P. Noterdaeme, J.-K. Krogager, R. Srikanand, C. Ledoux, MNRAS, 2021, vol.505, p.3810-22
3. D.N. Kosenko, S.A. Balashev, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics, vol. 16, 2023

Создание многопараметрической модели наблюдательной системы космического телескопа

Чуркин К. О.¹, Андреев А.О.¹

¹Казанский федеральный университет

e-mail: *kchurkin87@gmail.com*

На ближайшее десятилетие во многих странах, в том числе и в России, запланирована серия космических астрофизических экспериментов. Одним из таких проектов является установка оптического телескопа на лунной поверхности. Качественно новый тип наблюдений с помощью налунных измерительных средств позволяет надеяться на выполнение долгопериодических астрофизических наблюдений, как в пределах Солнечной системы, так и в далеком космосе, а также существенно улучшить эфемеридное сопровождения космических аппаратов [1, 2]. В качестве такого телескопа планируется использовать автоматизированный зенитный телескоп (АЗТ), что еще никогда ещё не осуществлялось в мировой практике. В настоящей работе выполнено компьютерное моделирование планируемых наблюдений с целью исследования возможности и эффективности использования АЗТ для описанных выше задач. Моделирование планируемых наблюдений позволит реализовать:

- определение необходимого количества АЗТ и оптимального их расположения;
- разработку программы наблюдений, определение их продолжительности;
- обоснование требований к точности наблюдений с учетом требований к точности определения исследуемых параметров.

На лунной поверхности появляется возможность проводить более точные и достоверные астрофизические наблюдения из-за отсутствия атмосферы [3]. Будет возможным расположить телескоп в лунных кратерах в полярных областях, чтобы исключить влияние солнечного света. Большие перспективы открываются для изучения экзопланет с биосигнатурами. При наблюдении с Земли затруднен спектральный анализ атмосфер экзопланет, налунный телескоп позволит решить эту задачу. Также появится возможность на более высоком уровне исследования сверхмассивных чёрных дыр [4]. Авторы выражают благодарность за поддержку выполненных работ Российскому научному фонду, грант 22-72-10059.

Список литературы

1. Borra E. F., Seddiki O., Angel R., Eisenstein D., Hickson P., Seddon, Kenneth R., Worden S. P., Deposition of metal films on an ionic liquid as a basis for a lunar telescope, *Nature*, 447(7147), 979–981, 2007.
2. Van Susante P.J., Study towards construction and operations of large lunar telescopes, *Advances in Space Research*, 31/11, 2479-2484, 2003.
3. Hamill P., Atmospheric observations from the moon: A lunar earth-observatory, *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, 3719–3722, 2016.
4. Genet R. M., Genet D. R., Talent D. L., Drummond M., Hine B. P., Boyd L. J., Multi-use lunar telescopes// *Robotic telescopes in the 1990s; Proceedings of the Symposium, 103rd Annual Meeting of the Astronomical Society of the Pacific, Univ. of Wyoming, Laramie, June 22-24, (A93-36457 14-89), 289-303, 1991.*

Моделирование кварцевых генераторов для построения хранителя времени и частоты

Петров С. Д.¹, Трофимов Д.А.¹, Чекунов И.В.²

¹СПбГУ, ²МГТУ им Н.Э. Баумана

e-mail: *s.d.petrov@spbu.ru*

Современные средства определения и хранения точного времени и опорной частоты в основном опираются на радиосигналы глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС). С одной стороны это позволяет определять и хранить время и/или опорную частоту с высокой точностью. С другой стороны, спутниковые сигналы недоступны в помещении, а также подвержены средствам радиоэлектронной борьбы, таким образом, создание автономного доступного, но вместе с тем прецизионного, хранителя времени и частоты является актуальной задачей.

Ранее авторами был разработан хранитель на основе трех рубидиевых генераторов с относительной стабильностью не хуже 10^{-12} за сутки, а в данной работе ставится задача построения аналогичного хранителя на основе термостатируемых кварцевых генераторов с относительной стабильностью не хуже 10^{-10} за сутки. Ошибка шкалы времени (ШВ) такого хранителя за сутки не превысит десяти микросекунд, что является удовлетворительным для многих задач. С другой стороны, такой хранитель будет полностью автономным, компактным и доступным, в отличие от более точных атомных стандартов времени и частоты.

Для типового термостатированного кварцевого генератора строится математическая модель его хода, которая включает в себя модель температурных колебаний частоты, модель старения кварца, а также стохастическую модель колебаний. Модель температурных колебаний строится на основе испытаний кварцевого генератора при различных температурах. В силу того, что генератор изначально аппаратно термостатирован, данная зависимость хорошо аппроксимируется полиномиальным сплайном. За основу модели старения взята известная из литературы теория старения кварцевых кристаллов. Что же касается стохастической модели, то она является полностью оригинальной и строится следующим образом. В результаты сличения шкалы времени кварцевого генератора с уже учтенными температурной зависимостью и эффектом старения с опорной от лабораторного атомного стандарта времени и частоты вычисляется структурная функция Колмогорова невязок его ШВ. Структурная функция по сути является обобщением принятой в хронометрии дисперсии Аллана и применима к любому случайному процессу то стационарными приращениями произвольного порядка. Алгоритм вычисления структурной функции позволяет также оценить порядок стационарности исследуемого случайного процесса. Дисперсия Аллана неявно подразумевает то, что данный случайный процесс является процессом со стационарными приращениями первого порядка. Далее по оцененной структурной функции вычисляется обобщенный спектр мощности колебаний генератора, на основе которого строится дискретный фильтр Стратоновича. Полученный фильтр наряду с температурной моделью и моделью старения применяется далее для фильтрации и прогноза ШВ генератора с целью повышения его стабильности. После фильтрации и/или прогноза ШВ трех генераторов осуществляется их группирование и вычисление итоговой групповой шкалы времени хранителя. Группирование также выполняется при помощи оригинального алгоритма, который позволяет в реальном времени отслеживать работоспособность и рабочие характеристики кварцевых генераторов, а также исключать заведомо ложные показания при выходе из строя одного из генераторов.

В результате работы исследован ход нескольких образцов термостатированных кварцевых генераторов разных производителей и для них построены модели температурных вариаций, старения и стохастических вариаций хода. Построен рабочий макет группового хранителя, испытания которого позволяют утверждать, что его относительная стабильность при различных температурах окружающей среды на суточном интервале не превышает 10^{-10} .

Поиск аксиоэлектрического эффекта в атомах ^{83}Kr для солнечных аксионов

А.В.Дербин², Ю.М.Гаврилюк¹, А.М.Гангапшев¹, А.В.Дербин², И.С.Драчев², В.В.Казалов¹, В.В.Кузьминов¹, М.С.Микулич², В.Н.Муратова², Д.А.Текуева¹, Е.В.Унжаков², С.П.Якименко¹

¹Институт ядерных исследований РАН

²ПИЯФ НИЦ КИ

e-mail: *derbin_av@npi.nrcki.ru*

Регистрация аксионов, гипотетических, но очень популярных частиц, основана на эффективных константах связи аксионов с фотонами $g_{A\gamma}$, электронами g_{Ae} и нуклонами g_{AN} . Основными реакциями, предлагаемыми для детектирования, являются конверсия аксионов в фотоны в магнитном поле или поля ядра, распад аксиона на два фотона, комптоновская конверсия и аксиоэлектрический эффект. Аксиоэлектрический эффект (а.э.), который рассматривается в данной работе, является аналогом фотоэффекта для фотонов. В результате реакции а.э. появляется фотоэлектрон и последующее характеристическое рентгеновское излучение атома. Впервые поиск а.э. на атомах кремния был проведен в работе [1]. Сечение а.э. прямо пропорционально сечению фотоэффекта и константе g_{Ae}^2 . Спектр сигналов в детекторе полного поглощения определяется произведением сечения реакции а.э. и спектра регистрируемых аксионов.

В нашей работе мы пытались обнаружить а.э. для солнечных аксионов, возникающих в примакловских, тормозных и комптоновских процессах, а также процессах разрядки и рекомбинации в атомах, в солнечной плазме. Характерная энергия данных аксионов составляет несколько кэВ. Для регистрации, возникающих в результате а.э. электронов и рентгеновского излучения, использовался газовый пропорциональный счетчик, расположенный в низкофоновой установке в Баксанской нейтринной обсерватории. Установка была создана с целью поиска резонансного возбуждения первого ядерного уровня ^{83}Kr солнечными аксионами [2-4], поэтому была заполнена криптоном, обогащенным по изотопу ^{83}Kr до 99%. Энергетическое разрешение 1 кэВ позволяло проводить накопление спектра с порога 4 кэВ. Полная масса криптона в счетчике 58 г, живое время измерений составило 777 суток.

Измеренный спектр подгонялся непрерывной функцией, описывающей фон, гауссовыми пиками с известной энергией и спектром с формой, ожидаемой в результате аксиоэлектрического эффекта. Скорость счета аксионов с энергией E определяется величиной $(g_{A\gamma}^2 A(E) + g_{Ae}^2 B(E) + g_{Ae}^2 C(E))$, где $A(E)$ и $B(E)$ описывают спектры солнечных аксионов, определяемые константами $g_{A\gamma}^2$ и g_{Ae}^2 , соответственно, $g_{Ae}^2 C(E)$ - сечение а.э. В результате подгонки был установлен верхний предел на скорость счета аксионов, который позволил ввести верхние пределы на комбинацию констант $g_{A\gamma}^2$ и g_{Ae}^2 . Ограничения могут быть представлены на двумерном графике с осями $g_{A\gamma}$ и g_{Ae} . В качестве крайних случаев получены новые пределы на константу g_{Ae} при $g_{A\gamma} = 0$ и на произведение констант $g_{A\gamma} g_{Ae}$ без учета спектра солнечных аксионов, связанных с константой g_{Ae} ($B(E) \equiv 0$).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект №22-22-00017.

Список литературы

1. А.В. Дербин, И.С. Драчнев, А.С. Каюнов, В.Н. Муратова, Письма в ЖЭТФ, т.95, вып. 7, с.379 (2012)
2. Ю.М. Гаврилюк и др., Письма в ЖЭТФ, т.101, вып. 10, с.739 (2015)
3. Ю.М. Гаврилюк и др., Письма в ЖЭТФ, том 107, вып. 10, с. 617, (2018)
4. Ю.М. Гаврилюк и др., Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 1, с. 13, (2022)

Штормовая активность в Северной Атлантике и вариации геомагнитного поля за последние 7 тыс. лет. Исследование причинно-следственных связей по Грейнджеру.

Васильев С. С.¹, Дергачев В.А.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: sergey.vasiliev@mail.ioffe.ru

В настоящее время ряд природных явлений в астрофизике и климатологии демонстрируют некоторое сходство, указывающее на существование причинно-следственных связей. Ранее (Vasiliev S.S. and Dergachev V.A., 2020) была выполнена работа, в которой была продемонстрирована высокая корреляция штормовой активности в северной Атлантике и вариаций геомагнитного поля. Однако использование простых статистических инструментов, таких как корреляционный анализ, не дают ответ на вопрос о причинно-следственных связях таких явлений. В настоящее время в мире разработано несколько способов исследования причинно-следственных связей между природными явлениями. К наиболее известным методам следует отнести разработки Грейнджера (Granger, 1969), а также конвергентное перекрестное картирование, разработанное Sugihara et al., (2012) (convergent cross mapping), и метод условной дисперсии (Verbitsky, 2019). В настоящей работе проводится изучение причинно-следственной связей вариаций геомагнитного поля и штормовой активности в северной Атлантике за последние 10 тыс. лет.

Причинность по Грейнджеру.

Как известно, корреляция не обязательно подразумевает причинно-следственную связь, и хотя мы можем измерить степень связи между двумя переменными, то есть корреляцию, сложнее определить, вызывает ли одна переменная другую переменную.

Хотя обычно мы не верим, что настоящее или будущее событие может вызвать прошлое событие, мы верим, что прошлое событие может вызвать настоящее или будущее событие. Это послужило толчком к разработке теста причинности Грейнджера для данных временных рядов, который свидетельствует о том, что переменная x вызывает y . Вопрос о том, действительно ли этот тест демонстрирует причинно-следственную связь, остается открытым, поэтому мы будем использовать фразу « x по Грейнджеру вызывает y » вместо « x вызывает y ».

Как мы покажем, x по Грейнджеру вызывает y , когда предсказание y улучшается за счет включения прошлых значений x .

Тест причинности по Грейнджеру.

Тест основан на следующей регрессионной модели МНК:

$$y_i = \alpha_0 + \sum_{j=1}^m \alpha_j y_{i-j} + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{i-j} + \epsilon_i$$

Здесь α_j и β_j — коэффициенты регрессии, а ϵ_i — ошибка. Тест основан на нулевой гипотезе:

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_m = 0$$

Утверждают, что x по Грейнджеру вызывает y , когда нулевая гипотеза отвергается.

Мы будем использовать обычный F -тест, чтобы определить, существует ли значительная разница между регрессионной моделью, показанной выше (полная модель), и редуцированной моделью, основанной на нулевой гипотезе, без членов β_j (т. е. где все $\beta_j = 0$). Если p -значение для этого теста меньше расчетного значения α , то мы отклоняем нулевую гипотезу и делаем вывод, что x вызывает y (по крайней мере, в смысле причинности по Грейнджеру).

В настоящей работе проводится изучение причинно-следственных связей вариаций геомагнитного поля и штормовой активности в северной Атлантике за последние 10 тыс. лет.

Список литературы

1. Granger, C. W. J. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods. *Econometrica*, 37, 424–438 (1969).
2. Sugihara, G. et al. Detecting causality in complex ecosystems, *Science*, 338, 496–500 (2012).
3. Vasiliev S.S. and Dergachev V.A. The nature of the storm activity in the northwest Atlantic during the Holocene and its possible connection with variations in the Earth's magnetic field. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 1697, # 012010 (2020).
4. Verbitsky, M.Y. et al. Detecting causality signal in instrumental measurements and climate model simulations: global warming case study. *Geosci. Model Dev.*, 12, 4053 (2019).

Создание физической модели Фобоса с использованием данных миссии «MarsExpress»

Колосов Ю. А.¹, Андреев А.О.¹

¹Казанский федеральный университет

e-mail: *valery.suleimanov@gmail.com*

Фобос один из двух естественных спутников Марса самый близкий к планете [1]. При этом Фобос перемещается по орбите на самом близком расстоянии к основному телу, чем все другие планетарные спутники Солнечной системы. Фобос имеет очень низкую отражающую способность с альбедо равным 0,070 и может иметь достаточно рыхлую структуру с тонкой внешней корой. Спутник каждый год приближается к планете на а 2 см в год и в течение 40 миллионов лет или упадет на Марс или трансформируется в планетарное кольцо [2]. Изучению Фобоса уделяется большое внимание в мировой космической практике. Это объясняется тем, что физические параметры Фобоса отличны от подобных параметров остальных естественных спутников планет и Фобос – это последний из подобных естественных спутников, внутри которого возможно обнаружить «останки» процессов, протекающих на этапах зарождения Солнечной системы. Одной из последних космических миссий, имеющих в своей программе исследование Фобоса, стал эксперимент «MarsExpress» [3]. Миссия «MarsExpress» исследует планету Марс и ее научные цели направлены на создание глобальной геологической карты, изучение состава атмосферы и структуры недр планеты и исследование влияния межпланетной среды на атмосферу Марса [4]. Одним из важных экспериментов, выполненных данной миссией, стало картографирование Фобоса с использованием системы дистанционного зондирования (ДЗФ) космического аппарата. С помощью ДЗФ были получены данные более 80% поверхности спутник, а непокрытые ДЗФ области были заполнены данными, полученными миссией «Viking Orbiter». Выполненный в нашей работе анализ данных ДЗФ позволил построить структурную модель Фобоса. Согласно полученным результатам, можно сделать вывод, что рельеф Фобоса весьма неоднозначен. Вся его поверхность покрыта множеством следов от метеоритных ударов – кратерами. Получены параметры для большого ударного кратера спутника – Стикни [6] и его внутреннего кратера Лимтока. Авторы выражают благодарность за поддержку выполненных работ Российскому научному фонду, грант 22-72-10059.

Список литературы

1. Lee S.W., Thomas P., Veverka J., Phobos, Deimos, and the Moon: Size and distribution of crater ejecta blocks, *Icarus*, Vol. 68(1), 77–86, 1986.
2. Pätzold M., Andert T. Jacobson R., Rosenblatt P., Dehant V., Phobos: Observed bulk properties, *Planetary and Space Science*, Vol. 102/1, 86-94, 2014.
3. Murray J. B., Muller J.-P., Neukum G., Werner S.C., van Gasselt S., Hauber E., Markiewicz W. J., Head J.W., Foing B.H., Page D., Evidence from the Mars Express High Resolution Stereo Camera for a frozen sea close to Mars's equator, *Nature*, 434(7031), 2005.
4. Gurnett D.A., Huff R.L., Morgan D.D., Persoon A.M., Averkamp T.F., Kirchner D.L., Duru F., Akalin F., Kopf A.J., Nielsen E., Safaeinili A., Plaut J.J., Picardi G., An overview of radar soundings of the martian ionosphere from the Mars Express spacecraft, *Advances in Space Research*, Vol. 41(9), 1335–1346, 2008.
5. Poulet F., Bibring J.-P., Mustard J. F., Gendrin A., Mangold N., Langevin Y., Arvidson R. E., Gondet B., Gomez C., Berthé M., Phyllosilicates on Mars and implications for early martian climate, *Nature*, 438(7068), 623–627, 2005.
6. Rosenblatt P., Charnoz S., Dunseath K.M.; Terao-Dunseath M., Trinh A., Hyodo R., Genda H., Toupin S. Accretion of Phobos and Deimos in an extended debris disc stirred by transient moons *Nature Geoscience*, Vol. 9, 581–583, 2016.

Генерация позитронов при взаимодействии фотонов космологического фона

Попов А. Н.¹, Барсуков Д. П.¹, Иванчик А. В.¹, Бобашёв С. В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *alexander.popov@mail.ioffe.ru*

Рассматривается взаимодействие фотонов космологического фонового излучения с рождением электрон-позитронных пар. Показано, что основной вклад в рождение пар дает взаимодействие фотонов космологического фонового гамма-излучения с фотонами внегалактического оптического фона, хотя учет взаимодействия фотонов космологического гамма-фона с фотонами внегалактического ультрафиолетового фона может существенно увеличить темп рождения позитронов.

Также мы предполагаем, что образовавшиеся позитроны затем аннигилируют с излучением гамма-квантов с энергией 0.511 МэВ. Учитывается только двух-фотонная аннигиляция позитронов. Образующаяся аннигиляционная линия имеет ширину $\Delta E \sim 100 \div 150$ кэВ с интенсивностью, которая может достигать $10^{-11} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ кэВ}^{-1}$.

Исследование динамики и эволюционных процессов околосолнечных астероидов

Андреев А. О.^{1,2}, Нефедьев Ю.А.¹

¹Казанский федеральный университет

²Казанский государственный энергетический университет

e-mail: *andreev.alexey93@gmail.com*

В настоящее время изучение околосолнечных астероидов получило большое развитие, так как их исследование позволит по-новому понять динамику солнечной активности [1]. Большое значение имеет анализ корональных процессов, так как законченная теория динамики солнечного ветра до сих пор отсутствует. Изучение эволюции околосолнечных метеороидов выполнено с учетом влияния магнитогидродинамических образований солнечной активности. Результаты работы позволят понять физику динамических процессов как солнечной системы, так и, как следствие, эволюцию систем экзопланет. В настоящей работе была создана имитационная модель динамики околосолнечных астероидов (NSA), с перигелийными расстояниями до $q < 0.1$ а.е. Модель включает астрофизические параметры этих объектов, распределение по размеру и их динамическое поведение в пространстве. Цифровая модель NSA предназначена для изучения их динамики и прогнозирования. При построении модели использовались наблюдения наземных и космических систем и динамическое регрессионное адаптивное моделирование [2]. Считалось, что при моделировании динамики дискретных временных рядов часто встречаются такие нарушения схем регрессионного анализа, как высокая степень автокорреляционной зависимости между последующими и предыдущими элементами временного ряда, нелинейность в распределении остатков и др. В связи с этим возникает задача комплексной обработки временных рядов с обязательной проверкой соблюдения условий нормальной схемы Гаусса-Маркова и последующей адаптацией при наличии нарушений. Поэтому для точной обработки и анализа временных рядов используется регрессионное моделирование. Такой подход позволяет повысить адекватность за счет оценки качества построенных моделей по внутренним и внешним показателям качества. Как известно [3], околосолнечные астероиды, согласно наблюдательной селекции, распределены по категориям с высоким и низким альбедо. Последние можно отнести к NSA, имеющим малые размеры и близкие к Солнцу перигелийные расстояния. По этой причине происходит их интенсивное разрушение даже при удалении от Солнца [4]. Этот эффект стал критерием выделения NSA как объектов, которые или находятся, или недавно двигались по орбитам с перигелийными расстояниями $q < 0.1$ а.е. Используя совместный анализ показателей альбедо и орбитальных параметров, появляется возможность исследовать NSA как околосолнечные астероиды [5]. Если имеется ряд долгопериодических наблюдений за изменяемостью параметров, то NSA позволяет строить прогнозные тренды эволюции околосолнечных астероидов. Результаты, полученные в работе, могут найти свое применение для оценки достоверности генетических связей между метеороидами, влияния на эволюцию NSA солнечного излучения [6], изучения инфляционных процессов на поверхности астероидов [7], развития эволюционной теории Солнечной системы и планирования новых космических миссий и наблюдательных технологий. Авторы выражают благодарность за поддержку выполненных работ Российскому научному фонду, грант 22-72-10059.

Список литературы

1. Cheng M.-Y. and Fan J., Peter Hall's contributions to nonparametric function estimation and modeling, *Annals of Statistics*, Vol. 44/5, 1837-1853, 2016.
2. Jewitt D. Properties of near-Sun asteroids, *The Astronomical Journal*, 145:133, 2013.
3. Ishiguro M., et al., Polarimetric properties of the near-Sun asteroid (155140) 2005 UD in comparison with other asteroids and meteoritic samples Get access Arrow, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Vol. 509/3, 4128–4142, 2022.
4. Vokrouhlický D., Nesvorný D., Sun-grazing orbit of the unusual near-Earth object 2004 LG, *Astronomy & Astrophysics*, 541:109, 2012.
5. Mann I., Dust Cloud near the Sun, *Icarus* 146(2):568-582, 2000.
6. Emel'yanenko, V. V. (2017). Near-Sun asteroids. *Solar System Research*, 51(1), 59–63.
7. Tsirovoulis G., Granvik M., Toliou A., SHINeS: Space and High-Irradiance Near-Sun Simulator, *Planetary and Space Science*, Vol. 217, 105490, 2022,

Построение модели лунного ядра с использованием наблюдений лазерной локации Луны

Загидуллин А. А.¹, Петрова Н.К.², Нефедьев Ю.А.¹

¹Казанский федеральный университет

²Казанский государственный энергетический университет

e-mail: *star1955@yandex.ru*

Космические лунные эксперименты обеспечили высокое качество данных о внутренней структуре Луны. В ходе измерения параметров физической либрации методами многолетней лазерной локации Луны удалось определить характеристики лунного ядра: его форму, химический состав [1], построить эмпирические ряды для параметров физической либрации Луны (PhLL), которые обеспечили её аналитическое описание [2]. Спутниковые гравиметрические измерения позволили уточнить значения параметров гравитационного поля, коэффициентов Лява, которые характеризуют вязкоупругие свойства лунного тела [3–4]. Для анализа размеров и сжатия ядра используются наблюдения свободной нутации ядра (FCN): в параметрах вращения Луны с жидким ядром появляются дополнительные моды по причине несовпадения оси вращения ядра с осью вращения мантии. Однако в силу медленного вращения и малых размеров ядра FCN для Луны имеет большой период ~300 лет и малые амплитуды – менее десяти миллисекунд [5–6]. Поэтому выявить эту моду в рядах наблюдений очень трудно. Баркин и др. [7] разработали первую в мире аналитическую теорию для Луны, имеющей жидкое ядро, и сравнили её результаты с эмпирическими рядами [2]. В итоге, в аналитическом решении был выявлен ряд членов, обязанных наличию ядра. Их амплитуда менее 30мс [8]. Мы разработали метод компьютерного моделирования, с помощью которого нам удалось провести сравнение теории с наблюдениями и уточнить размеры и сжатие ядра Луны. Разработанный нами метод компьютерного моделирования сфокусирован на определении параметров свободной нутации лунного ядра и наблюдения звезд с помощью налунного автоматизированного зенит-телескопа [9]. Данный метод не имеет аналогов в мировой астрофизической практике. Во первых, моделирование предполагает решение прямой задачи с применением теории PhLL. Во вторых, решается обратная задача: по «наблюдаемым» координатам программа рассчитывает параметры PhLL. При этом, низкоамплитудные гармоники должны внести свой вклад в значения физической либрации. Если это предположение подтвердится, то можно перейти к решению обратной задачи и оценить каким образом в планируемом эксперименте в PhLL проявится нутация ядра. Процесс моделирования параметров лунного ядра основан на использовании нашей теории PhLL для двухслойной Луны [10]. В процессе моделирования параметров лунного ядра и при сравнении их с результатами вычислений с использованием полуэмпирических рядов определены условия, при которых достигается минимум в остаточных разностях для частот, определенных как гармоники неизвестной природы. Согласно выводам аналитической теории Баркина Ю.В., именно эти гармоники подтверждают наличие жидкого ядра. В результате моделирования получены оптимальные значения для радиуса и сжатия ядра и уточнены значения периода свободных нутаций ядра. Эти данные повысили вероятность обнаружения параметров ядра в наблюдениях PhLL. Как итог в результате исследования нами получена информация о возможности обнаружения в наблюдениях PhLL гармоник, подтверждающих наличие лунного ядра. С помощью моделирования параметров ядра было исследована динамика таких гармоник и определены перспективы планируемых эксперимента с применением лунных телескопов для нахождения параметров свободной нутации ядра и уточнения его характеристик.

Авторы выражают благодарность за поддержку выполненных работ Российскому научному фонду, грант 22-72-10059.

Список литературы

1. Williams J. G., et al., J. Geophys. Res., Lunar rotational dissipation in solid body and molten core, Vol. 106, No. E11, 933 – 968, 2001.
2. Rambaux N., Williams J. G., The Moon's physical librations and determination of their free modes Supplementary file: Tables, Celest Mech Dyn Astr, 109:85–100, 2011.
3. Matsumoto K., et al., An improved lunar gravity field model from SELENE and historical tracking data: Revealing the farside gravity features, J. Geophys. Res., 115, 2010.
4. Goossens S., et al., Dissipation at tidal and seismic frequencies in a melt-free Moon, J. Geod. 85, 205–228, 2011.
5. Williams J. G., et al., Lunar interior properties from the GRAIL mission, J. Geophys. Res. Planets, 119, 1546–1578, 2014.
6. Petrova N., et al., The analytical and numerical approaches to the theory of the Moon's librations: Modern analysis and results, Adv. Space Res., 60, 2303–2313. 2017.
7. Barkin Yu.V., et al., Effects of a physical librations of the moon caused by a liquid core, and determination of the fourth mode of a free libration, Solar Syst. Res., 48, 403, 2014.
8. Petrova N.K., et al., Use of an Analytical Theory for the Physical Libration of the Moon to Detect Free Nutation of the Lunar Core, Astr. Rep., Vol. 62, No. 12, pp. 1021–1025, 2018.
9. Petrova N.K., et al., Lunar-Based Measurements of the Moon's Physical Libration: Methods and Accuracy Estimates, Astr. Rep., Vol. 64, No. 12, 1078–1086, 2020.
10. Zagidullin A.A., et al., Physical Libration of the Moon: An Extended Problem, Astr. Rep. 64, No. 12, 1093–1106, 2020.

Механизмы формирования магнитных полей на большом расстоянии от центра галактик

Хасаева Т. Т.^{1,2}, Михайлов Е. А.^{1,3}

¹МГУ им. М. В. Ломоносова

²ИТПЗ РАН

³ФИАН им П. Н. Лебедева

e-mail: *ea.mikhajlov@physics.msu.ru*

Наличие магнитных полей в значительной части спиральных галактик в настоящий момент надежно подтверждено и практически не вызывает сомнений. Существуют самые различные наблюдательные свидетельства их существования, начиная от характера распространения космических лучей и заканчивая измерениями фарадеевского вращения плоскости поляризации радиоволн. С теоретической точки зрения генерация магнитных полей в галактиках объясняется, как правило, с помощью действия механизма динамо, который связан с характером движений межзвездной среды. Механизм динамо является пороговым, и может действовать лишь при достаточно интенсивном градиенте угловой скорости вращения галактики, который позволяет противодействовать диссипативным эффектам, стремящимся разрушить структуры поля. Как правило, для большого числа галактик данное условие оказывается выполненным [1].

Вместе с тем, большой интерес вызывает проникновение галактического магнитного поля на большие расстояния от центра галактики. Ранее было показано, что порог генерации на расстоянии 10 – 20 кпк от центра не будет превышен. При этом, численные исследования явно показывают, что возникновение магнитного поля в данных областях все же возможно [2]. Это можно объяснить с помощью распространения волн, обусловленных нелинейным характером динамо и наличием диссипативного слагаемого в уравнениях. Не меньшую роль может играть механизм, связанный с магниторотационной неустойчивостью. Данный эффект ранее был предложен для объяснения возбуждения магнитных полей в аккреционных дисках, и возможно ожидать, что он будет иметь не меньшую важность в случае галактических дисков.

В настоящей работе мы провели численное исследование генерации магнитного поля во внешних областях галактик за счет действия механизма динамо. Также мы оценили вклад, который может вносить магниторотационная неустойчивость, исследовали порог генерации для ее возникновения поля, а также получили численно его структуру.

Список литературы

1. Arshakian, T. G., Beck, R.; Krause, M., Sokoloff, D. *Astronomy and Astrophysics*, Volume 494, Issue 1, 2009, pp.21-32
2. Mikhailov, E., Kasparova, A., Moss, D. et al. *Astronomy & Astrophysics*, Volume 568, A66.
3. Shakura, N., Postnov, K., Kolesnikov, D., Lipunova, G. arXiv:2210.15337

Разработка методики анализа изображений для мониторинга зеркал установки TAIGA-IACT

Иванова А. Д.¹, Журов Д. П.^{1,2}

¹Иркутский государственный университет

²Иркутский национальный исследовательский технический университет

e-mail: 2013sasha68@gmail.com

Атмосферные черенковские телескопы (АЧТ) установки TAIGA-IACT [1] входят в состав единого экспериментального комплекса TAIGA [2], расположенного в Тункинской долине (республика Бурятия, Россия), в 50 км от озера Байкал. Комплекс представляет собой гибридную систему детекторов и создается для решения широкого круга фундаментальных задач физики космических лучей и гамма-астрономии методом регистрации широких атмосферных ливней.

В настоящее время на территории комплекса работает 3 АЧТ установки TAIGA-IACT, каждый из которых состоит из сферического сегментированного зеркала в дизайне Девиса-Коттона и регистрирующей камеры. Зеркало содержит 34 сегмента с общей площадью $\sim 10 \text{ м}^2$. Фокусное расстояние телескопа составляет 4.75 м. В фокусе зеркал располагается камера из фотоэлектронных умножителей. АЧТ регистрируют изображение черенковского излучения, генерируемого каскадами релятивистских заряженных частиц, возникающих при взаимодействии гамма-квантов и заряженных космических лучей с ядрами атомов атмосферы. Для получения четкого изображения в камерах АЧТ и последующей оценки параметров зарегистрированных событий особенно важно иметь правильно настроенную оптику телескопа. В связи с этим возникает задача разработки методики мониторинга положения зеркал.

В работе представлено подробное описание разработанной методики, в основе которой лежит метод Боке [3]. Приведены результаты анализа снимков CCD-камеры, установленной на тарелке первого телескопа и используемой для определения положения его зеркал.

Список литературы

1. Zhurov, D., et al. "First results of the tracking system calibration of the TAIGA-IACT telescope." Journal of Physics: Conference Series. Vol. 1181. No. 1. IOP Publishing, 2019.
2. Kuzmichev, L. A., et al. "TAIGA gamma observatory: status and prospects." Physics of Atomic Nuclei 81.4 (2018): 497-507.
3. Ahnen, Max L., et al. "Bokeh mirror alignment for Cherenkov telescopes." Astroparticle Physics 82 (2016): 1-9.

Об излучении рентгеновского пульсара с сильным магнитным полем в случае докритической аккреции: учёт комптоновского рассеяния

Маркозов И. Д.¹, Каминкер А. Д.¹, Потехин А. Ю.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *markozoviv@mail.ru*

Работа посвящена моделированию характеристик излучения докритических рентгеновских пульсаров с сильным магнитным полем. При соударении аккрецирующего вещества с поверхностью нейтронной звезды генерируется излучение в рентгеновском диапазоне, причём давление этого излучения настолько велико, что оно влияет на динамику аккрецирующей плазмы. Поэтому задачи о нахождении характеристик излучения рентгеновского пульсара и гидродинамики падающего вещества должны решаться самосогласованным образом. Расчёты осложняются тем, что сильное магнитное поле искажает амплитуды элементарных процессов взаимодействия излучения и вещества. В данной работе произведено самосогласованное радиационно-гидродинамическое моделирование потока аккрецирующей плазмы на полюса нейтронной звезды. Рассмотрен случай докритических светимостей, учтено комптоновское рассеяние в сильном магнитном поле с сечением, содержащим основной циклотронный резонанс. В таких предположениях получены спектры и поляризация излучения аккреционной колонки.

Переменности кривых блеска гамма-всплесков с известным красным смещением, зарегистрированных в эксперименте Конус-Винд

Иванова В. А.¹, Цветкова А. Е.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *ivanova3.va@yandex.ru*

Гамма-всплески – самые яркие транзиентные источники гамма-излучения во Вселенной, длящиеся от десятков миллисекунд до нескольких часов в диапазоне энергий от десятков кэВ до МэВ и выше. Оценка переменности кривых блеска данных событий может позволить пролить свет на их центральную машину и механизмы излучения. В данной работе переменности гамма-всплесков с известным красным смещением, зарегистрированных в эксперименте Конус-Винд, вычислены по двум методикам (Fenimore 2000 и Reichart 2001). Различие между этими двумя методами заключается в определении временной шкалы сглаживания кривой блеска, коррекции Пуассонова шума и нормировке переменности. Кроме того, наличие тесной корреляции переменности кривой блеска с другими параметрами, включающими красное смещение источника, могло бы позволить использовать гамма-всплески в качестве стандартных свечей. Поэтому была исследована корреляция полученных переменностей с другими параметрами гамма-всплесков в собственной системе отсчёта.

Список литературы

1. Fenimore E. E., Ramirez-Ruiz E. Redshifts For 220 BATSE Gamma-Ray Bursts Determined by Variability and the Cosmological Consequences //arXiv e-prints. IV 2000. astro-ph/0004176.
2. Reichart Daniel E., Lamb Donald Q., Fenimore Edward E., Ramirez-Ruiz Enrico, Cline Thomas L., Hurley Kevin. A Possible Cepheid-like Luminosity Estimator for the Long Gamma-Ray Bursts, *Astrophysical Journal*, том. 552, 1. 57–71, 2001 г.
3. Tsvetkova, A., Frederiks, D., Golenetskii, S., et al., The Konus-Wind Catalog of Gamma-Ray Bursts with Known Redshifts. I. Bursts Detected in the Triggered Mode, *Astrophysical Journal*, 850, 161, 2017г.

Исследование двойного астероида (65803) Didymos, спутник которого подвергся экспериментальному столкновению с аппаратом DART

Петрова С. Н.¹, Девяткин А.В.¹, Горшанов Д.Л.¹, Львов В.Н.¹, Русов С.А.¹

¹ГАО РАН

e-mail: *stalkered@yandex.ru*

Первый в истории эксперимент по изменению траектории движения небесного тела путём физического воздействия состоялся 27 сентября 2022г.: запущенный в ноябре 2021г. аппарат DART (NASA) успешно столкнулся с астероидом Диморф, 160-метровым спутником потенциально опасного 780-метрового астероида (65803) Дидим. Наблюдения данной двойной системы производились в течение двух месяцев после столкновения на телескопе Пулковской обсерватории МТМ-500М, установленном на Горной астрономической станции в горах Северного Кавказа. С помощью программных пакетов ЭПОС и АПЕКС-II была проведена астрометрическая и фотометрическая обработка наблюдательных данных. С целью исследования в рамках программы по уточнению орбит потенциально опасных и сближающихся с Землёй астероидов было проведено моделирование изменения орбиты двойной системы после эксперимента. По предварительным результатам можно сделать вывод, что если подобные кинетические удары проделывать с опасными объектами заранее, то даже малые изменения гелиоцентрической орбиты могут предотвратить возможные столкновения астероидов с Землёй.

Способы измерения температуры реликтового излучения по космологическим данным

Барышников И. А.², Шенявский В.А.¹, Клименко В.В.³, Иванчик А.В.^{2,3}

¹ВШЭ СПб

²СПбПУ

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *ilyandand@gmail.com*

Исследованы методы измерения температуры реликтового излучения T_0 в современную эпоху с использованием космологических данных. На сегодняшний день известны и реализованы два метода: один использует эффект Сюняева-Зельдовича, второй --- анализ заселенностей энергетических уровней атомов и молекул в плотных межзвёздных облаках. В работе предложена и исследована новая процедура в первом методе, отличающаяся от используемой аппроксимирующей функцией и аппроксимирующими параметрами. Работа выполнена с помощью генерации синтетических данных в рамках Λ CDM модели со стандартной зависимостью температуры реликтового излучения T_z от космологического красного смещения z : $T_z = T_0(1 + z)$, где $T_0 = 2.7255\text{К}$. В результате обнаружено, что новая процедура восстанавливает в пределах одного -- двух σ значение $T_0 = 2.7255\text{К}$, в то время как используемая процедура дает смещенную на три σ оценку. Также в работе показано, какие измерения необходимо выполнить, чтобы достичь той точности измерений T_0 , которая определялась не по космологическим данным и является лучшей на сегодняшний день: $T_0 = 2.7255 \pm 0.0006\text{К}$ (Фиксен, 2009). Независимые наблюдения являются чрезвычайно важными для подтверждения или развития стандартной модели, поскольку их расхождения свидетельствуют о возможности выйти за пределы стандартной физики.

Модернизация сцинтилляционных счетчиков установки TAIGA-Muon

Монхоев Р. Д.¹, коллаборация TAIGA
¹НИИПФ ИГУ

e-mail: *makaay08@rambler.ru*

В 2019 г в дополнение к сцинтилляционной установке Tunka-Grande начато строительство сцинтилляционной установки TAIGA-Muon. Оба эксперимента являются частью астрофизического комплекса TAIGA (Tunka Advanced Instrument for cosmic ray physics and Gamma Astronomy), предназначенного для решения широкого круга фундаментальных задач в области физики космических лучей и гамма-астрономии. За период 2019 - 2022 гг на новой установке были проведены тестовые сеансы наблюдений, по результатам которых сфомирован проект модернизации сцинтилляционных счетчиков, конфигурации кластеров и системы сбора данных установки TAIGA-Muon.

В работе приведены описание установки TAIGA-Muon, требования к аппаратно-программному комплексу, результаты тестовых сеансов наблюдений. Также представлены новая конструкция сцинтилляционных счетчиков и методики измерения характеристик детекторов.

Природа гамма-источника 4FGL J2054.2+6904: пульсар в тесной двойной звездной системе типа «redback».

Зюзин Д. А.¹, А. В. Карпова, Ю. А. Шибанов

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *da.zyuzin@gmail.com*

Неотождествленный точечный гамма-источник 4FGL J2054.2+6904, открытый обсерваторией Ферми, был недавно классифицирован как кандидат в пульсары [1]. С помощью обсерватории Swift была проведена его возможная рентгеновская идентификация с источником XRT J205357.8+690519. Мы обнаружили кандидата на оптическое отождествление в каталогах Gaia, Pan-STARRS1 и ZTF с координатами RA = 20:53:58.99 и Dec = +69:05:19.7 и звездными величинами g=20.8, r=20.1, i=19.7, z=19.6 и u=19.4. Точечный оптический источник является переменным с периодом около 7.5 часа. Кривые блеска имеют один широкий пик на период, а их амплитуда составляет примерно 0.5 звездных величин. Распределение энергии по спектру в среднем соответствует звездному спектру с эффективной температурой $T_{\text{eff}}=5820(410)$ К. Мы также обнаружили данный источник в рентгеновском обзоре всего неба, проведенным телескопом SRG/eROSITA. Рентгеновский спектр источника может быть описан степенным законом с фотонным индексом около 1.0 и потоком, исправленным за межзвездное поглощение, в диапазоне 0.5--10 кэВ примерно $1.7e-13$ эрг/(с см²). Согласно полученным нами данным 4FGL J2054.2+6904 является перспективным кандидатом в миллисекундные пульсары в тесной двойной звездной системе типа "redback", в которой сторона маломассивной звезды-компаньона, повернутая к пульсару, нагревается и испаряется пульсарным ветром. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-12-00048, <https://rscf.ru/project/22-12-00048/>.

Список литературы

1. Kerby S., et al., 2021, ApJ, 923, 75

Моделирование сцинтилляционных установок Tunka-Grande и TAIGA-Muon

Терновой М. Ю.¹, от коллаборации TAIGA
¹НИИПФ ИГУ

e-mail: *markakarat@yandex.ru*

Сцинтилляционные установки Tunka-Grande и TAIGA-Muon входят в состав экспериментального комплекса TAIGA (Tunka Advanced Instrument for cosmic ray physics and Gamma Astronomy), расположенного в Тункинской долине (Республика Бурятия, Россия). Установки предназначена для изучения энергетического спектра и массового состава заряженных космических лучей, а также поиска диффузных гамма-квантов в диапазоне энергий 100 ТэВ - 1000 ПэВ путем регистрации электрон-фотонной и мюонной компонент широких атмосферных ливней.

В докладе представлены результаты компьютерного моделирования сцинтилляционных установок на основе программных пакетов CORSIKA и Geant4. Представлен метод, разработанный для оптимизации процесса моделирования. Также обсуждаются подходы для определения массового состава заряженных космических лучей в диапазоне энергий 100 ТэВ – 1000 ПэВ

Программа поиска и изучения экзопланет в ГАО РАН и CAO РАН. Обнаружение маломассивного транзитного бурого карлика GPX-1b.

Соков Е. Н.¹, Валявин Г.², Аитов В.², Бурданов А.³, Сокова И.¹, Benni P.⁴, Балувев Р.⁵

¹ГАО РАН

²CAO РАН

³Massachusetts Institute of Technology, USA

⁴Acton Sky Portal (Private Observatory), Acton, MA, USA

⁵СПбГУ

e-mail: jenias06@gmail.com

В течение последних десяти лет в Пулковской Обсерватории (ГАО РАН), а также Специальной Астрофизической Обсерватории (CAO РАН), активно развивается программа поиска новых экзопланет, тёмных спутников двойных звёздных систем и изучения уже открытых. Для их изучения в самом начале пути применялся фактически единственный доступный метод исследования - фотометрический. Располагая техникой фотометрического анализа были изучены фотометрические особенности нескольких известных экзопланет, предсказаны кандидаты в новые экзопланеты. Долгое время для успешной проверки и дальнейшего подтверждения экзопланетной природы обнаруженных кандидатов не хватало поддержки методов высокоточной спектроскопии и методов астрономии высокого разрешения (спекл-интерферометрии).

Постепенно появился внушительный по своему составу международный фотометрический проект "EXPANSION (EXoPlanetary trANsit Search with an International Observational Network)"; проект астронома-любителя Paul Benni поиска экзопланет у звёзд, располагающихся вдоль Галактической плоскости, "Galactic Plane Exoplanet (GPX)"; новый спектрограф высокого разрешения, установленный на БТА CAO РАН; масштабный проект CAO РАН и Корейского Института Астрономии и Космической Науки "EXPLANATION (EXoPLANet And Transient events InvestigatiON)" (Valyavin, G. ; Beskin, G.; Sokov E.; et al., 2022); подключились к исследованиям экзопланет также и спекл-интерферометрические исследования (CAO РАН).

Увеличение различных методов исследований экзопланет, объединение институтов и обсерваторий, а также вовлечение большего числа инструментов и телескопов, позволило более эффективно развить и улучшить исследования экзопланет в ГАО РАН и CAO РАН.

В докладе будет представлено обнаружение маломассивного ($9.7 \pm 1.6 M_{\text{Jup}}$) горячего бурого карлика GPX-1b с радиусом $1.47 \pm 0.10 R_{\text{Jup}}$ (Benni, P.; Burdanov, A. Y.; Sokov E. N.; et al., 2021), экзопланеты TOI-1408b, звёздного спутника широкой звёздной пары ADS 15571 и другие кандидаты в экзопланеты, обнаруженные проектами EXPLANATION, EXPANSION и космическим телескопом TESS.

Список литературы

1. Valyavin, G., Beskin, G., Sokov E., et al., EXPLANATION: Exoplanet and Transient Events Investigation Project, Astrophysical Bulletin, Volume 77, Issue 4, p.495-508, 2022;
2. Benni, P., Burdanov, A. Y., Sokov E. N., et al., Discovery of a young low-mass brown dwarf transiting a fast-rotating F-type star by the Galactic Plane eXoplanet (GPX) survey, MNRAS, Volume 505, Issue 4, pp.4956-4967, 2021.

Математическое моделирование распространения света в гравитационном поле группы астрофизических объектов

Лукьянцев Д.С.¹, Афанасьев Н.Т.¹, Танаев А.Б.¹,

¹ИГУ

e-mail: *spacemaklay@gmail.com*

Как известно, при распространении света в гравитационном поле возникает явление рефракции, приводящее к изменениям направления распространения, групповой задержки и энергетических характеристик оптических волн [1-3]. В поле тяготения, образованном несколькими астрофизическими объектами или их ассоциациями, может сформироваться сложная пространственная структура света с образованием областей многолучевости и фокусировки. В этих условиях обращение пространственной структуры светового поля можно использовать для восстановления свойств и характеристик объектов тяготения. С другой стороны, учет линзирования оптических волн в гравитационном поле группы объектов позволит более корректно ответить на вопрос о мощности энерговыделения непосредственно самого источника света. Расчет характеристик оптических волн в гравитационном поле возможен в приближении геометрической оптики путем введения эффективного показателя преломления вакуума. Однако получить аналитическое решение можно лишь для простых моделей показателя преломления вакуума, погруженного в гравитационное поле одиночного объекта. Для группы объектов целесообразно использовать численное моделирование характеристик распространения света. Такой задачей, в частности, является расчет излучения квазаров, прошедшего группу галактик.

В настоящей работе предложен трехмерный алгоритм совместного расчета направления распространения, групповой задержки и пространственного ослабления потока энергии оптических волн в гравитационном поле группы астрофизических объектов. В основу алгоритма положена система лучевых дифференциальных уравнений в форме Эйлера. Тестирование алгоритма проведено для простых моделей эффективного показателя преломления вакуума. Результаты численного моделирования показали, что конфигурация гравитационного поля от нескольких астрофизических объектов формирует сложную пространственную структуру светового поля. Для наглядности эта структура отображалась в картинной плоскости наблюдателя, где отмечены точки прихода световых лучей на фиксированное расстояние. Для сравнения рассчитывалось распределение точек прихода лучей в картинную плоскость в евклидовом пространстве. Показано, что в условиях сложного гравитационного поля в локальных областях картинной плоскости наблюдателя формируются группы точек прихода оптических лучей с малой скважностью. Этот эффект связан с гравитационным линзированием света. Проведен расчет пространственной расходимости светового поля на основе численного интегрирования расширенной системы лучевых уравнений. Сделана оценка энергетики поля путем суммирования удельных энергетических порций лучей, приходящих в картинную плоскость наблюдателя. Проведено сравнение результатов волнового и парциального моделирования распространения света в поле тяготения. Рассмотрена возможность приближенной геометрооптической оценки светового поля в области гравитационной фокусировки.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проекты FZZE-2020-0024, FZZE-2023-0004, соглашение № 075-15-2021-675).

Список литературы

1. Фок В. А. Теория пространства, времени и тяготения. - М.:, 1961. - 563 с.
2. Блюх П. В., Минаков А. А. Гравитационные линзы. - Киев: Наукова Думка, 1989. - 240 с.
3. Захаров А. Ф. Гравитационные линзы и микролинзы. - М.:Янус-К, 1997. - 328 с.

Регистрация звёздных прохождений посредством КМОП-камеры в реальном времени.

Толстой А. Л.¹, Петров С.Д.¹, Смирнов С.С.¹, Трофимов Д.А.¹

¹СПбГУ

e-mail: *st063510@student.spbu.ru*

Высокоточные определения прямых восхождений звезд, долгот пунктов, а также Всемирного времени традиционно осуществлялись посредством регистрации кульминаций звезд на пассажном инструменте. Изначально регистрация прохождений звезд через меридиан инструмента выполнялась наблюдателем вручную, пока в сороковых годах прошлого века не была внедрена фотоэлектрическая регистрация звездных прохождений, что позволило на порядок увеличить точность наблюдений. В девяностых годах в определении Всемирного времени пассажный инструмент вытеснила более точная Радиоинтерферометрия со сверхдлинными базами (РСДБ). Однако, во-первых, наблюдениям РСДБ доступны лишь внегалактические радиоисточники, а не звезды, а во-вторых, инфраструктура РСДБ существенно сложнее и дороже компактных пассажных инструментов. Вместе с тем, учитывая современное развитие фотоэлектроники, можно ожидать, что модернизация пассажного инструмента с учетом последних достижений фотоэлектронных и вычислительных технологий позволит существенно повысить точность регистрации звездных кульминаций, которая удовлетворит современные запросы астрометрии, геодезии и хронометрии.

За основу разработки взят пассажный инструмент кафедры астрономии Санкт-Петербургского государственного университета (СПбГУ) Bamberg, а также астрономическая КМОП-камера ZWO ASI-120MM-S. КМОП-технология для фоточувствительного элемента была выбрана в первую очередь потому, что, в отличие от ПЗС, в принципе позволяет реализовать регистрацию момента засветки звездным изображением каждого пикселя в реальном масштабе времени с детерминированной задержкой. Целью работы было, во-первых, измерить временные задержки регистрации моментов засветки пикселей при различных режимах работы матрицы и времени экспонирования. Также необходимо было разработать алгоритм фильтрации цифровых шумов, обеспечивающий надежную идентификацию каждой звезды в поле зрения и, наконец, алгоритм нахождения центра яркости звездного изображения в кадре.

Первая задача была решена лишь частично, а именно удалось лишь измерить задержки регистрации полного кадра, тогда как технология активных КМОП-матриц в принципе позволяет регистрировать избранные прямоугольные области в пределах кадра. Работа в этом направлении будет продолжена, но уже сейчас можно утверждать, что задержки регистрации моментов засветки при различных режимах работы камеры ведут себя предсказуемо в пределах десятков микросекунд. Для фильтрации цифровых шумов был разработан полностью оригинальный алгоритм, который показал достаточную эффективность в рамках поставленной задачи, а также оказался пригодным для фильтрации изображений любых движущихся точечных объектов в кадре. За основу алгоритма нахождения центра яркости был взят стандартный алгоритм, разработанный для ПЗС-матриц на основе аппроксимирующей функции.

В итоге разработаны алгоритмы и программное обеспечение для регистрации звездных прохождений на пассажном инструменте, оснащенном КМОП-матрицей. Результаты первых наблюдений позволяют утверждать, что прямые восхождения звезд, долготы пунктов, а также Всемирное время могут определяться с точностью не хуже одной миллисекунды времени, что

точнее классической фотоэлектрической регистрации, но хуже, чем в РСДБ. Однако, во-первых, несовершенство разработанных алгоритмов свидетельствует о том, что метод обладает большим точностным потенциалом, который предполагается реализовать путем дальнейшей доработки выбранных алгоритмов, а во-вторых, миллисекундная точность регистрации является вполне удовлетворительной для большинства задач. Также следует учитывать, что в отличие от инфраструктуры РСДБ пассажирский инструмент является дешевым, компактным и мобильным средством определения Всемирного времени.

Состояние вещества в двух молодых ударных кратерах Луны по материалам орбитальной съемки высокого разрешения

Шпекин М. И.¹, Феррейра Р.Т.², Архипова А.А.¹,

¹КФУ

²Национальный университет Кордовы, Аргентина

e-mail: *MichaelSI@yandex.ru*

В 2009 году, сразу после начала публикации орбитальных снимков КК «Аполлон-15,-16,-17» мы обнаружили «вулкано-подобное образование» на днище кратера Циолковский [1,2]. Этот объект был обнаружен на снимках метрической камеры КК «Аполлон-17», выполненных на последнем 74 витке орбиты с высоты около 120 км при низком положении Солнца над лунным горизонтом. На этих же снимках отчетливо изобразилось проседание грунта в виде кольца диаметров 24-26 км. При этом вышеназванный «вулкано-подобный объект» оказался почти в самом центре упомянутого кольца [3]. Съемка сверхвысокого разрешения, выполненная панорамной камерой с борта тех же трех кораблей, убедительно подтвердила наличие «вулкана». Съемка с борта современной станции LRO с разрешением до полуметра также подтвердила наличие «вулкана». Более того, на снимках сверхвысокого разрешения удастся рассмотреть строение материала выбросов вулкана, а также многочисленные валуны радиально разбросанные в направлении от центра головной части «вулкана». Любопытно отметить, что ни в одном другом лунном кратере ранее таких образований не удавалось обнаружить. Авторы первой публикации по вновь открытым объектам в кратере Циолковский выдвинули предположение, что под днищем кратера образовалась «магматическая камера», которая существует по сей день. А свидетельства ее наличия мы сегодня наблюдаем на орбитальных снимках в виде «плюма» и кольца [4]. Наличие материала выбросов, которые направлены в сторону центральной горки кратера, представляет на редкость удобную возможность для забора проб грунта. Данное обстоятельство послужило авторам публикации [5] веским основанием рассматривать окрестности «вулкана» на днище кратера Циолковский в качестве посадочной площадки предстоящих экспедиций.

Другой молодой лунный кратер, диаметр которого немного уступает кратеру Циолковский, также расположен на обратной стороне Луны. Это кратер Эйткен (173E, 17S, D=120 км). Селенографическое положение кратера Эйткен прямо указывает на его уникальное положение. Он расположен прямо на краю гигантской низменности, которая представляет собой центральную часть ударного бассейна «Южный полюс – Эйткен» (ЮПЭ). Ранее мы уже обследовали кратер Эйткен, обратив внимание на редкое сочетание элементов рельефа в этом кратере. В частности на днище кратера имеются изолированные горные вершины, что нехарактерно для Луны в целом. К западу от центральной горки кратера наблюдаются детали днища с аномальным альбедо. Восточная часть кратера содержит так называемые «луковичные поля», а также лавовые трубки в районах, примыкающих к внутренним склонам вала кратера. Однако, самым интересным оказался «ледниково-подобный язык», выползающий из юго-западного склона центральной горки Эйткена на его днище. Авторам публикации [6] впервые удалось построить 3D-модель центральной горки кратера Эйткен, которая позволила рассмотреть строение «ледниково-подобного языка» с разных сторон в высоком разрешении. В докладе рассмотрено строение кратера Эйткен и вклад разных этапов процесса кратерообразования на формирование элементов его рельефа [6,7 RTF].

Список литературы

1. Shpekin M. I. Kazan, Russia (ASTROKAZAN-2009), pp. 219-21, 2009.
2. Shpekin M. I., Barenbaum A. A. Mater-s of 17th All-Russ. Sci. Conf. of Physics Stud-s and Young Sci-sts (VNKSF-17), Yekat-burg, pp. 476-7, 2011.
3. M. I. Shpekin, C. R. Mukhametshin, A. A. Semenov and R. R. Salimov. IEEE Xplore, pp. 1-6, doi: 10.1109/ITNT55410.2022.9848595,2022.
4. Кулешова К.А., Фазлетдинова Р.Ю., Шпекин. Доклад на 19 молод. конф. «Фундам. и прикл. космич. иссл.». <https://www.youtube.com/watch?v=fkTlwoPM4FE&list=LHCBGdx6NxTvstRHD9fu-4nBbUiq5ZKjA&index=5&t=11071s>, 2022.
5. Ferreyra R. T., Shpekin M. I. (EOS-2019) Book of Abstracts, Moscow & Chernogolovka & Nalchik, March 1-6, 397 pages. ISBN 978-5-6040595-9-3, 2019.
6. Ferreyra R. T., Shpekin M. I. A likely dynamical balance for complex crater formation XXXV Intern. Conf. (EOS-2020) 14p. (in print).

Оптические исследования компаньона миллисекундного пульсара типа «redback» J1908+2105

Бероня Д. М.¹, А. Ю. Кириченко^{1, 2}, С. В. Жариков², А. В. Карпова¹, Д. А. Зюзин¹, Ю. А. Шибанов¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Universidad Nacional Autónoma de México

e-mail: *daria.beronya@gmail.com*

Миллисекундный радио- и гамма-пульсар J1908+2105, имеющий период вращения 2.56 мс, находится в двойной звездной системе с орбитальным периодом 3.5 часа [1, 2]. Предполагается, что система относится к классу "redback", в котором область звезды-компаньона, обращенная к пульсару, нагревается и испаряется пульсарным ветром. Возможный компаньон J1908+2105 был обнаружен в каталоге Gaia, где его величина $G = 20.8$ [3].

С целью подтверждения компаньона и определения параметров системы нами был проведен ряд фотометрических наблюдений источника в фильтрах BVRI, разрешенных по орбитальной фазе, на 2.1-метровом телескопе OAN-SPM в Мексике в 2018–2022 годах. Была обнаружена переменность блеска с периодом 3.52 часа, который согласуется с орбитальным периодом J1908+2105, что подтверждает ассоциацию с пульсаром. Звездные величины источника составили $B = 23.2$, $V = 21.5$, $R = 20.6$ и $I = 19.6$, а амплитуды переменности блеска – примерно 0.2–0.3 величины.

Для определения спектрального класса компаньона по нашей заявке были проведены оптические спектральные наблюдения на 10-метровом Большом Канарском телескопе. Полученные спектры типичны для звезд спектрального класса K-M.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00921, <https://rscf.ru/project/22-22-00921/>.

Список литературы

1. Cromartie H. T., et al., 2016, ApJ, 819, 34
2. Deneva J. S., et al., 2021, ApJ, 909, 6
3. Strader J., et al., 2019, ApJ, 872, 42

Гипотетическая центробежная черная дыра (черный обруч)

Барышников Ю. С.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *iulianbaryshnikov@yandex.ru*

Известно, что центробежные силы (силы инерции) выступают аналогом гравитации. Тогда с гипотетической точки зрения возможен такой объект, как центробежная черная дыра. То есть световой сигнал пущенный с периферии вращения такой "черной дыры" (или точнее черного обруча) никак не сможет прийти в центр из-за создаваемых центробежными силами ускорений при любой массе вращаемого предмета, при этом в центре такого вращения никаких эффектов черные дыры не будет.

Зная радиус Шварцшильда и массу тела можно получить ускорение свободного падения для обыкновенной черной дыры, а вращательное ускорение можно получить из известной формулы $\omega^2 R$, то есть можно подобрать такое ω и R (угловую скорость и радиус вращения массы на периферии) для условной центробежной дыры, которое численно бы давало равнозначное соотношение с ускорением свободного падения для обыкновенной черной дыры. То есть допустим ускорение свободного падения у обыкновенной черной дыры $10^{13} m/s^2$ [1], допустим с помощью вращения можно получить центробежное ускорение такой же величины $10^{13} m/s^2$ станет ли этот объект на периферии вращения черной дырой для наблюдателя из центра? Если одним из ключевых факторов для существования черной дыры является её величина ускорения свободного падения, то центробежной черной дыре гипотетически имеет место быть, то что центробежное ускорение будет численно равнозначно ускорению свободного падения обыкновенной черной дыры в этом случае.

Список литературы

1. Новиков И.Д., Фролов В.П. Физика черных дыр. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986, 328 с.

Биофизика

Экспериментальное изучение миграции моноцитов с помощью разработанного микрожидкостного устройства

Рахимов А. А.^{1,2}, Валиев А. А.^{1,2}, Данилко К.В.², Ахметов А.Т.¹

¹Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН

²Башкирский государственный медицинский университет

e-mail: *ragar83@mail.ru*

В работе представлены экспериментальные результаты изучения миграции моноцитов через узкие микроканалы при взаимодействии с хемоаттрактантом. Моноциты – белые кровяные клетки, разновидность лейкоцитов, они поедают проникающие в организм микробы и бактерии и таким образом избавляются от них. Для изучения активного перемещения клеток методом мягкой фотолитографии изготовлена и адаптирована для экспериментов с моноцитами двухуровневая микрожидкостная миграционная система, прототипами которой являлись ячейки в работах [1,2]. Она состоит из двух подводящих жидкость каналов, двух камер («градиентной» и «накопительной») высотой 50 мкм, сообщающихся через «миграционные» каналы высотой 10 мкм (шириной 10, 15, 25 и 50 мкм), и цилиндрических отверстий в полидиметилсилоксане глубиной 5 мм и диаметром 3 мм, диаметр выходного отверстия равен 6 мм. К «градиентной» камере ячейки гидростатическими насосами подавались растворы хемоаттрактанта и питательная среда. За счет диффузии формируется градиент концентрации хемоаттрактанта перпендикулярный направлению течения, стимулирующий движение клеток, расположенных в «накопительной» камере. Двухуровневая ячейка изготавливалась с помощью 2 масок. На одной маске «миграционные каналы» высотой 10 мкм различной ширины, а на другой маске подводящие каналы с градиентной и накопительной камерами высотой 50 мкм. Для изготовления маски был разработан векторный рисунок для распечатывания на принтере высокого разрешения. Используемый в прошлых экспериментах рисунок маски миграционной камеры [2] был несколько изменен. Особенностью модели является два подводящих хемоаттрактант и питательную среду канала шириной 50 мкм (вместо трех шириной 33 мкм) для уменьшения погрешностей изготовления каналов, уменьшения влияния пузырьков и уменьшения вероятности возникновения эффекта динамического запираания [3]. Были добавлены плавные переходы-расширения отверстий. В накопительной камере было сделано расширение-емкость для задержки клеток. Для удобства совмещения масок были нанесены метки, хорошо видимые под микроскопом. В качестве хемоаттрактанта для моноцитов использовали среду, конденсированную клетками рака предстательной железы (РПЖ) андрогеннезависимой линии РС3 или андрогензависимой линии LNCaP. Для регистрации движения клеток проводилась покадровая съемка клеток в течении 20 часов с интервалом 5 минут. Серия полученных изображений использовалась для наблюдения за перемещением клеток в микроканалах. Сравнение миграции моноцитов у здоровых людей и пациентов с РПЖ показало, что наибольшее количество мигрировавших клеток у моноцитов здорового человека и клетками LNCaP. Средняя скорость миграции к линии LNCaP (37 мкм/ч) выше, чем к линии РС-3 (12 мкм/ч). Средние скорости миграции моноцитов пациентов с РПЖ и здоровых людей практически не отличались. Полученный результат показывает, что у здоровых людей моноцитов, реагирующих на угрозу, больше. Разработка микрожидкостных устройств для наблюдения за миграцией клеток является важным шагом на пути улучшения диагностики и терапии онкологических заболеваний.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-25-00531, <https://rscf.ru/project/22-25-00531/>.

Список литературы

1. Tong Z., Balzer E. M., Dallas M. R., Hung W., Stebe K. J., Konstantopoulos K. 2012. Chemotaxis of Cell Populations through Confined Spaces at Single-Cell Resolution. *PLoS ONE* 7(1) e29211. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0029211>.
2. Рахимов А.А., Ахметов А.Т., Валиев А.А., Данилко К.В., Саметов С.П., Хисматуллин Д.Б. К вопросу о механизме клеточной миграции // Многофазные системы. 2019. Т. 14, № 1. С. 17–26. <https://doi.org/10.21662/mfs2019.1.003>.
3. Рахимов А.А., Ахметов А.Т. Экспериментальные исследования гидродинамических эффектов при течении обратных водоуглеводородных эмульсий в микроканалах // Труды Института механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН. 2016. Т. 11, № 1. С. 30–37. <https://doi.org/10.21662/uim2016.1.006>.

Разработка интеллектуальной системы дистанционного биомониторинга частоты сердечных сокращений

Данишевский Н. С.¹, Буданов Д.О.¹, Зайцева А.Ю.²,

¹СПбПУ

²ИАП

e-mail: *danishevskiy.ns@gmail.com*

Дистанционная фотоплетизмография[1] представляет собой бесконтактный метод отслеживания пульса человека. На практике для получения фотоплетизмографического сигнала используют видеозображение исследуемого участка тела человека. Далее анализируется изменение цвета кожи относительно некоторого постоянного значения. Отсутствие необходимости в применении нательных датчиков, бесконтактность приводит к высокой степени интеграции данной методики в быт человека, что позволяет чаще и эффективнее контролировать состояние, например, работников на производстве. В связи с этим разработка системы дистанционного биомониторинга, осуществляющей измерение частоты сердечных сокращений является перспективным направлением исследования.

Данная работа посвящена разработке программной части системы дистанционного биомониторинга. Этапы работы системы включают в себя: детектирование лица человека на видеоизображении; поиск регионов интереса, по которым будет определяться пульс; анализ измеряемого сигнала, в котором зашифрована частота сердечных сокращений. Реализация каждого этапа обработки видеоизображения возможна как классическими математическими методами, так и с помощью методов машинного обучения [2]. По результатам проведения архивного поиска были выделены наиболее перспективные методы, позволяющие разработать данную систему. Был разработан алгоритм, осуществляющий измерение частоты сердечных сокращений. Были оценены время, необходимое для одного цикла измерения; требования при аппаратной реализации; точность работы как отдельных этапов, так и всего алгоритма в целом.

Список литературы

1. A. Dasari, S.K.A. Prakash, L.A. Jeni, C.S. Tucker “Evaluation of biases in remote photoplethysmography methods” in *npj Digital Medicine*, vol. 4, no. 4, pp. 1-13, 2021.
2. C. Zhao, H. Wang, H. Chen, W. Shi and Y. Feng, “JAMSNet: A Remote Pulse Extraction Network Based on Joint Attention and Multi-Scale Fusion,” in *IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology*, pp.1-15, Dec 2022.

Оценка уровня кислорода при фотодинамических процессах

Ишемгулов А. Т.¹, Легута С.Н.¹

¹Оренбургский государственный университет

e-mail: azamat.ischemgulov@yandex.ru

Фотодинамическое действие, основанное на окислении субстрата химически активным синглетным кислородом (СК), широко применяется в терапии различных опухолей [1]. Эффективность фотодинамической терапии зависит от содержания кислорода в тканях в течение всего сеанса лечения. Для динамического мониторинга уровня кислорода и поддержания его оптимальной концентрации в тканях, предлагается использовать замедленную флуоресценцию (ЗФ), возникающую при аннигиляции СК с триплет-возбуждённым сенсбилизатором (ЗФ, обусловленная синглет-триплетной аннигиляцией или СТА-ЗФ). В [2] показано, что по изменению интенсивности следования возбуждающих импульсов, можно оценивать содержание свободного кислорода в тканях. Изменение кинетики затухания СТА-ЗФ молекул-сенсбилизаторов (органических красителей) наблюдалось экспериментально в злокачественных и здоровых тканях мышей линии BYRB [3] *in vitro*. В качестве сенсбилизаторов использовались ксантеновые красители. При импульсно-периодическом возбуждении наблюдалось тушение СТА-ЗФ, если частота следования возбуждающих импульсов превышала 1 Гц. Процесс тушения обратимый: если лазерное воздействие прекращалось, интенсивность СТА-ЗФ восстанавливалась до первоначального значения. Тушение СТА-ЗФ обусловлено тем, что скорость связывания кислорода с субстратом в результате фотохимических реакций превышает скорость поступления кислорода в ткань извне. Величина тушения определяется интенсивностью потребления кислорода, что можно использовать как индикатор фотодинамического действия. Измеряя время восстановления исходной интенсивности СТА-ЗФ можно оценить скорость поступления свободного кислорода в ткань. Мы полагаем, что предложенная методика будет полезна для контроля количества кислорода в тканях и повышения эффективности фотодинамической терапии.

Наноконтейнеры для интраназального введения лекарственных средств на основе пористого кремния

Шишкина Д. А.¹, Журавлева М.А.¹, Полуэктова Н.А.¹, Заколпина А.Н.¹, Кулагина С.Ю.¹

¹Самарский университет

e-mail: *daria.lizunkova@yandex.ru*

Исследование таргетной доставки лекарственных средств в последнее время является крайне актуальным направлением. В связи с этим у специалистов в области биологии и медицины особый интерес вызывает возможность применения нанокремниевых контейнеров для направленной доставки различных веществ. Благодаря использованию таких контейнеров, возможно осуществить не только локальную доставку, но и увеличить биодоступность, что существенно повысит качество методики по сравнению с традиционными способами инкапсулирования. Использование наноконтейнеров является перспективным методом в решении таких сложных задач, как минимизация токсических проявлений веществ, а также увеличение количества препарата непосредственно в области очага заболевания [1].

Нанокремниевые контейнеры получают путем электрохимического травления кремния в спиртовых растворах плавиковой кислоты. Меняя состав травителя, время анодизации, плотность тока, можно получить различную морфологию поверхности пористого кремния. От перечисленных факторов, в первую очередь, зависит параметр пористости, который является одним из основных при создании наноконтейнеров. Загрузка лекарств в данном случае может происходить методом ипрегнации или иммерсии.

Благодаря способности пористого кремния к биодegradации в физиологическом окружении со скоростью растворения, зависящей от кислотности раствора, морфологии и пористости частиц, а также от химической природы их исходной поверхности, его можно использовать для диагностики и лечения широкого спектра заболеваний. Кроме использования нанокремниевых контейнеров перорально, внутримышечно или непосредственно покрытием раневой поверхности, достаточно интересным и новым является интраназальный способ введения таких структур. Из-за того, что в нанокремниевые контейнеры можно инкапсулировать различные вещества, интраназальная доставка дает возможность быстрого проникновения лекарств непосредственно в головной мозг в значительной концентрации вдоль обонятельных и тройничных нервов, минуя гематоэнцефалический барьер. При этом вводимое вещество практически не попадет в кровоток.

Экспериментальная методика интраназального введения позволяет централизованно воздействовать на головной мозг, исключая периферические эффекты, возникающие при системном введении. При интраназальном способе можно получить фармакологический эффект уже через 15 мин после введения, что существенно меньше чем при других способах. Помимо этого в нанокремниевые контейнеры с интраназальным способом доставки можно инкапсулировать нейропептиды, которые при обычных способах введения разрушаются ферментами желудочно-кишечного тракта (далее-ЖКТ)[2].

Неинвазивный способ введения также имеет ряд преимуществ. Так как существенным недостатком интраназального введения лекарственных средств, может служить их быстрое вымывание из носовой полости, применение нанопористого кремния может помочь решить эту проблему. Увеличение мукоадгезивных свойств является одной из главных задач методики

применения нанопористых контейнеров при интраназальной доставке. Благодаря хорошей биodeградируемости и биобезопасности нанокремниевых контейнеров их применение обоснованно и целесообразно. Биобезопасность нанокремниевых контейнеров определяется продуктом распада пористого кремния-ортокремниевой кислотой. Данный продукт легко всасывается в ЖКТ и впоследствии выводится через мочевыделительную систему[3].

Список литературы

1. Ксенофонтова О.И. и др. Пористый кремний и его применение в биологии и медицине. Журнал технической физики. 2014. том 84. вып. 1.
2. Порфирьева Н.Н., Семина И.И., Мустафин Р.И., Хуторянский В.В. Интраназальное введение как способ доставки лекарств в головной мозг (обзор). Разработка и регистрация лекарственных средств. 2021;10(4):117-127. <https://doi.org/10.33380/2305-2066-2021-10-4-117-127>
3. Yoshida, T., Yoshioka, Y., Tochigi, S. et al. Intranasal exposure to amorphous nanosilica particles could activate intrinsic coagulation cascade and platelets in mice. Part Fibre Toxicol 10, 41 (2013). <https://doi.org/10.1186/1743-8977-10-41>.

Применение методов машинного обучения в поиске статистических паттернов для диагностики обсессивно-компульсивного расстройства

Юнусов В. А.¹, Демин С.А.¹

¹КФУ

e-mail: *valentin.yunusov@gmail.com*

Определение диагностических критериев патологических изменений в функционировании мозга человека, например при неврологических заболеваниях и психиатрических расстройствах, является важной проблемой современных наук о данных и биофизики. Одним из распространенных психических отклонений является обсессивно-компульсивное расстройство (ОКР). Для ОКР характерно наличие obsessions и compulsions. Obsessions – навязчивые, повторяющиеся и неприятные мысли, побуждения, вызывающие тревогу. Compulsions – повторяющиеся действия или умственные ритуалы, которые выполняются для уменьшения стресса, вызванного obsessions.

Для определения диагностических критериев данного заболевания в настоящее время широко используются методы статистической физики для анализа сигналов электроэнцефалограмм (ЭЭГ) и/или магнитоэнцефалограмм (МЭГ), и другие [1, 2]. Фиксация большого числа экспериментальных данных о функциональной активности мозга человека способствовал активному развитию методов машинного обучения для решения нейрофизиологических и биофизических задач [3–5].

В настоящей работе представлены результаты анализа сигналов ЭЭГ для двух групп испытуемых: 15 испытуемых, у которых значительно проявлялись признаки обсессивно-компульсивных расстройств, и 15 человек, у которых эти признаки проявлялись незначительно (условно – контрольная группа). Экспериментальные данные были получены в ходе международного взаимодействия. ЭЭГ-записи фиксировались при трех условиях: фаза чтения, фаза визуализации и фаза подавления. Первая фаза – испытуемые повторяли определенное предложение вслух с описанием некоторого события, используя в нем имя друга или члена семьи. Вторая фаза – участники исследования визуализировали сказанное ими событие в течение 1 минуты. Третья фаза – в течение 1 минуты испытуемые должны были думать о чем угодно, кроме этого события. После каждого условия участники заполняли опрос о степени тревоги, вины, оценки вероятности происхождения названного события и стремлении его предотвратить. В ходе фиксации биоэлектрической активности электроды располагались в соответствии с расширенной международной схемой размещения «10-20 %» [6].

Проводимое нами исследование включало два этапа. На первом этапе для каждой записи ЭЭГ был рассчитан набор статистических показателей: параметры Хьорта (активность, сложность и мобильность), мощность α -, β -, θ - и δ -активности коры головного мозга, анализ колебаний без тренда (DFA), фрактальная размерность Хигучи, сложность Лемпеля-Зива, фрактальная размерность Петросяна и выборочная энтропия. Для полученных параметров и персональных характеристик посредством 11 методов машинного обучения, реализованных в программном пакете Weka [7], осуществлялся отбор характерных признаков. С их помощью решалась задача классификации ЭЭГ-записей испытуемых по группам: с низкой и высокой степенью проявления

симптомов ОКР. Максимальная точность достигалась методом Random Forest, что составило около 84%.

На втором этапе методами отбора признаков CfsSubsetEval и WrapperSubsetEval определялись характеристики, которые вносили наиболее значимый вклад в классификацию. Отбор подмножеств значимых признаков выполнялся для повышения точности классификаторов. Для метода CfsSubsetEval такое подмножество включало в себя фрактальную размерность Хигучи, активность Хьюрта в лобной доле мозга человека и мощность δ -активности в затылочной доле. Для метода WrapperSubsetEval в искомое подмножество вошли активность Хьюрта и выборочная энтропия в теменной доле. После отбора признаков точность классификации возросла и превысила 87% для метода Random Forest.

В дальнейшем применение методов машинного обучения с подкреплением методами отбора признаков при статистической обработке сигналов биоэлектрической активности мозга человека будет способствовать автоматизированному поиску диагностических критериев психиатрических расстройств, нейродегенеративных и неврологических заболеваний, а также повышению точности и ускорению постановки диагнозов.

Список литературы

1. Demin S.A. Statistical quantifiers of memory for an analysis of human brain and neuro-system diseases / S.A. Demin, R.M. Yulmetyev, O.Yu. Panishev, P. Hänggi // *Physica A*. – 2008. – V. 387. – P. 2100–2110.
2. Yunusov V.A. The search for statistical patterns of pathological activity in human EEG signals in focal epilepsy / V.A. Yunusov, S.A. Demin, O. Yu. Panishev, N.Y. Demina // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2021. – V. 2103 (1). – P. 012044.
3. Hilbert, K. Identifying CBT non-response among OCD outpatients: A machine-learning approach / K. Hilbert, T. Jacobi, S. Kunas, B. Elsner, B. Reuter, U. Leuken, N. Kathmann // *Psychotherapy Research*. – 2020. – V. 31. – P. 1–11.
4. Ferreri, F. How New Technologies Can Improve Prediction, Assessment, and Intervention in Obsessive-Compulsive Disorder (e-OCD): Review / F. Ferreri, A. Bourla, CS Peretti, T. Segawa, N. Jaafari, S. Mouchabac // *Journal of Medical Internet Research*. – 2019. – V. 6. – P. 11643.
5. Hoexter, M. Predicting obsessive-compulsive disorder severity combining neuroimaging and machine learning methods / M. Hoexter, E. Miguel, J. Diniz, R. Shavitt, G. Busatto, J. Sato // *Journal of Affective Disorders*. – 2013. – V. 150 (3). – P. 1213–1216.
6. Jones, R. Alpha activity in the insula accompanies the urge to neutralize in sub-clinical obsessive-compulsive participants / R. Jones, J. Bhattacharya // *Journal of Behavioral Addictions*. – V. 1. – P. 96–105.
7. Hall, M. The WEKA data mining software: an update / M. Hall, E. Frank, G. Holmes, B. Pfahringer // *ACM SIGKDD Explorations Newsletter*. – 2008. – V. 11. – P. 10–18.

ФШС-параметризация эффектов синхронизации в сигналах биоэлектрической активности мозга испытуемых с разной степенью риска проявления психиатрических расстройств

Демин С. А.¹, Юнусов В.А.¹, Панищев О.Ю.¹, Тимашев С.Ф.²

¹КФУ, ²НИЯУ МИФИ

e-mail: *serge_demin@mail.ru*

Объективная диагностика психиатрических расстройств, прежде всего, шизофрении на ранних стадиях развития затруднена из-за отсутствия инструментальных методов фиксации таких патологий, хотя связь такого рода расстройств с неизбежными изменениями в активности отдельных участков коры головного мозга очевидна [1-4]. Поэтому представляется естественным связывать возможности диагностики такого рода патологий с анализом электроэнцефалограмм (ЭЭГ) или магнитоэнцефалограмм (МЭГ), отражающих функциональную активность пространственно разнесенных участков коры головного мозга пациентов. Тем более, что проводимые в этой области исследования свидетельствуют о перспективности подобных подходов [5].

Несомненную информационную значимость для диагностики психиатрических патологий представляет собой установление определенных соотношений между характерными частотами и фазами возбуждений различных участков коры головного мозга (определенных ансамблей нейронов), поскольку определенный уровень частотно-фазовой синхронизации, выявляемый при анализе одновременно фиксируемых ЭЭГ или МЭГ сигналов, является необходимым условием функционирования мозга как целостной системы [6-9].

В настоящей работе для выявления объективной информации, содержащейся в сигналах ЭЭГ испытуемых с разным уровнем риска проявления заболеваний шизофренического спектра на различных отведениях, применяется общий феноменологический подход – фликкер-шумовая спектроскопия (ФШС) [10-12]. В качестве экспериментальных данных использовались клинические ЭЭГ сигналы с 16 электродов, полученные в Научном центре психического здоровья РАМН с целью выяснения признаков проявления шизофрении у 84 детей/подростков 11-14 лет на основе их ЭЭГ [5, 13]. Предварительно на основе стандартной методики – беседы врача с пациентом – все дети/подростки были отнесены к двум группам: условно здоровые и условно больные в зависимости от риска проявления заболеваний шизофренического спектра в будущем. Поиск диагностических критериев осуществлялся на основе получения прямой информации о степени частотно-фазовой синхронизации сигналов, продуцируемых участками коры головного мозга, локализованными в лобной доле (электроды F_3-F_4). Для проверки рабочей гипотезы о подавлении частотно-фазовой синхронизации в функциональной активности фронтальных областей коры головного мозга при заболеваниях шизофренического спектра были отобраны два ФШС-параметра, один параметр определял "глубину" синхронизации, а второй – меру воздействия высокочастотного "шума", разрушающего синхронизацию. В результате статистического анализа ЭЭГ-сигналов испытуемых были выделены 4 группы с повышением риска развития шизофрении в будущем. При сопоставлении полученного разбиения с результатами медицинского диагностирования в Научном центре психического здоровья РАМН, при условии, что две группы с наименьшим риском развития патологии могут быть отнесены к группе «здоровые», а две группы с наибольшим риском развития патологии – к группе «больные», расхождения в оценках составили около 20%.

В связи с расширением полученной информации, необходимой для отнесения детей/подростков к разным группам "риска" развития психиатрических расстройств в будущем [14], на основе достигнутых результатов в настоящем исследовании была предложена методология построения автоматизированных процедур распознавания определенных типов закономерностей, ориентированных на использование в клинической практике для повышения объективности диагнозов, в последующем с применением моделей машинного обучения.

Список литературы

1. Rissling A.J., Makeig S., Braff D.L., Light G.A., Neurophysiologic markers of abnormal brain activity in schizophrenia, *Curr. Psychiatry Rep.*, V. 12(6), 572-578, 2010.
2. John J.P., Fronto-temporal dysfunction in schizophrenia: A selective review, *Indian J. Psychiatry*, V. 51(3), 180-190, 2009.
3. Başar E., Güntekin B., A review of brain oscillations in cognitive disorders and the role of neurotransmitters, *Brain Res.*, V. 1235, 172-193, 2008.
4. Uhlhaas P.J., Haenschel C., Nikolić D., Singer W., The role of oscillations and synchrony in cortical networks and their putative relevance for the pathophysiology of schizophrenia, *Schizophr. Bull.*, V. 34(5), 927-943, 2008.
5. Kaplan A. Ya., Borisov S.V., Zheligovskii V.A., Classification of the adolescent EEG by the spectral and segmental characteristics for normals and patients with schizophrenia-spectrum disorders, *I.P. Pavlov Journal of Higher Nervous Activity*, V. 55, 478-486, 2005.
6. Rosenblum M.G., Pikovsky A.S., Kurths J., Phase synchronization of chaotic oscillators, *Phys. Rev. Lett.*, V. 76, 1804-1807, 1996.
7. Singer W., Synchronization of cortical activity and its putative role in information processing and learning, *Ann. Rev. Physiol.*, V. 55, 349-374, 1993.
8. Varela F., Lachaux J.-P., Rodriguez E., Martinerie J., The brainweb: Phase synchronization and large-scale integration, *Nat. Rev. Neurosci.*, V. 2, 229-239, 2001.
9. Ward L.M., MacLean S.E., Kirschner A., Stochastic resonance modulates neural synchronization within and between cortical sources, *PLoS ONE*, V. 5, e14371, 2010.
10. Timashev S.F., Polyakov Yu.S., Review of flicker noise spectroscopy in electrochemistry, *Fluct. Noise Lett.*, V. 7, R15-R47, 2007.
11. Timashev S.F., Polyakov Yu.S., Yulmetyev R.M., Demin S.A., Panishev O.Yu., Shimojo S., Bhattacharya J., Frequency and phase synchronization in neuromagnetic cortical responses to flickering color stimuli, *Las. Phys.*, V. 20, 604-617, 2010.
12. Timashev S.F., Polyakov Yu.S., Misurkin P.I., Lakeev S.G., Anomalous diffusion as a stochastic component in the dynamics of complex processes, *Phys. Rev. E*, V. 81, 041128-1-17, 2010.
13. Borisov S.V., Kaplan A. Ya., Gorbachevskaya N.L., Kozlova I.A., Segmental structure of the EEG alpha activity in adolescents with schizophrenia-spectrum disorders, *I.P. Pavlov Journal of Higher Nervous Activity*, V. 55, 329-335, 2005.
14. Timashev S. F., Panishev O.Yu., Polyakov Yu.S., Demin S.A., Kaplan A.Ya., Analysis of cross-correlations in electroencephalogram signals as an approach to proactive diagnosis of schizophrenia, *Physica A*, V. 391(4), 1179-1194, 2012.

Изучение суспензий нанокompозита пористого кремния и гидроксиапатита, полученные методом лазерной абляции и механически

Кулагина С. Ю.¹, Латухина Н.В.¹, Суюндукова Д.Р.¹

¹Самарский университет

e-mail: *kulagina4@ya.ru*

В данной работе исследовался нанокompозит пористого кремния (ПК) с гидроксиапатитом (ГАП) как основа перспективного биоматериала для остеопластики, поскольку ГАП является минеральной фазой костной ткани, а кремний способствует более быстрому и прочному формированию кости [1]. Следовательно, использование ПК с ГАП вместе даст наиболее эффективный результат.

Пористый кремний получали из пластин р-типа монокристаллического кремния с помощью анодного электрохимического травления в ячейке вертикального типа в растворе $\text{HF}:\text{H}_2\text{O}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ в течение 15 минут при плотности тока 10 ма/см² [2]. В качестве электродов выступал графит.

Для получения нанокompозита por-Si с ГАП пористый кремний насыщали раствором ГАП в воде общей массой 1 г 154 мг + 26 мг.

Порошок нанокompозита ПК+ГАП изготавливался двумя способами: путем механического отделения слоя пористого кремния от подложки и его последующим измельчением и методом лазерной абляции [3].

Недостатком механического метода является загрязнение порошка материалом мелющих тел, длительность процесса и большая энергоёмкость[4]. Механическим способом были получены крупные частицы размерами около 10-15 мкм. Большая часть частиц данного размера и лишь малая часть имеет размеры 1-3 мкм. Они имеют неправильную форму, явно видна пористая структура изначального образца. Поверхность пор имеет рыхлую структуру из-за большого количества пор. Высота частиц составляет более 1 мкм.

Для сравнения нанокompозит ПК+ГAp был изготовлен методом лазерной абляции пористого слоя. С помощью импульсного волоконного лазера с источником Raucus 20W с показателями скорость 20 мм/с, частота 25 кгц, мощность 80% в воде снимался верхний слой кремния с образцов.

Частицы порошка, полученные методом лазерной абляции, имеют более округлую форму. Во время абляции из крупных пор частицы гидроксиапатита вылетают из крупных пор. Они объединяются друг с другом в шаровые скопления. При этом в маленьких порах ГАП сохраняется. Размеры частиц после абляции намного меньше размеров механического порошка. Крупные скопления имеют размер 2-10 мкм. Большую часть порошка составляют маленькие частицы размером 0.27-0.53 мкм и меньше. Высота отдельных частиц равна 100-200 нм.

С помощью метода рентгеновского энергодисперсионного микроанализа можно выяснить химическое строение молекул различных органических веществ, а также выявить примеси в изучаемом образце. Качественный анализ позволяет судить о природе вещества, а количестве

вещества – количественный анализ[5]. ИК-спектры были сняты на «ФСМ 2201» с помощью приставки диффузного отражения.

Наличие гидроксипатита в порах кремния подтвердили исследования порошка на растровом электронном микроскопе с использованием спектрофотометра. Кремний присутствует в больших количествах. Порошок также состоит из кислорода, кальция и углерода, которые являются составными частями гидроксипатита. Это подтверждает наличие ГАП в порах кремния.

Список литературы

1. Ксенофонтова О.И., Васин А.В., Пористый кремний и его применение в биологии и медицине, Журнал технической физики, 2014, том 84(1), 67-78 стр.
2. G. Korotcenkov, B. K. Cho, "Silicon porosity: State of the art," Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 2010, vol. 35.3, pp. 153–260.
3. Иногамов Н. А., Петров Ю. В., Лазерная абляция: физические представления и приложения (обзор), Теплофизика высоких температур, 2020, №4 том 58, 689-706 стр.
4. Кочегаров И.И., Трусов В.А., Обзор методик получения нанопорошков, 2010, том 2, 426-428 стр.
5. Васильев А. В., Гриненко Е. В., Инфракрасная спектроскопия органических и природных соединений, Учебное пособие. Спб.: СПбГЛТА, 2007, 54 с.

Исследование медицинских свойств контейнеров на основе кремниевых наноструктур с помощью рамановской спектроскопии

Полужктова Н. А.¹, Шишкина Д.А.¹, Заколпина А.Н.¹, Артемьев Д.Н.¹

¹Самарский университет

e-mail: natapolivekt37@gmail.com

В адресной доставке лекарств используются наночастицы – носители, размер которых не должен быть более одного микрона. Системы доставки создаются путем помещения лекарственных средств (ЛС) либо в нанокapsулу, в которой лекарство находится в полости, окруженной проницаемой мембраной, либо в наносферу, в которой лекарство диспергировано по всему объему. Существенным преимуществом таких систем доставки является защита активных ЛС от распада и метаболизма. Системы лекарственного транспорта, на основе данной технологии, осуществляются с помощью пористых материалов и нанонитей.

В настоящее время, в медицине, для лечения таких заболеваний, как раковые опухоли, сахарный диабет и др. широко применяются кремниевые наночастицы. Это возможно благодаря некоторым свойствам кремния [1]. Он является одним из микроэлементов, участвующих в обмене веществ. Кроме того, кремнию присуща биodeградируемость – способность растворяться в водных средах. Следовательно, после выполнения своей задачи кремниевые наночастицы выводятся из организма естественным путем.

Таким образом, наночастицы кремния находят применение в качестве сенсibilизаторов и наноконтейнеров. Частицы, используемые в качестве сенсibilизаторов, позволяют диагностировать опухоли на ранних стадиях. Наноконтейнерами, как правило, служит пористый кремний, однако некоторые исследования предполагают, что в качестве таковых могут выступать нанонити. К преимуществам кремниевых наноконтейнеров перед стандартными средствами доставки лекарств можно отнести возможность одновременной загрузки гидрофобного и гидрофильного лекарства, высокую степень загрузки, контроль высвобождения лекарства выбранным способом изготовления, простое и легкое изготовление и др. [2].

В данной работе изучается возможность использования пористого кремния и нанонитей в качестве наноконтейнеров для адресной доставки лекарств. С помощью спектроскопии комбинационного рассеяния или рамановской спектроскопии изучался элементный состав наноконтейнеров.

Пористый кремний создавался путем электрохимического травления в вертикальной ячейке в растворе плавиковой кислоты и спирта в соотношении 1:1 в течение 15 минут при плотности тока 15 mA/cm^2 [3]. Кремниевые нанонити были получены путем металл стимулированного химического травления в течение 40 минут в растворе плавиковой кислоты и перекиси водорода в процентном соотношении 1:10 [4].

Далее были подготовлены образцы для исследования методом рамановской спектроскопии. Они представляют собой порошок из наноконтейнеров без лекарства, порошок из наноконтейнеров с загруженным лекарством и порошок самого лекарства, в роли которого выступает цефтриаксон - антибиотик цефалоспоринового ряда широкого спектра действия.

Часть пластин с пористым кремнием и нанонитями были помещены в водный раствор с цефтриаксоном для введения лекарства в наноконтейнеры. После этого пластины высушивались на фильтровальной бумаге. Затем, с пластин с лекарством и без соскабливался наноструктурный слой, с помощью скальпеля.

Анализ спектров показал наличие в порошке пористого кремния линий цефтриаксона.

Таким образом, в данной работе представлено исследование медицинских свойств кремниевых наночастиц, используемых в качестве наноконтейнеров для адресной доставки лекарств. Были получены спектры порошков лекарства, наноконтейнеров и наноконтейнеров с лекарством с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния.

Список литературы

1. Зеленков В. Н., Потапов В. В. Биологическая активность соединений кремния. Часть 1. Природные и синтетические кремнийсодержащие соединения. Медико-биологические аспекты (обзор литературы) // Вестник РАЕН. – 2016. – Т. 16. – №. 2. – С. 3-12.
2. Ксенофонтова О.И., Васин А.В., Егоров В.В. Пористый кремний и его применение в биологии и медицине // Журнал технической физики. Том 84. Выпуск 1. – 2014.
3. Пористый кремний: технология, свойства, применение: моногр. / В.В. Трегулов ; Ряз. гос. ун-т им. С.А. Есенина. – Рязань, 2011. – 124 с.
4. Павликов А. В., Рахимова О. В., Кашкаров П. К. Антиотражающие слои для солнечных элементов на основе кремниевых нанонитей, полученных на легированной подложке // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2018. – №. 2. – С. 77-82.

Оптимизация процесса лизиса для проточного выделения нуклеиновых кислот

Зайцева М. В.¹, Антифеев И.Е.¹, Петров Д.Г.¹, Есикова Н.А.¹.

¹ИАП РАН

e-mail: *marishkask.mz@mail.ru*

Одним из основных этапов молекулярной диагностики является этап пробоподготовки [1], в частности, выделение нуклеиновых кислот (НК), от качества которого зависит результат всего анализа [2, 3]. Важная характеристика пробоподготовки – быстродействие, поэтому сокращение времени без потери качества выделения является ключевой задачей [4, 5]. Первоначальным и необходимым процессом на этапе выделения НК является лизис клеток, содержащихся в образце. На сегодняшний день существует множество способов разрушения клеточных стенок и мембран, однако среди них можно выделить метод химического лизиса, который обеспечивает высокую эффективность процесса при сравнительно небольших временных и финансовых затратах [6].

В рамках данной работы изучалось влияние параметров температуры и времени химического лизиса на результаты выделения ДНК *E. coli*. Бактерии *E. coli* культивировали в стандартной среде Lysogeny broth (LB) при +37 °С в течение 18 часов, концентрацию бактерий определяли с помощью измерения оптической плотности OD600 на спектрофотометре Implen, в качестве бланка использовалась среда LB. За рабочую концентрацию бактериальной суспензии принимали $3,7 \pm 0,3 \times 10^8$ кл/мл, в качестве отрицательного контроля выделения использовалась дистиллированная вода. Оценка эффективности выделения проводилась методом полимеразной цепной реакции в реальном времени (ПЦР-РВ). ПЦР-РВ проводили с помощью амплификатора нуклеиновых кислот АНК-48 (ООО "Синтол").

В рамках данной работы были определены и обработаны значения пороговых циклов (Ct) исследуемых проб, полученных путем выделения ДНК из бактерий *E. coli* при разных параметрах химического лизиса: времени лизиса (5, 7, 9, 11, 13 и 15 минут) и температуре (45 °С, 55 °С, 65 °С и 75 °С). Для каждого параметра времени и температуры определены значения эффективности выделения НК в 10 повторах. По результатам экспериментальной работы была показана возможность изменения температуры для процесса лизиса клеток на 30% от рекомендуемых условий (15 минут 65 °С) без влияния на эффективность выделения НК. Показана возможность сокращения времени лизиса без потери эффективности на 40% в сравнении с рекомендованными условиями.

Список литературы

1. Karlikow M, Pardee K. The Many Roads to an Ideal Paper-based Device. Paper-based Diagnostics. 2018 Dec 11 : 171–201. DOI: 10.1007/978-3-319-96870-4_6
2. Rahman MM, Elaissari A. Nucleic acid sample preparation for in vitro molecular diagnosis: from conventional techniques to biotechnology. Drug Discov Today. 2012 Nov;17(21-22):1199-207. doi: 10.1016/j.drudis.2012.07.001. Epub 2012 Jul 20. PMID: 22819926
3. Петров Д.Г., Макарова Е.Д., Корнева Н.А., Альдекеева А.С., Князьков Н.Н. Воздействие полей разной природы на выход ДНК при выделении из модельных растворов на двуокиси кремния. 1. Влияние температуры. ISSN 0868-5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2015, том 25, № 2, с. 91-101
4. Agarwal A, Kumar C, Goel R. Rapid extraction of DNA from diverse soils by guanidine thiocyanate method. Indian J Exp Biol. 2001 Sep;39(9):906-10. PMID: 11831374

5. Thatcher S.A. DNA/RNA Preparation for molecular detection // Clin. Chem. 2015. Vol. 61, no. 1. P. 89–99. DOI: 10.1373/clinchem.2014.221374
6. Shehadul Islam M, Aryasomayajula A, Selvaganapathy PR. A Review on Macroscale and Microscale Cell Lysis Methods. Micromachines (Basel). 2017 Mar 8;8(3):83. doi: 10.3390/mi8030083. PMID: PMC6190294

Исследование инсулин-продуцирующих клеток RIN m5F с помощью микроэлектродного импедансного цитосенсора

Абелит А. А.¹, Бойцова Н.А.¹, Ступин Д.Д.¹

¹СПБАУ РАН

e-mail: *anna.abelit@gmail.com*

Сегодня биосенсорные технологии не только находят широкое применение в науке и технике, но и занимают важную нишу в практической медицине. Большие успехи в данном направлении были достигнуты в области создания импедансных цитосенсоров [1-3], в которых биологический сигнал от клеток с помощью измерения их импеданса напрямую преобразуется в электрический сигнал, что обеспечивает простую, но, в то же время, мощную интеграцию между сложными биологическими одно- и многоклеточными системами и современной высокоразвитой электроникой. При этом в последнее время большой интерес вызывает разработка проблемно-ориентированных цитосенсоров, в основе работы которых используется специфическое поведение специальным образом подобранных клеток, за счет чего достигается значительное расширение функционала подобных биосенсорных систем.

В данной работе предложена база для создания проблемно-ориентированных цитосенсоров на основе клеток инсулиномы крысы RIN-m5F - перспективного кандидата на роль биоэлектронного датчика на глюкозу. Нами был разработан протокол прободготовки данной клеточной линии для ее изучения с помощью мультиэлектродных матриц (МЭМ) и электрической импедансной спектроскопии (ЭИС), а также определена оптимальная конфигурация электродов МЭМ, которая позволила детально изучить важные для биосенсорных приложений адгезионные свойства клеток RIN-m5F. В частности, зарегистрированные в данном исследовании временные зависимости импедансных спектров покрытых клетками RIN-m5F микроэлектродов позволили обнаружить квазипериодическое движение данного типа клеток при ослаблении их адгезии с помощью раствора трипсин-Версена. Данное явление может быть объяснено с помощью несложных физических моделей, что открывает путь для создания ЭИС-цитосенсоров, реагирующих на изменение механических и морфологических свойств клеток RIN-m5F.

Полученные в данной работе результаты можно использовать для создания проблемно-ориентированных цитосенсоров на основе клеток данной клеточной линии, что открывает новые перспективы в области изучения, диагностики и терапии сахарного диабета, панкреатита и других заболеваний поджелудочной железы. Поэтому можно смело надеяться, что результаты данной работы позволят решить ряд актуальных задач здравоохранения и практической цитологии.

Список литературы

1. Barsoukov, Evgenij. Impedance spectroscopy: theory, experiment, and applications. — John Wiley & Sons, 2018.
2. Stupin DD, Kuzina EA, Abelit AA, Emelyanov AK, Nikolaev DM, Ryazantsev MN, Koniakhin SV, Dubina MV. Bioimpedance spectroscopy: Basics and applications. ACS Biomaterials Science & Engineering. 2021 Mar 22;7(6):1962-86.
3. Wegener J, Keese CR, Giaever I. Electric cell–substrate impedance sensing (ECIS) as a noninvasive means to monitor the kinetics of cell spreading to artificial surfaces. Experimental cell research. 2000 Aug 25;259(1):158-66.

Исследование динамических взаимосвязей в индуцированных сигналах биомагнитной активности головного мозга человека на основе формализма функций памяти

Аверкиев Д. Э.¹, Демин С.А.¹, Панищев О.Ю.¹

¹КФУ

e-mail: *aver263@gmail.com*

В настоящее время неинвазивная регистрация нейронной активности в исследованиях функций головного мозга человека, прежде всего, обработки сенсорной информации, поступающей от органов чувств, является наиболее предпочтительной. Среди методов такой регистрации можно отметить электроэнцефалографию (ЭЭГ) и магнитоэнцефалографию (МЭГ) [1]. Известно, что внешние воздействия, например свет, способны оказывать существенное влияние на ритмическую активность мозга человека. Ранее в исследовании МЭГ-сигналов была установлена более высокая активность коры головного мозга в α -диапазоне в ответ на воздействие синего света, чем зеленого [2]. В другой работе [3] в ходе анализа ЭЭГ-сигналов была установлена более высокая активность α -активности в лобной и теменной области при воздействии красного стимула по сравнению с синим. Важно отметить, что степень влияния зависит не только от цвета светового стимула, но и от способа воздействия, например, периодичности. В работе [4] авторам удалось установить влияние мерцания света с определенной частотой на активность в затылочной, а также других областях коры головного мозга у здоровых испытуемых.

Цель настоящего исследования заключается в изучении динамических взаимосвязей в сигналах биомагнитной активности головного мозга человека, фиксируемых сверхпроводящими квантовыми интерференционными датчиками (СКВИДами), и индуцированных различными мерцающими комбинациями света: красно-синей, красно-зеленой, сине-зеленой. Экспериментальные данные активности мозга были получены в ходе международного сотрудничества [5]. В исследовании принимало участие 9 здоровых испытуемых. Анализ биомедицинских данных – МЭГ-сигналов проводился в рамках авторского подхода – формализма функций памяти (ФФП). ФФП основан на конечно-разностном аналоге кинетических уравнений Цванцига-Мори [6]. Они связывают нормированную кросскорреляционную функцию (ККФ) с функциями статистической памяти. Выполнить анализ эффектов согласования/рассогласования МЭГ-сигналов позволяют спектры мощности соответствующих ККФ и функций памяти. Изучая их, можно установить ритмическую активность мозга человека в различных областях, а также получить информацию о том, как меняется пространственно-временная структура сигнала при изменении стимула. С помощью частотно-зависящего параметра немарковости количественно оцениваются эффекты памяти в исследуемом временном сигнале. Большие значения данного параметра на нулевой частоте говорит о кратковременной памяти в исследуемой динамике. Малые значения указывают на наличие немарковских эффектов с проявлением сильной статистической памяти.

Как результат проведен анализ эффектов синхронизации и статистической памяти в нейромагнитных откликах разных областей коры головного мозга группы здоровых испытуемых. Изучены спектры мощности ККФ и функций памяти при различных световых комбинациях, в том числе при переходе от одного цветового сочетания к другому, установлены области коры головного мозга с наиболее существенной ответной реакцией. Проведен анализ

фазовых портретов – пространственных карт, составленных для магнитоэнцефалограмм, а также количественная оценка эффектов статистической памяти в одновременно фиксируемых сигналах.

Результаты исследования динамических взаимосвязей в индуцированных сигналах биомагнитной активности головного мозга человека, вследствие обработки визуальной информации, на основе формализма функций памяти будут представлять интерес для ученых, специализирующихся в области биофизики, нейрофизиологии, когнитивной психологии. В дальнейшем их можно связать с исследованиями внешних воздействий на другие функции мозга человека, такие как принятие решений, координация, эмоции, внимание, память.

Список литературы

1. Beppi, C. EEG, MEG and neuromodulatory approaches to explore cognition: Current status and future directions / C. Beppi, G. Scott, S. Sandrone // *Brain and Cognition*. – 2021. – V. 148. – P. 105677.
2. Okamoto, Y. Effects of light wavelength on MEG ERD/ERS during a working memory task / Y. Okamoto // *International Journal of Psychophysiology*. – 2016. – V. 104. – P. 10-16.
3. Yoto, A. Effects of object color stimuli on human brain activities in perception and attention referred to EEG alpha band response / A. Yoto, T. Katsuura, Y. Shimomura // *Journal of Physiological Anthropology*. – 2007. – V. 26 (3). – P. 373-379.
4. Zhang, Y. 40 Hz Light flicker alters human brain electroencephalography microstates and complexity implicated in brain diseases / Y. Zhang, Z. Zhang, L. Lei, H. Tong, F. Chen, S.T. Hou // *Frontiers in Neuroscience*. – 2021. – V. 15. – P. 777183.
5. Bhattacharya, J. Nonlinear dynamics of evoked neuromagnetic responses signifies potential defensive mechanisms against photosensitivity / J. Bhattacharya, K. Watanabe, S. Shimojo // *International Journal of Bifurcation and Chaos*. – 2004. – V. 14(8). – P. 2701–2720.
6. Panishev, O.Y. Cross-correlation markers in stochastic dynamics of complex systems / O.Y. Panishev, S.A. Demin, J. Bhattacharya // *Physica A*. – 2010. – V. 389. – P. 4958–4969.

Локальная атомная структура ионов Zn^{2+} в дополнительных центрах связывания молекулы гемоглобина: теоретический анализ спектров XANES

Кременная М. А.¹, Пронина Е.В.¹, Лысенко В.Ю.¹, Яловега Г.Э.¹

¹ЮФУ

e-mail: *kremennaya@sfn.edu.ru*

При нарушении обменных процессов в организме одними из эндогенных токсикантов становятся физиологические продукты обмена в повышенных дозах, например мочевины и мочевая кислота. Под воздействием таких неблагоприятных факторов наблюдается кумуляция переходных металлов на биоорганических макромолекулах, что приводит к нарушению пространственной структуры белка и последующему образованию нефункциональных структур со сниженной активностью [1].

Новые возможности для изучения механизмов нарушений функций белковых молекул при патологических состояниях открывают модельные эксперименты на отдельных белковых молекулах в условиях, воспроизводящих действие эндогенных факторов в организме. В работах [2,3] были показаны возможности спектроскопии XANES в геометрии полного внешнего окружения для исследования белковых пленок на поверхности жидкости. Экспериментально было обнаружено существенное усиление способности гемоглобина связывать ионы металлов (цинка и железа) в присутствии слабого раствора мочевины, а анализ экспериментальных спектров XANES методом «отпечатка пальца» позволил предположить дополнительные центры связывания ионов железа и цинка в структуре молекулы гемоглобина.

Более точную информацию позволяет получить теоретический анализ экспериментальных спектров XANES - определить локальную структуру окружения дополнительных центров связывания ионов металлов, включая вид аминокислотных остатков, их геометрическое расположение.

В данной работе ряд возможных структурных моделей дополнительных центров связывания ионов Fe и Zn в молекуле гемоглобина был построен на основе данных Protein Data Bank (PDB). Из структурных данных были выделены кластеры содержащие наиболее вероятные аминокислоты в окружении ионов цинка, например цистеины, гистидины, глутамины и аспарагиновая кислота. Для полученных моделей были рассчитаны спектры рентгеновского поглощения XANES для K-края цинка методом конечных разностей и сопоставлены с экспериментальными данными.

Сопоставление теоретических и экспериментальных спектров поглощения для различных структурных моделей показало чувствительность данного метода к изменениям межатомных расстояний и углов связи лигандного окружения ионов цинка и железа. Была проведена вероятностная оценка локального окружения в дополнительных центрах связывания ионов этих металлов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 19-29-12052 мк.

Список литературы

1. Gomes, Cláudio M. (2019). Biophysical and Spectroscopic Methods for Monitoring Protein Misfolding and Amyloid Aggregation // [Methods in Molecular Biology, Protein Misfolding Diseases Volume 1873 (Methods and Protocols), 10.1007/978-1-4939-8820-4(Chapter 1), 3–18.
2. Oleg V. Konovalov, Natalia N. Novikova, Mikhail V. Kovalchuk, Galina E. Yalovega, Alexey F. Topunov, Olga V. Kosmachevskaya, Eleonora A. Yurieva, Alexander V. Rogachev, Alexander L. Trigub, Maria A. Kremennaya, Valentin I. Borshchevskiy, Daniil D. Vakhrameev, Sergey N. Yakunin // Materials. 2020, V.13(20). P.4635
3. Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Рогачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов Возможности рентгеновской абсорбционной спектроскопии в геометрии полного внешнего отражения для исследования белковых пленок на жидкости//Кристаллография. 2019. Т.64, №6, с.931-937.

Сенсорные интеллектуальные системы для неинвазивных медико-биологических исследований

Зайцева А. Ю.¹, Мазинг М.С.¹

¹ИАП РАН

e-mail: *anna@da-24.ru*

Разработаны, созданы и исследованы новые сенсорные системы для классификации функционального состояния здоровья человека по физиологически значимым компонентам жидких сред и биологических тканей.

С применением методов математического анализа многомерных данных проведены теоретические исследования взаимосвязей функционального состояния человека с оптическими и электрохимическими характеристиками сложных многокомпонентных биологических сред [1]. Разработана структура, конструкция и технология изготовления макета сенсорной диагностической аналитической системы, включающей модуль пробоподготовки и три функциональных модуля: 1) сенсорный, 2) микропроцессорный измерительный и 3) информационный, выполняющий функции формирования образов исследуемого объекта, их запоминание и распознавание [2]. Разработан массив сенсоров, ориентированных на решение конкретных практических задач в составе сенсорных систем.

Таким образом решена и обоснована задача идентификации функционального состояния здоровья человека методами многопараметрического оптического и потенциометрического анализа с использованием интеллектуальных математических моделей ранжирования и визуализации.

Список литературы

1. Власов Ю.Г., Легин А.В., Рудницкая А.М. Мультисенсорные системы типа электронный язык - новые возможности создания и применения химических сенсоров // Успехи химии. 2006. Т.75, № 2. С. 141-150.
2. Зайцева А.Ю., Мазинг М.С., Кисляков Ю.Я. Мультисенсорная оптическая система неинвазивного контроля кислородного обеспечения тканей человека при функциональной нагрузке. // Научное приборостроение. 2020. Т. 30. № 4. С. 106–112.

Матфизика и численные методы

Решение системы уравнений нелинейной электродинамики, минимально связанной с гравитацией, в аксиально симметричном случае

Галактионов Е. В.¹,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: evgalakt@mail.ru

Электрически заряженные объекты, связанные электромагнитным и гравитационным взаимодействиями, описываются в общей постановке нелинейной электродинамикой, минимально связанной с гравитацией (NED-GR). Соответствующая система уравнений в частных производных относительно двух компонент электромагнитного поля $F_{10}(r, \theta)$, $F_{20}(r, \theta)$ в аксиально симметричном случае приведена в [1] в развернутом виде:

$$\frac{\partial}{\partial r}[(r^2 + a^2) \sin(\theta) L_F F_{10}] + \frac{\partial}{\partial \theta}[\sin(\theta) L_F F_{20}] = 0, \quad \frac{\partial}{\partial r}[a \sin(\theta) L_F F_{10}] + \frac{\partial}{\partial \theta}\left[\frac{1}{a \sin(\theta)} L_F F_{20}\right] = 0,$$

$$\frac{\partial F_{10}}{\partial \theta} - \frac{\partial F_{20}}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \theta}[a^2 \sin^2(\theta) F_{10}] - \frac{\partial}{\partial r}[(r^2 + a^2) F_{20}] = 0,$$

где r, θ - координаты Бойера-Линдквиста, a - параметр Керра, $L_F(r, \theta)$ - производная лагранжиана по инварианту поля, также искомая функция, наряду с F_{10} и F_{20} . В работе [1] получено уравнение, которому должна удовлетворять функция L_F , чтобы обеспечить необходимое и достаточное условие совместности исходной системы. В настоящей работе найдено общее решение этого уравнения в предположении непрерывности вторых смешанных производных функции $L_F(r, \theta)$. Это решение имеет вид $L_F(r, \theta) = C_0 (r \cos(\theta))^\mu$, где C_0 - произвольная постоянная, μ - произвольное действительное число. Для найденной функции L_F проведены преобразования исходной системы, позволившие свести ее решение к решению двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. В результате, получено точное решение системы уравнений NED-GR для всех значений параметра μ . В случае, когда $\mu \neq \pm 1$, компоненты электромагнитного поля имеют вид:

$$F_{10}(r, \theta) = -D_1 \frac{2r \cos(\theta)}{(\mu^2 - 1)\Sigma^2} (\cos(\theta))^{-\mu} - D_2 \frac{r^2 - a^2 \cos^2(\theta) + \mu \Sigma}{a^2 \Sigma^2} r^{-\mu},$$

$$F_{20}(r, \theta) = -D_1 \frac{\sin(\theta)}{(\mu^2 - 1)\Sigma^2} [r^2 - a^2 \cos^2(\theta) - \mu \Sigma] (\cos(\theta))^{-\mu} + D_2 \frac{r \sin(2\theta)}{\Sigma^2} r^{-\mu}.$$

При $\mu = +1$:

$$F_{10}(r, \theta) = D_1 \frac{1}{2r\Sigma^2} \left[2r^2 + a^2 \cos^2(\theta) - 2r^2 \ln \left(\frac{r}{|\cos(\theta)|} \right) \right] - D_2 \frac{2r}{a^2 \Sigma^2},$$

$$F_{20}(r, \theta) = D_1 \frac{\tan(\theta)}{\Sigma^2} \left[0.5r^2 + a^2 \cos^2(\theta) \ln \left(\frac{r}{|\cos(\theta)|} \right) \right] + D_2 \frac{\sin(2\theta)}{\Sigma^2}.$$

И, наконец, при $\mu = -1$:

$$F_{10}(r, \theta) = D_1 \frac{r}{2a^2 \Sigma^2} \left[r^2 + 2a^2 \cos^2(\theta) + 2a^2 \cos^2(\theta) \ln \left(\frac{r}{|\cos(\theta)|} \right) \right] + D_2 \frac{2r \cos^2(\theta)}{\Sigma^2},$$

$$F_{20}(r, \theta) = D_1 \frac{r^2 \sin(2\theta)}{2\Sigma^2} \left[-0.5a^2 \cos^2(\theta)r^{-2} + \ln \left(\frac{r}{|\cos(\theta)|} \right) \right] + D_2 \frac{r^2 \sin(2\theta)}{\Sigma^2}$$

Здесь $\Sigma = r^2 + a^2 \cos^2(\theta)$, а D_1, D_2 - произвольные постоянные.

Список литературы

1. Dymnikova I. and Galaktionov E. Regular rotating electrically charged black holes and solitons in non-linear electrodynamics minimally coupled to gravity. *Classical and Quantum Gravity*, **32**, 16, 165015, 2015.

Поведение линеаризованной баллистико-кондуктивной модели теплопроводности в трехмерном пространстве

Руколайне С. А.¹,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: rukol@ammp.ioffe.ru

Для описания теплопроводности обычно используется классическое уравнение теплопроводности, основанное на законе Фурье. Однако закон Фурье справедлив лишь при выполнении условия локального термодинамического равновесия, которое нарушается на микро- и наноуровне и в сверхбыстрых процессах, а также при очень низких температурах [1–5]. В качестве замены закону Фурье предложено немало моделей в рамках различных теорий [1–12]. Однако ни одна из этих моделей не может служить полноценной заменой закону Фурье.

В диэлектриках теплоперенос осуществляется фононами, поскольку вклад электронов в теплоперенос пренебрежимо мал. Транспорт фононов описывается уравнением Больцмана для фононов (уравнением Пайерлса–Больцмана). Однако решение этого уравнения представляет собой крайне сложную задачу. Поэтому значительный интерес представляют приближения к уравнению Пайерлса–Больцмана.

В статье [13] была предложена баллистико-кондуктивная (ballistic-conductive, БК) модель теплообмена в рамках неравновесной термодинамики с внутренними переменными. В статьях [14, 15] линеаризованная форма этой модели была протестирована на экспериментальных данных и показала количественное описание теплопереноса трансверсальными баллистическими фононами, демонстрируя при этом качественное описание второго звука (second sound). Линеаризованная форма БК модели описывается гиперболической системой уравнений в частных производных, что обеспечивает конечность скорости распространения тепловой энергии. Исследование линеаризованной БК модели представляет существенный интерес, поскольку она может рассматриваться не только в рамках неравновесной термодинамики, но и как гиперболическое приближение к уравнению Пайерлса–Больцмана, которое само является гиперболическим интегро-дифференциальным уравнением в частных производных. С этой точки зрения модель Каттанео (гиперболическое уравнение теплопроводности) это первое гиперболическое приближение к уравнению Пайерлса–Больцмана, а линеаризованная БК модель — второе.

В статье [16] была изучена задача Коши в одномерном пространстве в рамках линеаризованной БК модели. В результате исследования был обнаружен нефизичный эффект, заключающийся в том, что часть начальной тепловой энергии никуда не распространяется, хотя и экспоненциально убывает. Более того, при значениях параметров модели, найденных из эксперимента, эта стационарная часть может содержать тепловой энергии больше, чем переносят баллистические фононы. Заметим, что похожий эффект в модели массопереноса, описываемой уравнением типа Джеффриса, был обнаружен ранее в статье [17]. В этом докладе в рамках линеаризованной БК модели изучается более реалистичная задача Коши в трехмерном пространстве. Обнаружен дополнительный нефизичный эффект, когда температура в тепловой волне принимает отрицательные значения, чего не наблюдалось в одномерной модели. В результате можно сделать вывод, что линеаризованная БК модель имеет серьезные недостатки при описании теплопроводности и сама по себе, и как приближение к уравнению Пайерлса–Больцмана.

Список литературы

1. Joseph, D. D., Preziosi, L. Heat Waves. *Rev. Mod. Phys.*, vol. 61, pp. 41-73, 1989.
2. Guo, Y., Wang, M. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport. *Phys. Rep.*, vol. 595, pp. 1-44, 2015.
3. Zhang, Z. M. *Nano/Microscale Heat Transfer*. Springer, Cham, 2020.
4. Chen, G. Non-Fourier phonon heat conduction at the microscale and nanoscale. *Nat. Rev. Phys.*, vol. 3, pp. 555-569, 2021.
5. Жмакин А. И. Теплопроводность за пределами закона Фурье. *ЖТФ*, т. 91, с. 5-25, 2021.
6. Guyer, R. A., Krumhansl, J. A. Solution of the linearized phonon Boltzmann equation. *Phys. Rev.*, vol. 148, pp. 766-778, 1966.
7. Muller, I., Ruggeri, T. *Rational Extended Thermodynamics*. Springer, New York, 1998.
8. Ottinger, H. C. *Beyond Equilibrium Thermodynamics*. Wiley, Hoboken, 2005.
9. Jou, D., Casas-Vazquez, J., Lebon, G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. Springer, New York, 2010.
10. Tzou, D. Y., Xu, J. Nonequilibrium transport: The lagging behavior. In: Wang, L., editor, *Advances in Transport Phenomena: 2010*, pp. 93-170. Springer, Berlin, 2011.
11. Dong, Y., Cao, B., Guo, Z. Generalized heat conduction laws based on thermomass theory and phonon hydrodynamics. *J. Appl. Phys.* vol. 110, p. 063504, 2011.
12. Pavelka, M., Klika, V., Grmela, M. *Multiscale Thermo-Dynamics: Introduction to GENERIC*. De Gruyter, 2018.
13. Kovacs, R., Van, P. Generalized heat conduction in heat pulse experiments. *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 83, pp. 613-620, 2015.
14. Kovacs, R., Van, P. Models of ballistic propagation of heat at low temperatures. *Int. J. Thermophys.*, vol. 37, p. 95, 2016.
15. Kovacs, R., Van, P. Second sound and ballistic heat conduction: NaF experiments revisited. *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 117, pp. 682-690, 2018.
16. Rukolaine, S. A. Some effects of the ballistic-conductive model of heat conduction. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*, vol. 16, no. PhysicA.SPb, 2023 (In press).
17. Rukolaine, S. A., Samsonov, A. M. Local immobilization of particles in mass transfer described by a Jeffreys-type equation. *Phys. Rev. E*, vol. 88, p. 062116, 2013.

Analytical and numerical modelling of a buckling in a plastic regime of a homogenous console with symmetrical cross section

Чистяков В. В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

e-mail: chistiakov_v_v@rambler.ru

Аналитическое и численное моделирование продольного изгиба в пластическом режиме однородной консоли с симметричным сечением

Начиная с работы Ф.Шэнли [1], проблема влияния пластического характера деформаций на величину критической нагрузки F_{cr} начала изгиба и на его продолжение для однородного стержня/консоли представляет как теоретический, в силу бифуркационного и схожего с квантовомеханическим характера явления, так и практический интерес с точки зрения механики, робототехники, медицины и т.д. где требуется сочетание лёгкости и прочности конструктивных элементов/протезов и т.д.

В работе при помощи нелинейной регрессии (Maple 2018, Statistica 10) показывается, что экспериментальные (лаб. работы студентов) и литературные (напр. [2]) данные по диаграммам сжатия большого числа реальных материалов (сталь, титан, тефлоны и т.д.) хорошо описываются ($\text{adj-R}^2 > 0.99$) кубической формулой [3]

$$\sigma(\varepsilon) = E\varepsilon - \frac{3E\mu}{2}\varepsilon^2 + \frac{E\mu}{2t}\varepsilon^3, \mu = \frac{Et - \sigma_f}{Et^2}, \quad (1)$$

где σ , МПа – напряжение (stress), ε – относительное укорочение (strain), E – модуль Юнга, σ_f – т.н. условный предел текучести, t – деформация при $\sigma = \sigma_f$. Безразмерный параметр μ отражает степень нелинейности диаграммы, и он равен нулю для закона Гука.

В рамках гипотезы плоских сечений относительные деформации на удалении η от оси Sx минимального момента сечения $J_x^{(II)}$ определены как

$$\varepsilon_\eta = \varepsilon_{ax} + \frac{\eta}{\rho} \quad (2),$$

где ε_{ax} – локальное укорочение оси, ρ – радиус её кривизны.

В работе в целях однозначности рассматривалась вертикальная консоль свободной длины l_0 с закреплённым нижним A и нагруженным силой F верхним B концами. Предполагалось, что 3-й момент инерции её сечения $J_x^{(III)} = 0$, что имеет место в случае симметрии распределении площадей $dS(\eta) = dS(-\eta)$ для двутавра и симметричного уголка.

Подставляя (2) в изгибающий момент в сечении с продольной координатой $z \in [0, z_B]$ и поперечным отклонением его центра C – $y(z)$ и интегрируя с учётом симметрии, получим в предположении кубичности (1)

$$M_x(z) = \oint \sigma \eta dS = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \frac{J_x^{(II)}}{\rho} + \frac{1}{3!} \frac{d^3\sigma}{d\varepsilon^3} \frac{J_x^{(IV)}}{\rho^3} = F(b - y),$$

где $b=y(z_B)$ — поперечное отклонение верхнего конца B .

Учитывая, что $\frac{1}{\rho} = \frac{y''_{zz}}{(1+y'^2_z)^{3/2}}$, и вводя переменные $s = p^2 = y'^2_z, w = (y - b)^2$, получим неразрешённое относительно производной уравнение I-го порядка

$$\frac{dw}{ds} = -\frac{J_x^{(II)}}{F(1+s)^{3/2}} \frac{d\sigma(\varepsilon_{ax})}{d\varepsilon} - \frac{1}{6} \frac{d^3\sigma(\varepsilon_{ax})}{d\varepsilon^3} \frac{J_x^{(IV)} w}{F(1+s)^{9/2} (\frac{dw}{ds})^2} \quad (3)$$

с граничными условиями $w(0)=b^2, w(s_B) = 0$, содержащими неизвестные величины квадрата отклонения и наклона (slope) верхнего конца B .

Для решения (3) необходимо: 1) выразить производные через нормальные напряжения на оси $\sigma_{ax} = \frac{F \cos\theta}{S} = \frac{F}{S(1+s)^{1/2}}$, S - площадь сечения, θ - угол его поворота вследствие изгиба; 2) определить взаимосвязанные параметры b^2 и s_B , 3) применить теорию возмущений, принимая второе слагаемое в правой части (3) за малую добавку. (Её вклад для двутавра оценен численно в $\sim 0.01\%$)

Для первого пункта при помощи арсенала средств Maple (команды *expand, series*) строилась обратная зависимость

$$\varepsilon(\sigma) = \frac{\sigma}{E} + \frac{3\mu\sigma^2}{2E^2} + \frac{\mu(9\mu t - 1)\sigma^3}{2E^3 t} \quad (4),$$

равноценная (1) с точностью до $O(\varepsilon^4)$, но без т.н. зоны упрочнения с $\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon^2} > 0$ при $\varepsilon > t$.

Что касается второго, то параметр $s_B = y'^2_{zB}$ находится из условия равенства **восстановленной** длины оси величине l_0 :

$$\int_0^{p_B} \frac{dl(p)}{1 - \varepsilon_{ax}(p)} = l_0, p = \sqrt{s} = \frac{dy}{dz}, dl = -\frac{d\sqrt{w}}{p} (1+p^2)^{1/2} = -\frac{w'_s}{\sqrt{w}} (1+s)^{1/2} \frac{ds}{2\sqrt{s}} \quad (5).$$

Уравнение использовалось для построения зависимостей наклона оси в конце B - $p_B(F)$ от нагрузки F, kN при помощи команды *implicitplot*.

Такие кривые были построены для профилей выше (I-/L-beam), выполненных из низкоуглеродной стали, титана, вольфрама, тефлона (PTFE) и алюминий-тефлона (Al/PTFE). Они были выполнены в трёх приближениях: идеальный закон Гука, приближение касательного модуля [1] и кубической диаграммы сжатия (1). Установлено, что для металлов критическая нагрузка F_{cr} , получающаяся из (1) примерно на 20-30% меньше, чем для закона Гука ($\mu = 0$) и всего на 1-2 % величины, вытекающей из приближения касательного модуля. Для полимеров же величина F_{cr} в пластическом режиме (1) была примерно вдвое меньше, чем в случае идеальной линейности $\sigma(\varepsilon)$.

Установлено, что описывающие форму изгиба кривые $y(z)$ для нагрузок F , дающих одинаковый конечный наклон $p_B \leq 0.5$, во всех трёх приближениях

показывали идентичность, причём даже для разных материалов.

Список литературы

1. *Shanley F.R.*, Inelastic Column Theory/Journal of Aeronautical Sciences, 14(5) , 1947, p. 261— 280
2. *Chuang Chen , Zihan Guo and Enling Tang*, Determination of Elastic Modulus, Stress Relaxation Time and Thermal Softening Index in ZWT Constitutive Model for Reinforced Al/PTFE// Polymers 2023, 15, 702.
<https://doi.org/10.3390/polym15030702>
3. *Чистяков В.В., Соловьёв С.М.*, Численное интегрирование задачи Эйлера продольного изгиба стержней в области пластических деформаций при помощи Maple 18// Сб.матер. LVIII Всеросс. конф. по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники, Москва, РУДН, 23—27 мая 2022 г., с. 187—194

Численное решение нелинейной краевой задачи водородопроницаемости с динамическими граничными условиями и концентрационной зависимостью коэффициента диффузии

Заика Ю.В.¹, Родченкова Н.И.¹, Сидоров Н.И.²

¹Карельский научный центр РАН, ²Институт металлургии УрО РАН

e-mail: *nirodchenkova@krc.karelia.ru*

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с конструкционными материалами вызван, в частности, проблемами защиты от водородной коррозии и перспективами водородной энергетики. Рассматривается нелинейная краевая задача, основанная на экспериментальных данных по водородопроницаемости мембран из сплава V-Fe-Co-Cr-Ni, полученные в Институте металлургии УрО РАН. Нагретая до достаточно высокой температуры мембрана служит перегородкой вакуумной камеры. После предварительного вакуумирования на входной стороне создается постоянное давление газообразного водорода. С выходной стороны в условиях вакуумирования определяется проникающий поток. По экспериментальным данным наблюдаются три стадии: выход проникающего потока на максимум с последующими снижением и выходом на стационар.

Стадия снижения характеризуется большой длительностью и малой скоростью. Нарастание концентрации растворенного атомарного водорода до определенного уровня приводит к последующему постепенному замедлению диффузии. В таких условиях принята линейная модель зависимости коэффициента диффузии от концентрации. По температуре зависимость в соответствии с законом Аррениуса. Такие задачи хорошо изучены, но в рамках стандартных граничных условий. На выходной стороне в приповерхностном объеме принимается нулевая концентрация диффузанта. На входе обычно считается, что практически мгновенно (при относительно большом давлении) концентрация достигает равновесного уровня, пропорционального корню из давления (закон Сивертса).

Существенным недостатком такой модели является то, что из рассмотрения исключается динамика поверхностных процессов растворения и сорбции-десорбции. В представленной работе эти процессы учтены в форме нелинейных динамических граничных условий: записаны дифференциальные уравнения для поверхностных концентраций атомарного водорода. Тем самым, производная по времени участвует не только в диффузионном уравнении, но и в граничных условиях. Это существенно усложняет краевую задачу. Если иметь в виду общую теорию функционально-дифференциальных уравнений, то подобные задачи относятся к так называемому нейтральному типу и требуют развития более сложного математического аппарата.

В работе представлен итерационный вычислительный алгоритм решения нелинейной краевой задачи на основе неявных разностных схем и приведены результаты численного моделирования, результаты сравнения с экспериментальными данными. После верификации модели можно уже численно моделировать различные ситуации (например, реакцию на скачкообразный ступенчатый характер входного давления), экономя на экспериментальных затратах.

Применение параллельных вычислений в задачах моделирования гемодинамики в больших сосудистых системах

Кривовичев Г. В.¹, Егоров Н.В.¹

¹СПбГУ

e-mail: *g.krivovichev@spbu.ru*

В последние десятилетия математические модели течения крови широко используются в медицине для прогнозирования развития и профилактики сердечно-сосудистых заболеваний [1,2]. В рамках таких моделей кровь рассматривается как вязкая несжимаемая жидкость. В задачах, в которых важно знать структуру течений с наличием завихрений в областях со сложной геометрией, используются двумерные и трехмерные гидродинамические модели. При моделировании кровотока в распределенных сосудистых системах, как правило, рассматриваются одномерные модели, поскольку при исследовании таких течений медикам достаточно знать только средние значения гидродинамических переменных по поперечному сечению сосуда [2]. Одномерная модель получается посредством осреднения трехмерных уравнений гидродинамики, что приводит к нелинейной гиперболической системе относительно площади поперечного сечения, объемного расхода и давления. Такие модели успешно "стыкуются" с пространственными и точечными (нуль-мерными) моделями [2]. Для численного решения одномерных задач можно успешно применять известные конечно-разностные и конечно-объемные схемы.

При моделировании динамики крови в сосудистых системах (например, в артериальной системе или в системах отдельных органов) возникает необходимость решения большого числа систем уравнений, отвечающих одномерным моделям. В связи с этим, возникает задача о разработке и реализации параллельных алгоритмов для проведения вычислительных экспериментов. Настоящая работа посвящена разработке, анализу и приложениям алгоритма расчета течений крови в сосудистых системах на основе одномерных моделей и его параллельной реализации. Расчеты производятся на основе известных явных схем. Программная реализация параллельного алгоритма проведена на языке C++ с использованием технологии OpenMP. Сравниваются алгоритмы на основе конечно-разностной схемы МакКормака и на основе конечно-объемных схем с потоками Лакса и Русанова. При моделировании кровотока в моделях сосудистых систем из небольшого числа сосудов и для модели артериальной части большого круга кровообращения показано, что за счет предложенного параллельного алгоритма можно достичь ускорения в 4-5 раз для случая системы с восемью ядрами и исследована эффективность распараллеливания. Отдельно обсуждаются перспективы использования технологии CUDA для возможности проведения расчетов при применении графических ускорителей.

Список литературы

1. Gallo D., Anayiotos A., Morbiducci U. The evolution of computational hemodynamics as a clinical tool in decision making, patient specific treatment and clinical management. Part II, *Annals of Biomedical Engineering*, vol. 43, 1273-1274, 2015.
2. Dobroserdova T., Liang F., Panasenko G., Vassilevski Y. Multiscale models of blood flow in the compliant aortic bifurcation, *Applied Mathematics Letters*, vol. 93, 98--104, 2019.

Форма боковой поверхности вертикального жидкого моста между несмачиваемыми твердыми плоскостями с учетом силы тяжести при малых числах Бонда

Галактионов Е. В.¹, Галактионова Н.Е.²

¹ФТИ

²СПбПУ

e-mail: nadyavk@mail.ru

Исследование формы поверхности жидкого моста малого объема при наличии зоны трехфазного контакта представляет собой актуальную задачу для решения многих научных и технологических проблем [1]. В отечественной литературе, например в монографии [2], капля, находящаяся между двумя параллельными твердыми плоскостями, именовалась "раздавленной каплей" и в качестве одного из возможных применений таких капель для несмачиваемых плоскостей рассматривались "каплеподшипники" (идея Я.И. Френкеля). Подробный обзор работ по жидким мостам и их применениям приведен в [1]. Там же выделены два направления исследований по этой тематике: изучение формы поверхности жидкого моста и изучение его устойчивости относительно различных возмущений. Исследованию формы боковой поверхности вертикального жидкого моста фиксированного объема между двумя параллельными смачиваемыми твердыми плоскостями посвящена работа [3].

В настоящей работе, в отличие от [3], изучается случай несмачиваемых твердых плоскостей. Используется цилиндрическая система координат в предположении осевой симметрии. Дана вариационная постановка задачи с учетом действия силы тяжести. Предложен алгоритм итерационного процесса нахождения приближенного решения задачи для малых чисел Бонда. Показано, что учет второго шага итерационного процесса при достаточно малых значениях модифицированного числа Бонда не вносит существенных изменений в форму профиля жидкого моста.

Обнаружено отсутствие единственности решения задачи и установлено, что максимальное число различных профилей боковой поверхности моста, соответствующих одному значению высоты (расстояния между плоскостями), равно четырем. Исследована зависимость числа решений от высоты моста. При значениях высоты превышающих некоторое критическое значение решений не существует, а при значениях меньших некоторого значения есть только одно решение. Найдена максимально возможная высота вертикального жидкого моста между двумя несмачиваемыми твердыми плоскостями на первом шаге итерационного процесса.

Список литературы

1. Fel L.G., Rubinstein B.Y. Stability of axisymmetric liquid bridges. *Z. Angew. Math.*, **66**, 3447, 2016;
2. Гегузин Я.Е. Капля. М.: Наука, 1973. 160 с.;
3. Галактионов Е.В., Галактионова Н.Е., Тропп Э.А. Форма поверхности вертикального жидкого моста между двумя параллельными твердыми плоскостями с учетом силы тяжести при малых числах Бонда. *ЖТФ*, **87**, 10, 1475, 2017.

Моделирование самосборки полидисперсной коллоидной системы во внешних управляющих электрических полях

Гурский К. Д.¹, Кушнир И.А., Крючков Н.П.

¹МГТУ им. Н. Э. Баумана

e-mail: *konstanting2017@mail.ru*

В природе существует много систем образованных полидисперсными частицами, примерами которых могут служить коллоидные системы, эмульсии, клеточные ткани. Изучение таких систем является областью исследований мягкой материи, для которой крайне актуальны задачи самосборки [1]. Управляемая самосборка может осуществляться, например, при помощи внешних электрических полей [2], однако вопрос о том, как именно собираются полидисперсные системы, слабо изучен. Поэтому целью данной работы является изучение процесса самосборки полидисперсных систем во внешних вращающихся полях [3-6].

В качестве модели была рассмотрена двумерная система частиц, динамика которых описывалась уравнением Ланжевена, а температуры варьировались от 0.1 до 1.4 T_m – оценочная температура плавления. Взаимодействие частиц складывалось из двух компонент. Контактное отталкивание по потенциалу Вика-Чандлера-Андерсена:

$$U_{WCA} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^6 \right], r_c < 2^{1/6}$$

где $\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}$. При этом размер σ распределен по нормальному закону с матожиданием $\mu = 1$ и среднеквадратичным отклонением 0.1, а масса $m = \rho \left(\frac{\sigma}{2} \right)^3$, где плотность всех частиц ρ одинакова.

Кроме того, в коллоидной системе под воздействием быстро вращающегося электрического поля перераспределяется заряд частиц, возникает вращающийся дипольный момент, а в самой системе индуцируется изотропное дипольное притяжение, которое можно свести к:

$$U_i = -\frac{\varepsilon_i}{r^3}$$

где $\varepsilon_i = E^2 \sigma_1^3 \sigma_2^3$ – изотропное дипольное притяжение, где E – напряженность электрического поля.

В результате была проведена серия симуляций, в которой было рассмотрена кинетика самосборки при различных значениях температуры системы, размеров частиц и параметрах их распределения. Были изучены распределения частиц по формирующимся кластерам в зависимости от параметров.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 20-72-10161 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Список литературы

1. Mendes, A. C., Baran, E. T., Reis, R. L., & Azevedo, H. S. (2013). Self-assembly in nature: using the principles of nature to create complex nanobiomaterials. In Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and

- Nanobiotechnology (Vol. 5, Issue 6, pp. 582–612). Wiley. <https://doi.org/10.1002/wnan.1238>
2. Yakovlev, E. V., Komarov, K. A., Zaytsev, K. I., Kryuchkov, N. P., Koshelev, K. I., Zotov, A. K., Shelestov, D. A., Tolstoguzov, V. L., Kurlov, V. N., Ivlev, A. V., & Yurchenko, S. O. (2017). Tunable two-dimensional assembly of colloidal particles in rotating electric fields. In *Scientific Reports* (Vol. 7, Issue 1). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-14001-y>
 3. Hvozď, & Kalyuzhnyi. (2016). Two- and three-phase equilibria in polydisperse Yukawa hard-sphere mixture. High temperature and mean spherical approximations. In *Condensed Matter Physics* (Vol. 19, Issue 2, p. 23603). Institute for Condensed Matter Physics. <https://doi.org/10.5488/cmp.19.23603>.
 4. Ma, S., Hou, Y., Hao, J., Lin, C., Zhao, J., & Sui, X. (2022). Well-Defined Nanostructures by Block Copolymers and Mass Transport Applications in Energy Conversion. In *Polymers* (Vol. 14, Issue 21, p. 4568). MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/polym14214568>
 5. Lu, Y., Lin, J., Wang, L., Zhang, L., & Cai, C. (2020). Self-Assembly of Copolymer Micelles: Higher-Level Assembly for Constructing Hierarchical Structure. In *Chemical Reviews* (Vol. 120, Issue 9, pp. 4111–4140). American Chemical Society (ACS). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00774>
 6. Song, S., Zhou, H., Manners, I., & Winnik, M. A. (2021). Block copolymer self-assembly: Polydisperse corona-forming blocks leading to uniform morphologies. In *Chem* (Vol. 7, Issue 10, pp. 2800–2821). Elsevier BV. <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.08.003>

Электродинамический расчет и проектирование полосно-пропускающих фильтров на круглых волноводах

Лонкина Д.В.¹, Земляков В.В.², Губский Д.С.², Крутиев С.В.², Заргано Г.Ф.²

¹ООО «НИИ Витрулюкс»

²Южный федеральный университет

e-mail: *ds@sfedu.ru*

Цилиндрические волноведущие структуры с различными неоднородностями сложного поперечного сечения широко используются в СВЧ технике [1]. Они обладают селективными свойствами, что делает возможным построение различных фильтров на запердельных волноводах [2]. Такие фильтры имеют меньшие размеры, лучшее затухание в полосе заграждения, и в них могут использоваться отрезки круглых волноводов с произвольно расположенными гребнями [3,4]. В нашем случае цилиндрические структуры могут быть использованы как проходные резонаторы при конструировании фильтров [5].

В данной работе показана возможность использования круглого волновода с радиальными гребнями и кольцевыми сегментами конечной толщины [6] в качестве резонансных диафрагм при синтезе полосно-пропускающих волноводных фильтров на базе цилиндрических волноведущих структур.

При проектировании прототипа фильтра и его дальнейшей оптимизации был использован ранее апробированный подход моделирования селективных устройств [2, 4]. Для этого в работе было проведено исследование резонансных свойств одиночной диафрагмы и зависимость ее проводимости от геометрических размеров. В результате были выявлены геометрические размеры неоднородности, существенно влияющие только на смещение резонансной частоты, а также параметры, влияющие как на резонансную частоту, так и на добротность самой диафрагмы. Такое разное поведение резонансных характеристик неоднородности от ее геометрических размеров позволяет производить более точный выбор параметров частотно-селективных устройств, удовлетворяющих заданным требованиям.

Также была решена задача рассеяния электромагнитной волны на бесконечно тонкой плоско поперечной неоднородности сложной формы, расположенной между двумя круглыми волноводами. Были рассчитаны и изучены зависимости элементов матрицы рассеяния от геометрических размеров неоднородности со сложной формой поперечного сечения, была найдена обобщённая многоволновая матрица рассеяния для каскадного соединения диафрагмы и регулярного отрезка круглого волновода.

Проведенные расчеты позволили смоделировать прототип фильтра, в котором, в качестве резонаторов были использованы исследуемые диафрагмы в форме радиального гребня и кольцевого сегмента конечной толщины, а регулярные четвертьволновые отрезки круглого волновода являлись инверторами сопротивлений.

В результате был спроектирован фильтр третьего порядка с шириной полосы пропускания – 400 МГц (7.22 -7.62 ГГц), неравномерность коэффициента передачи в полосе пропускания – до -0.7 дБ и коэффициентом отражения не хуже – 33дБ. При этом его продольный размер составил 26.34 мм, а продольный размер фильтра пятого порядка составил 43.66 мм. При этом ширина полосы

пропускания у фильтра пятого порядка находилась в диапазоне 7.17 -7.63 ГГц, а коэффициент отражения не хуже –16.35 дБ.

Для проведения экспериментальной проверки результатов численного моделирования были изготовлены соответствующие фильтры. Сравнение рассчитанных характеристик при компьютерном моделировании с измеренными параметрами изготовленных фильтров-прототипов показало хорошее совпадение, что говорит о высокой точности и достоверности предложенных алгоритмов проектирования СВЧ фильтров.

Таким образом, в работе показана возможность создания полосно-пропускающих фильтров на резонансных диафрагмах в форме радиального гребня и кольцевого сегмента конечной толщины расположенных в круглом волноводе. Изготовлены фильтры прототипы. Проведено сравнение АЧХ синтезированных фильтров и фильтров прототипов, которое показало хорошее совпадение сравниваемых величин, что говорит о высокой точности и достоверности предложенных методов и алгоритмов моделирования.

Список литературы

1. Lonkina D.V., Gubskii D.S., Zemlyakov V.V. Cylindrical Waveguiding Structures with Complex Cross Sections in Microwave Units of Modern Information and Communication Systems // Journal of Communications Technology and Electronics. 2020. V. 65. No 9. PP. 967-981.
2. Zemlyakov V.V., Zargano G.F. Bandpass Filters Based on L-Ridged Rectangular Waveguides // Radiophysics and Quantum Electronics. 2014. V. 57. No 3. PP. 187-197.
3. Seng Yong Yu, Jens Bornemann Evanescent-mode filters with arbitrary positioned ridges in circular waveguide // Proceedings of 2011 IEEE Pacific Rim Conference on Communications, Computers and Signal Processing. 2011. PP. 504-508.
4. Gubsky D.S., Zemlyakov V.V., Lonkina D.V. Compact Band-Pass Filter Based on a Circular Waveguide with Two T-Shaped Ridges // Journal of Communications Technology and Electronics. 2019. V. 64. No 1. PP. 20-25.
5. Musonda, E., Hunter, I. C. Microwave Bandpass Filters Using Re-Entrant Resonators // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 2015. V. 63. Issue 3. PP. 954-964.
6. Lonkina D.V., Zemlyakov V.V., Gubskii D.S., Zargano G.F., Krutiev S.V. The Partial-Region Method for Electrodynamic Calculation of Cylindrical Structures with Metal Radial T-Ridges and Inhomogeneous Dielectric Filling // Radiophysics and Quantum Electronics, Vol. 64, No. 5, 2021, PP. 357-369.

Качественная и параметрическая идентификация двухпиковых спектров термодесорбции водорода

Заика Ю.В.¹, Костикова Е.К.²

¹Карельский научный центр РАН, ²ИПМИ КарНЦ РАН

e-mail: *kostikova@krc.karelia.ru*

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с конструкционными материалами вызван, в частности, проблемами защиты от водородной коррозии и перспективами водородной энергетики. Одним из эффективных экспериментальных методов является термодесорбционная спектрометрия. Образец, предварительно насыщенный растворенным водородом при достаточно высокой температуре, медленно (на практике обычно линейно) нагревается в вакуумной камере. С помощью масс-спектрометра определяется поток дегазации. Зависимость потока от текущей температуры дает спектр термодесорбции. По этой информации судят о тех или иных характеристиках конструкционного материала, взаимодействующего с водородом. Спектр часто состоит из нескольких изолированных пиков. Их интерпретация и составляет задачу анализа спектра.

Обычно применяют следующую схему. Спектр разлагают на сумму гауссианов. Каждый из них интерпретируют как реакции первого или второго порядков, оперируя средней по объему концентрацией водорода и энергиями связи в различного рода ловушках (микроростки, границы зерен и другие неоднородности материала). Затем с помощью методики Киссинджера оценивают предэкспоненты (частотные множители) и энергии связи.

Численное моделирование (рассматривается нелинейная диффузионная краевая задача с динамическими граничными условиями для поверхностной концентрации) показывает, что возможен и другой сценарий. Для определенности будем иметь в виду дегазацию тонкой пластины. Сначала по мере нагрева происходит десорбция с поверхности и из приповерхностного объема (первый пик). Температура растет и у поверхности сформирован большой градиент концентрации. Происходит существенная активизация диффузии из объема к поверхности и наблюдается повторный всплеск дегазации.

Прежде, чем переходить к параметрической идентификации, нужно физически обосновать сам сценарий (на основе имеющихся экспериментальных данных). С математической точки зрения возникает задача: как по спектру понять, какому из вариантов следует отдать предпочтение? Многопиковый спектр очень трудно однозначно интерпретировать, поскольку реально имеет место наложение многих вариантов, не только указанных двух.

В работе для определенности рассмотрены спектры для двух хорошо изученных материалов: стали и никеля. Для стали характерен относительно невысокий пологий первый пик с последующим высокотемпературным всплеском. Для никеля наоборот: за первым высоким пиком следует более пологий. Применяются обе модели для аппроксимации спектров. Затем проводится серия вычислительных экспериментов (меняется толщина пластины, скорость нагрева, начальная концентрация насыщения, закон нагрева (например, со ступенчатым изменением скорости нагрева),...). Накопленный вычислительный материал позволяет понять, какой из дополнительных экспериментов следует провести, чтобы окончательно выбрать модель и провести уже её параметрическую идентификацию. Для «чистых» металлов вероятнее второй

сценарий, а для «пористых» – первый. В работе представлены рекомендации, как экспериментально отличить указанные модели термодесорбции.

Численное моделирование акустической неустойчивости в неравновесном колебательно-возбужденном газе

Храпов С. С.¹, Иванченко Г.С.¹, Радченко В.П.¹, Титов А.В.¹

¹ВолГУ

e-mail: *khrapov@volsu.ru*

Новые дисперсионно-вязкостные свойства неравновесных сред важны для понимания физических процессов, происходящих, например, в колебательно-возбужденном газе [1]. При определенных условиях неравновесная среда становится акустически активной, т.е. амплитуда звуковых волн в ней нарастает [2,3]. Акустическая неустойчивость в неравновесном колебательно-возбужденном газе может приводить к: аномальному закону дисперсии звуковых волн (существенному увеличению фазовой скорости звука по сравнению с равновесной) как в низкочастотной области спектра, так для средних частот; сверхотражению (с коэффициентом отражения > 1) звуковых волн на границе раздела равновесной и неравновесной сред; возбуждению встречного акустического ветра; появлению новых свойств параметрических взаимодействий звуковых, вихревых и энтропийных мод; изменению критического числа Рейнольдса ламинарно-турбулентного перехода, структуры пограничного слоя, коэффициентов аэродинамического сопротивления; изменению структуры, скорости и условий устойчивости ударных волн, а также параметров течения за фронтом детонационных волн.

В данной работе на основе газодинамических методов проведено численное моделирование нелинейной динамики звуковых волн в колебательно-возбужденном неравновесном газе и исследованы основные стадии эволюции акустической неустойчивости. Показано, что в численных моделях линейный режим с экспоненциальным законом роста амплитуды возмущений хорошо согласуется с линейным анализом устойчивости, а на нелинейной стадии развития акустической неустойчивости происходит формирование системы ударных волн. Расстояние между фронтами волн с течением времени увеличивается, а их относительная амплитуда в 1.5-2 раза превышает равновесные значения газодинамических параметров. Продемонстрированы эффекты нелинейного насыщения интенсивности ударных волн, обусловленные стабилизацией акустической неустойчивости, как в окрестности максимума волны, так и в области минимума для немонотонных зависимостей времени релаксации от температуры.

Список литературы

1. Осипов А.И., Уваров А.В. Кинетические и газодинамические процессы в неравновесной молекулярной физике // УФН, 1992, т. 162, № 11, с. 1-42.
2. Makaryan V.G., Molevich N.E. Stationary shock waves in nonequilibrium media // Plasma Sources Science and Technology, 2007, v. 16, №1, p. 124-131.
3. Zavershinskii D., Molevich N., Belov S., Riashchikov D. Overstability of acoustic waves in heat-releasing gaseous media // AIP Conf. Proc, 2020, v. 2304, № 1, id. 020028.

Использование методов машинного обучения для прогнозирования процессов затвердевания жидкостей

Галимзянов Б. Н.¹, Доронина М.А.¹, Мокшин А.В.¹

¹КФУ

e-mail: bulatgnmail@gmail.com

В последнее десятилетие значительно возрос интерес к изучению фазовых переходов в аморфообразующих жидкостях. Результаты последних исследований показывают, что аморфообразующая способность жидкости зависит от специфики изменения ее атомистической структуры и коллективной динамики вблизи температуры плавления T_m [1]. Начало таких изменений в динамике жидкости соответствует температуре аррениусовского перехода T_A . Принято считать, что выше T_A атомы жидкости не образуют никаких связанных структур. В этом случае зависимость логарифма вязкости от обратной температуры подчиняется линейному закону. Ниже T_A отдельные группы атомов становятся менее подвижными, что проявляется в отклонении вязкости от аррениусовского поведения, характерного для равновесных жидкостей [2].

Температура Аррениуса T_A соответствует термодинамическому состоянию, в котором атомистическая динамика жидкости становится гетерогенной и кооперативной [3]. Теоретическая оценка этой температуры затруднительна для некоторых типов материалов, особенно силикатов и боратов. В этих материалах температурная зависимость самодиффузии воспроизводится законом Аррениуса, где активационный барьер практически не зависит от температуры. Целью настоящей работы было установление взаимосвязи между температурой аррениусовского перехода T_A и физическими свойствами жидкостей, непосредственно связанными с их аморфообразующей способностью. С помощью модели машинного обучения была рассчитана температура T_A для силикатов, боратов, органических соединений и расплавов металлов различного состава. В качестве входных параметров использовались эмпирические значения температуры стеклования T_g , температуры плавления T_m , отношения этих температур T_g/T_m и индекса хрупкости m . Установлено, что температуры T_g и T_m являются значимыми параметрами, тогда как их отношение T_g/T_m и индекс хрупкости m мало коррелируют с температурой T_A . Важным результатом настоящей работы является аналитическое уравнение, связывающее температуры T_g , T_m и T_A , которое с алгебраической точки зрения является уравнением для искривленной поверхности второго порядка [4]:

$$T_A(T_g, T_m) = a_1 T_g + a_2 T_g^2 + b_1 T_m + c_1 T_g T_m.$$

Значения коэффициентов $a_1 = b_1 = 0.7016$, $a_2 = -7.52 \times 10^{-4} K^{-1}$ и $c_1 = 4.42 \times 10^{-4} K^{-1}$ были подобраны через регрессионный анализ. Показано, что это уравнение позволяет корректно оценить температуру T_A для большого класса материалов независимо от их состава и аморфобразующей способности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №19-12-00022).

Список литературы

1. Jaiswal A., Egami T., Kelton K. F., Schweizer K. S., Zhang Y., Correlation between Fragility and the Arrhenius Crossover Phenomenon in Metallic, Molecular, and Network Liquids, Phys. Rev. Lett., 117, 205701, 2016.

2. Dai R., Ashcraft R., Kelton K. F., A possible structural signature of the onset of cooperativity in metallic liquids, J. Chem. Phys., 148, 204502, 2018.
3. Novikov V. N., Connection between the glass transition temperature T_g and the Arrhenius temperature T_A in supercooled liquids, Chem. Phys. Lett., 659, 133-136, 2016.
4. Galimzyanov B. N., Doronina M. A., Mokshin A. V., Arrhenius Crossover Temperature of Glass-Forming Liquids Predicted by an Artificial Neural Network, Materials, 16, 1127, 2023.

Влияние анизотропии на термоупругие напряжения в цилиндрических кристаллах оксида галлия, выращиваемых из расплава

Крымов В. М.¹, Бахолдин С.И.¹, Галактионов Е.В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: v.krymov@mail.ioffe.ru

Изучение термических напряжений, возникающих в кристаллах при их выращивании из расплава, необходимо для выбора оптимальных режимов роста, конструирования тепловых зон и снижения дефектности кристаллов. Появление новых перспективных кристаллов, таких как оксид галлия, требует развития таких исследований с учетом особенности теплопереноса и анизотропии тепловых и упругих свойств. В последнее время прозрачные полупроводники на основе кристаллов оксида галлия (β -Ga₂O₃) вызывают большой интерес при создании новых типов электронных устройств (фотодиоды, прозрачные тонкопленочные транзисторы, энергосберегающие окна и т. д). Одним из способов выращивания объемных кристаллов оксида галлия является метод Чохральского, в котором кристалл вытягивается из расплава, находящегося в иридиевом тигле. Несмотря на целый ряд технологических трудностей к настоящему времени выращены кристаллы в форме цилиндров, диаметром до 50мм [1]. В ряде работ проведено численное моделирование процессов теплообмена в кристалле и ростовой зоне и проведены расчеты термических напряжений. Показано, что численно рассчитанные максимальные напряжения по критерию Мизеса сильно зависят как от кристаллографического направления выращивания [2], так и от конфигурации элементов тепловой зоны [3].

В настоящей работе проведено исследование влияния анизотропии тепловых и упругих свойств на распределение термоупругих напряжений в тонких цилиндрических кристаллах оксида галлия, выращиваемых из расплава методом Чохральского. Расчеты выполнены по приближенным формулам, полученным с помощью решения стационарной задачи термоупругости методом сингулярных возмущений с учетом прямолинейной анизотропии общего вида [4]. Проведено сравнение величин напряжений для двух направлений выращивания. Показано, что выбор ориентации направления вытягивания кристалла оксида галлия относительно кристаллографических осей позволяет управлять величиной и распределением термоупругих напряжений, возникающих в нем в процессе выращивания, а значит, и степенью его структурного совершенства.

Список литературы

1. Galazka Z., Ganschowa S., Imschera K., etc. Bulk single crystals of β -Ga₂O₃ and Ga-based spinels as ultra-wide bandgap transparent semiconducting oxides. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, **67**, 100511, 2021;
2. Miller W., Böttcher K., Galazka Z., etc. Numerical Modelling of the Czochralski growth of β -Ga₂O₃. *Crystals*, **7**, 26, 2017;
3. Dan Wu, Ning Xia, Keke Ma, etc. Numerical Simulation of β -Ga₂O₃ single crystal growth by Czochralski method with an insulation lid. *Crystals*, **12**, 1715, 2022;
4. Antonov P.I., Baholdin S.I., Galaktionov E.V., etc. Anisotropy of thermoelastic stresses in shaped sapphire single crystals. *J. Crystal Growth*, **52**, 404, 1981.

Численное моделирование термодиффузионного процесса при наличии объемного тепловыделения

Романенков А. М.^{1, 2}, Костиков Ю. А.¹

¹МАИ

²ФИЦ ИУ РАН

e-mail: romanaleks@gmail.com

Рассматривается модельная задача совместного процесса теплопроводности и диффузии в твердом теле. Одной из особенностей процесса диффузии в твердых телах является ее медлительность, по сравнению с диффузией в жидкостях и газах. Однако, известно, что процесс диффузии зависит от температуры вещества, в котором рассматривается этот процесс, и ускоряется с ее ростом, а распределение температуры подчинено уравнению параболического типа. По этой причине одновременно исследуются сразу два процесса, а именно термический и диффузионный. Такая постановка позволяет учесть инертность изменения коэффициента диффузии в зависимости от распределения температуры. В модельном случае считаем, что изменение температуры происходит на краях пластины и внутри нее, благодаря объемному тепловыделению.

Будем рассматривать одномерный модельный процесс. Пусть $\varphi(x, t)$ – концентрация вещества примеси в момент времени t , в точке x ; $T(x, t)$ – температура в момент времени t , в точке x . Будем считать, что $x \in [0; 1]$. Пусть, далее, D_0 – постоянный коэффициент теплопроводности. Так как процесс диффузии происходит в твердом теле, то необходимо учитывать, что атомы в твердом теле окружены потенциальным барьером. Чтобы атом мог покинуть свое место он должен обладать энергией активации ΔE_1 для преодоления потенциального барьера. Пусть $D(T)$ – коэффициент диффузии, который зависит от температуры T . Известно, что для функции

$D(T)$ справедливо уравнение Аррениуса: $\frac{D'(T)}{D(T)} = \frac{\Delta E_1}{kT^2}$, решение которого определяется формулой (1)

$$D(T) = D_1 e^{-\frac{\Delta E_1}{kT}}, \quad (1)$$

где D_1 – константа, не зависящая от температуры и определяемая свойствами вещества, ΔE_1 – энергия активации диффузии, зависящая от вида примеси, k – постоянная Больцмана.

Функция концентрации удовлетворяет линейному уравнению диффузии:

$$\frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(T(x, t)) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} \right). \quad (2)$$

В силу сохранения вещества примеси внутри кремниевой пластины используется предположение о нулевом диффузионном потоке на краях кремниевой пластины, то для уравнения (2) выполняются краевые условия Неймана (3):

$$\frac{\partial \varphi(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi(1, t)}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

Начальное распределение примеси считается известным, то есть задано начальное условие (4):

$$\varphi(x, 0) = f(x). \quad (4)$$

Функция $T(x, t)$ описывает распределение температуры в Кельвинах внутри твердого вещества и удовлетворяет неоднородному уравнению теплопроводности:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + b(x, t) T(x, t) + \Phi(x, t), \quad (5)$$

здесь $b(x, t)$ – коэффициент тепловыделения, $\Phi(x, t)$ – источник объемного тепловыделения, не зависящий от температуры образца вещества. При этом на краях образца твердого материала поддерживается заданный температурный режим:

$$T(0, t) = u_1(t), \quad T(1, t) = u_2(t). \quad (6)$$

Начальная температура $T(x, 0) = T_0(x)$ кремниевого образца считается заданной и выполняются условия согласования $T_0(0) = u_1(0)$, $T_0(1) = u_2(0)$.

Для поиска приближенного решения возникшей задачи используется неявная разностная схема и классический метод прогонки. В работе представлено описание численного алгоритма и точные расчетные формулы для решения дискретизированной параболической задачи. В качестве модельных примеров рассмотрен случай постоянных, экспоненциально убывающих, полиномиально растущих и разрывных коэффициентов. Представлены графические иллюстрации результатов моделирования.

Список литературы

1. Al-Amin M. and Murphy J. D. Combining Low-Temperature Gettering With Phosphorus Diffusion Gettering for Improved Multicrystalline Silicon. in IEEE Journal of Photovoltaics, Nov. 2017, vol. 7, no. 6, Pp. 1519-1527, doi: 10.1109/JPHOTOV.2017.2741100.
2. Емельянов И.Г., Миронов В.И. Термодиффузионная задача наводороживания стальной оболочечной конструкции // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – № 3. – Сс. 27–35. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.3.03

Физико-математическая модель для определения основных технологических параметров пароциклического воздействия на нефтяной пласт

Ковальчук Т. Н.¹, Гильманов А. Я., Шевелев А.П.

¹Тюменский государственный университет

e-mail: *t.n.kovalchuk@mail.ru*

В настоящее время доля традиционных запасов нефти сокращается. По этой причине становится наиболее актуальной разработка месторождений тяжелой нефти с помощью тепловых методов увеличения нефтеотдачи (МУН) [1]. Одним из наиболее распространенных тепловых МУН является пароциклическое воздействие (ПЦО), характеризующееся высокой тепловой эффективностью [2]. Один полный цикл ПЦО включает следующие этапы: закачка пара в пласт; остановка скважины на паротепловую пропитку; добыча нефти. Физико-математическое моделирование пароциклического воздействия, вычисление и оптимизация основных технологических параметров позволяют увеличить коэффициент извлечения нефти [3].

Одной из проблем является определение оптимальных параметров ПЦО с учетом изменяющихся давления, температуры, скорости и сухости пара при его движении к забою скважины. Поэтому в работе была поставлена цель разработать методику для оценки оптимальных времен закачки пара, выдержки на паротепловую пропитку и добычи нефти. Научная новизна работы состоит в том, что предлагается подход, позволяющий связать задачи транспортировки теплоносителя к забою скважины и определения оптимальных параметров пароциклической обработки пласта.

Для достижения поставленной цели применяется интегральный подход описания процесса пароциклического воздействия, который предполагает составление системы уравнений механики многофазных систем. Методика основана на использовании распределения температуры вдоль ствола скважины, полученного по данным кратковременных динамических температурных исследований. При этом ставятся две задачи: внутренняя и внешняя. Внутренняя задача включает в себя расчёт параметров теплоносителя при его движении вдоль ствола скважины от устья до забоя, а внешняя – определение температурного распределения в многослойной стенке скважины и пласте вдоль радиальной координаты. С учётом симметрии обе задачи решаются в одномерном приближении: внутренняя – с вертикальной осью координат, направленной вдоль оси скважины, а внешняя – с радиальной осью координат. При постановке математической модели вводятся следующие допущения: температура пароводяной смеси в сечении одинакова (приближение Ловерье); нестационарные эффекты не учитываются; используется односкоростная модель, пар не проскальзывает относительно воды; система находится на линии насыщения, поскольку парогенератор не способен создавать перегретый пар; газ считается идеальным; рассматривается двухфазное приближение.

Для решения систем уравнений применялись численные методы. Вычисление значений скорости, температуры, давления и сухости пара на оси скважины проводилось с помощью метода Эйлера при поставленных граничных условиях из системы уравнений механики многофазных систем; расчет дебита после воздействия – с помощью метода простой итерации.

В качестве результатов в работе получены: распределение температуры в многослойной стенке скважины и в породе (с учетом уточненного коэффициента теплопередачи породы при

известных температурах между слоями материалов скважины, воды и породы); функции распределения скорости, давления и сухости пара в зависимости от вертикальной координаты; оптимальные значения времени закачки теплоносителя, выдержки скважины на конденсацию и времени добычи нефти; максимальное значение дополнительной накопленной добычи нефти с учетом рассчитанных забойных параметров теплоносителя; паронефтяное отношение.

Список литературы

1. Еремин Н.А. Цифровые технологии извлечения запасов нетрадиционной нефти. Известия ТулГУ. Науки о Земле. Вып. 2. Геотехнология. 2022. 255 с. <https://doi.org/10.46689/2218-5194-2022-2-1-255-270>
2. Грушевенко Е. Перспективы развития третичных МУН в мире и в России. Skolkovo Moscow School of Management. 2021. 40 с.
3. Ковальчук Т.Н., Гильманов А. Я., Шевелёв А. П. Оптимизация технологических параметров при пароциклическом воздействии на нефтяные пласты. Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2020. Том 6, № 2 (22). С. 145–161. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2020-6-2-145-161>

Определение запрещенных зон распространения звуковых волн в гофрированных трубках на основе анализа устойчивости решения

Быков Н. В.¹,
¹РУТ (МИИТ)

e-mail: nik.bkv@gmail.com

Введение. Распространение звуковых волн в гофрированных трубках с газом или жидкостью обладает рядом интересных свойств. В частности, хорошо известно, что при наличии потока в трубке, можно зарегистрировать излучение звука из открытого конца трубки, частота которого зависит от скорости потока [1]. Это явление обусловлено излучением звука турбулентными вихрями в кавернах [2]. Такой режим подразумевает наличие волн достаточно короткой длины (в сравнении с диаметром трубки). Для длинных волн можно наблюдать возникновение запрещенных зон, что свойственно классическим периодическим структурам [3, 4].

Описание задачи. Если считать, что диаметр трубы достаточно мал по сравнению с периодом гофра, а также, что в трубке могут распространяться только продольные волны, течение жидкости или газа можно описывать в рамках квазиодномерных уравнений неразрывности и Эйлера:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho S) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v S) = 0,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0,$$

где ρ , v , P - плотность, скорость и давление среды, $S = S(x)$ - площадь поперечного сечения (периодическая функция).

Использование теории возмущений приводит к следующей системе безразмерных уравнений для малых возмущений первого порядка:

$$u'(z) + M(z)r'(z) + (S'(z)/S(z))u(z) - i\gamma r(z) = 0, \quad (1)$$

$$r'(z) + M(z)u'(z) + M(z)M'(z)r(z) + (M'(z) - i\gamma)u(z) = 0, \quad (2)$$

где z - безразмерная координата (в периодах гофра), $r(z), u(z)$ - медленно меняющиеся огибающие возмущений плотности и скорости, $M(z)$ - число Маха невозмущенного потока, γ - безразмерная постоянная распространения, i - мнимая единица.

Отметим, что при дальнейшей линеаризации этой системы уравнений относительно возмущений гофра и скорости потока можно прийти к уравнениям типа Хилла и Матье [5]. В частности, в этой работе показано, что первая запрещенная зона соответствует постоянной распространения в следующем диапазоне:

$$1 - \frac{\mu}{2} < \frac{\gamma}{1 - M^2} < 1 + \frac{\mu}{2},$$

где μ - безразмерная амплитуда гофра.

Метод решения задачи. Решения уравнений типа Хилла и Матъе, так же как и системы (1)-(2), содержат парные слагаемые вида $\exp(\pm in\beta z)$, которые в зависимости от действительной и мнимой частей β могут давать как периодические, так и возрастающие и затухающие решения. Как известно, чтобы отсечь неограниченно возрастающее аналитическое решение, необходимо потребовать обращения соответствующих констант перед экспонентами в ноль. В численном решении, однако, это может быть не так. В частности, решение уравнений (1)-(2) в полуограниченной трубке будет содержать как затухающие, так и возрастающие слагаемые, что приводит к возникновению параметрической неустойчивости - неограниченному экспоненциальному возрастанию решения по мере удаления от входа в трубку. Именно с этой точки зрения рассмотрена неустойчивость решения в работе [5]. Поскольку соответствующие экспоненты являются парными, это позволяет определять запрещенные зоны распространения волн как зоны, в которых численное решение неограниченно возрастает из-за параметрического резонанса.

Исследуем области устойчивости течения численно, решая уравнения (1) и (2) с начальными условиями и различными μ и γ в каждой точке сетки (μ, γ) размерностью 1000×1000 . Условие, при котором решение считается неустойчивым, состоит в том, что амплитуда $u(z)$ или $r(z)$ при $z = 1000$ более чем в 10 раз превышает соответствующую амплитуду на входе. Для ускорения процесса были проведены параллельные вычисления. Решая эту задачу для нескольких скоростей потока, получаем диаграммы устойчивости.

Результаты численных исследований. Полученные диаграммы показывают наличие областей параметрической неустойчивости численного решения, в которых звуковые волны распространяться не могут. При этом, чем больше амплитуда гофра, тем шире соответствующая зона. По мере возрастания числа γ ширины последующих запрещенных зон убывают. Наличие основного потока приводит к искажению диаграммы запрещенных зон. Таким образом, можно до некоторой степени управлять акустическими свойствами трубки за счет скорости основного потока.

Список литературы

1. Crawford F.S. Singing corrugated pipes // J. Acoust. Soc. Am. 1975. Vol. 58, № S1. P. S2-S2.
2. Rajavel B., Prasad M.G. Acoustics of corrugated pipes: A review // Appl. Mech. Rev. 2013. Vol. 65, № 5.
3. Lau F.J.P., Campos L.M.B.C. On the effect of wall undulations on the acoustics of ducts with flow // J. Sound Vib. 2004. Vol. 270, № 1-2. P. 361-378.
4. Hawwa M.A. Asymptotic wave speed estimation in weakly undulated ducts carrying mean flow // J. Sound Vib. Elsevier, 2015. Vol. 357. P. 245-252.
5. Bykov N. V., Pustovoit V.I. On the stability of fluid flow in a periodic channel // Dokl. Phys. 2010. Vol. 55, № 8. P. 409-414.

Моделирование цепочечных структур коллоидных частиц методами молекулярной динамики в условиях квазидвумерного конфайнмента

Насыров А. Д.¹, Крючков Н.П.¹, Шишков И.Н.¹,
¹МГТУ им. Н. Э. Баумана

e-mail: nasyrovartur151998@gmail.com

Эксперименты с коллоидными частицами во внешних вращающихся полях (электрических [1, 2] и магнитных [3, 4]), предоставляют уникальную возможность для изучения процессов самосборки, коллективной динамики, транспортных свойств на уровне отдельных частиц, в том числе представляют возможность по контролируемой самосборке как синтетических частиц, так и биологических [5] с целью формирования желаемых клеточных структур и тканей в интересах тканевой инженерии. Типичный эксперимент проводится на установке состоящей из конфайнмента - кюветы состоящей из двух подложек, между которыми находятся наблюдаемые частицы, 2 катушек Гельмгольца (для формирования вертикального поля). В зависимости от величины расстояния между подложками в экспериментальной кювете, можно добиться разных результатов в самосборке, в том числе самосборки в цепочечные (нитевидные) структуры. В данной работе с помощью компьютерного моделирования методами молекулярной динамики (МД), изучается процесс самосборки коллоидных частиц в нитевидные структуры во внешнем магнитном поле

Модель состоит из $N = 1600$ частиц, располагаемых на двух плоскостных уровнях, по оси Z на расстоянии r_z между уровнями, частицы могут перемещаться только в одном плоскостном уровне с периодическими граничными условиями. Частицы распределены между плоскостными уровнями в соотношении 1:1, $0.5 < \rho < 1$ плотность частиц на плоскостном уровне. Температура системы составила $T = 1$. Частицы движутся согласно уравнению броуновской динамики:

$$d\vec{r} = \frac{\vec{F}}{\gamma_t} dt + \sqrt{2k_b \frac{T}{\gamma_t}} d\vec{W}_t$$

Где \vec{F} общая сила действующая на частицу, γ_t – параметр демпфирования, T - температура системы. Внешнее магнитное поле учитывалось с помощью постоянного дипольного момента \vec{P} , направленного вдоль оси Z для всех частиц. Энергия E_{pp} диполь-дипольного взаимодействия определялась в соответствии с выражением:

$$E_{pp} = \frac{1}{r^3} (\vec{p}_i * \vec{p}_j) - \frac{3}{r^5} (\vec{p}_i * \vec{r}) (\vec{p}_j * \vec{r})$$

где \vec{p}_i, \vec{p}_j - дипольные моменты i -ой и j -ой частицы соответственно, \vec{r} - расстояние между ними. Для описания контактного взаимодействия, все частицы также взаимодействуют по отталкивающему потенциалу Вика-Чендлера-Андерсона (WCA6):

$$\varphi(r) = \begin{cases} 5 * 1.25^4 * \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + 1, & r \leq \sqrt{2} \\ 0, & r > \sqrt{2} \end{cases}$$

где ε - характерная магнитуа взаимодействия, σ - характерный диаметр частиц. Безразмерные единицы: $r/\sigma \rightarrow r, T/\varepsilon \rightarrow T$ использовались при моделировании в LAMMPS.

Проводился анализ полученных моделирований с применением метода идентификации отдельной цепочки, выполняемого с помощью отсечки по расстоянию r_d между исходной частицей и соседями по ячейкам Вороного. Расстояние r_d соответствует окончанию первого пика в парной корреляционной функции системы. Рассчитаны длины цепочек в зависимости от параметров моделируемой системы. Изучено влияние параметров конфайнмента и обнаружены разные типы структур квазидвумерных коллоидных систем, обнаружено, что данные МД имеют качественное совпадение с результатами экспериментов с коллоидными частицами во внешних магнитных полях.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 20-72-10161 и инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э.Баумана

Список литературы

1. Yakovlev E. V. et al. Tunable two-dimensional assembly of colloidal particles in rotating electric fields //Scientific reports. 2017. Vol. 7, no. 1. Pp. 1-10. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-14001-y>
2. Yakovlev E. V. et al. 2D colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions //Journal of Colloid and Interface Science. 2022. Vol. 608. Pp. 564-574. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2021.09.116>
3. Snezhko A., Aranson I. S. Magnetic manipulation of self-assembled colloidal asters //Nature materials. 2011. Vol. 10, no. 9. Pp. 698-703. <https://doi.org/10.1038/nmat3083>
4. Tracy J. B., Crawford T. M. Magnetic field-directed self-assembly of magnetic nanoparticles //MRS bulletin. 2013. Vol. 38, no. 11. Pp. 915-920. <https://doi.org/10.1557/mrs.2013.233>
5. E. Yakovlev, A. Troshina, S. Korsakova, K. Zaytsev, O. Cherkasova, V. Tuchin, and S. Yurchenko, "Colloidal Suspensions in External Rotating Electric Field: Experimental Studies and Prospective Applications in Physics, Material Science, and Biomedicine," Proc. SPIE, vol. 10716, p. 1071618-1, April 2018.

Проверка применимости интерполяционного метода для кристаллов с различными типами многочастичного взаимодействия

Денисенко И. Р.¹, Крючков Н.П.¹, Юрченко С.О.¹

¹МГТУ им. Н. Э. Баумана

e-mail: denisenkoir@student.bmstu.ru

Многочастичные взаимодействия (МВИ) широко распространены в природе, как в твердых телах, так и в жидкостях: макромолекулярные, молекулярные и коллоидные системы, глобулярные белки и металлы. Трехчастичные взаимодействия приводят к изменению структурных, динамических и термодинамических характеристик [1–3]. Они также играют все более важную роль в самосборке мягкой материи, где их можно использовать для получения новых эффектов и создания новых структур [4]. Тем не менее влияние МВИ на многие свойства систем конденсированных веществ остается слабо изученным. Это, в значительной степени, связано с вычислительной сложностью, возникающей при учете многочастичных взаимодействий в расчетах, поэтому разработка новых подходов к описанию свойств систем с многочастичными взаимодействиями имеет значительное влияние на фундаментальное понимание конденсированного вещества и мягкой материи.

Одной из ключевых структурных характеристик классических конденсированных систем является парная корреляционная функция $g(r)$. В случае классических кристаллов со слабым ангармонизмом, парная корреляционная функция может быть рассчитана из первых принципов при помощи интерполяционного метода кратчайших графов [5, 6]. В работе [7] этот метод был обобщен для случая многочастичного взаимодействия на примере кристаллов Ni, где эффективность обобщения была показана путем сравнения с результатами МД и с экспериментальными данными.

Целью данной работы является проверка обобщенного интерполяционного метода для других кристаллов с помощью моделирования методом МД. Были рассмотрены атомарные кристаллы Cu и Fe, а также трехмерные коллоидные кристаллы. Для моделирования металлов использовалась модель погруженного атома (Embedded atom model) [8], в этом случае полная энергия определяется выражением:

$$E = F_{\alpha} \left(\sum_{j \neq i} \rho_{\beta}(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

где $F(\rho)$ – функция погружения, $\rho(r)$ – электронная плотность, ϕ – потенциал парного взаимодействия, α и β соответствуют типам атомов i и j . Выражение для парного взаимодействия имеет свою уникальную форму для каждой модели [9].

Для описания коллоидных кристаллов использовалась следующая форма парных и трехчастичных потенциалов (нормированных на $\lambda_B K_B T / \sigma$) [10]:

$$\Omega^{(2)}(r_{ij}) = A^{(2)} \frac{\exp(-r_{ij}/\lambda_D)}{r_{ij}/\sigma}$$

$$\Omega^{(3)}(r_{ij}, r_{jk}, r_{ik}) = -A^{(3)} \frac{\exp(-\gamma L_{ijk})}{L_{ijk}/\sigma}$$

где $L_{ijk} = r_{ij} + r_{jk} + r_{ik}$, $A^{(2)} = 27$, $A^{(3)} = 53$ и $\gamma \simeq 0.39\bar{k}(0.8\sigma)^{-1} = (0.68\sigma)^{-1}$. Зарядовое число равно $\bar{Z} = Z\lambda_B/\sigma \simeq 4.57$, а параметр экранирования равен $\bar{k} = \sigma/\lambda_D \simeq 3.0$.

Моделирование методом молекулярной динамики (MD) было выполнено в каноническом NVT ансамбле с использованием пакета LAMMPS. Система состояла из 3.2×10^4 частиц. Плотность бралась при нормальных значениях ($\rho_{Cu} = 8.96 \text{ g/cm}^3$, $\rho_{Fe} = 7.87 \text{ g/cm}^3$) и $\rho_Y = 0.0109695\sigma^{-3}$. Симулирование длилось в течении 4×10^4 шагов, где первые 2×10^4 шагов были использованы для релаксации системы, а остаток для расчёта парной корреляционной функции $g(r)$. Интервал времени был выбран равным $\Delta t_{Cu,Fe} = 0.001 \text{ ps}$ и $\Delta t_Y = 0.05 \sqrt{\lambda_D^2 m / A^{(2)}}$. Радиус отсечки равен $r_c = 5 \text{ \AA}$ для металлов и $r_c = n^{-1/3}$ для коллоидных кристалла.

В результате показано, что обобщенный интерполяционный метод действительно позволяет описывать парные корреляционные функции классических кристаллов с многочастичными взаимодействиями разного типа. Показано, что обобщенный интерполяционный метод демонстрирует высокую точность при расчёте парной корреляционной функции в широком температурном диапазоне.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 20-72-10161 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Список литературы

1. P. Atkins, J. d. Paula, and J. Keeler, "Atkins' Physical Chemistry (11th Edition)" (University Press, Oxford, 2017).
2. P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, "Principles of condensed matter physics" (Cambridge University Press, 1995).
3. A. Fernandez-Nieves and A. M. Puertas, "Fluids, colloids, and soft materials: an introduction to soft matter physics" (Wiley, 2016).
4. E. V. Yakovlev, N. P. Kryuchkov, S. A. Korsakova, N. A. Dmitryuk, P. V. Ovcharov, M. M. Andronic, I. A. Rodionov, A. V. Sapelkin, and S. O. Yurchenko, "2d colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions," *Journal of Colloid and Interface Science* 608, 564–574 (2022).
5. S. O. Yurchenko, "The shortest-graph method for calculation of the pair-correlation function in crystalline systems," *The Journal of Chemical Physics* 140, 134502 (2014).
6. S. O. Yurchenko, N. P. Kryuchkov, and A. V. Ivlev, "Pair correlations in classical crystals: The shortest-graph method," *The Journal of Chemical Physics* 143, 034506 (2015).
7. L. A. Mistryukova, N. P. Kryuchkov, V. N. Mantsevich, A. V. Sapelkin, and S. O. Yurchenko, "Interpolation method for crystals with many-body interactions," *Physical Review B* 104, 054108 (2021).
8. Stukowski, B. Sadigh, P. Erhart, and A. Caro, "Efficient implementation of the concentration-dependent embedded atom method for molecular-dynamics and monte-carlo simulations," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17, 075005 (2009).
9. M. I. Mendeleev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, and M. Asta, "Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron," *Philosophical Magazine* 83, 3977–3994 (2003).
10. C. Russ, H. H. von Grunberg, M. Dijkstra, and R. van Roij, "Three-body forces between charged colloidal particles," *Physical Review E* 66, 011402 (2002).

О много- и гигацикловой усталости металлов и сплавов

Завойчинская Э. Б.¹, Каблин А.Р.

¹МГУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: elen@velesgroup.com

Кривая усталости определенной вероятности по уровням дефектности [Завой 2022] при симметричном одночастотном одноосном нагружении или сдвиге описывается функцией трех независимых переменных $\sigma_{max} = \sigma_{max}(N, \omega, T)$ (σ_{max} - максимальное напряжение, N - число циклов, ω - круговая частота, T - температура). Существует обширная литература по влиянию частоты на усталость материалов. Проведенный анализ позволяет считать температуру независимой переменной (В ряде экспериментов при охлаждении образцов наблюдалось влияние частоты нагружения.) При несимметричном цикле добавляется еще одна переменная – асимметрия цикла. В много- (в среднем, $N_f \in (10^4, 10^6)$ циклов до макроразрушения) и гигацикловой (в среднем, $N_f \in (10^6, 10^{11})$ циклов) областях кривая усталости по каждой из переменных является единой монотонной кривой. Для материалов, усталостные свойства которых зависят от частоты, кривые усталости будут различными в зависимости от частоты нагружения и, в общем случае, будут описываться разными уравнениями. У материалов, усталостные свойства которых не зависят от частоты (например, у многих никелевых сплавов) существуют единые кривые усталости по уровням дефектности. При заданной частоте нагружения у кривой усталости отсутствуют разрывы, «бифуркационные участки» (наличие которых полагал А.А. Шанявский и др. [1], «две ветви долговечности» (которые рассматривали Л.Р. Ботвина [2] и В.Ф. Терентьев [3]), и она не является «дуплексной кривой» (как ее представляли для сталей Лу Л. Шайозава и С. Ишихара). На известной диаграмме Х. Муграби представлены две разные кривые усталости при разных частотах для материала с зависящими от частоты усталостными свойствами: в многоциклового области при одной частоте, в гигацикловой области – при другой.

Наличие разных участков и разрывов кривой усталости в литературе связывается с различными физическими механизмами процесса усталостного разрушения. Проведенный анализ опытных данных для многих материалов показывает, что в многоциклового области образование микродефектов (хрупкое микроразрушение) и зарождение и развитие дислокаций и полос скольжения (неупругое деформирование и вязкое микроразрушение пластичных материалов) [4,5] реализуются с разной вероятностью и, как правило, на поверхности тела. На фрактограммах можно выделить как зону сдвигового разрушения, а именно область развития неупругих деформаций и вязкого разрушения с ямками, так и зону хрупкого разрушения отрывом.

В гигацикловой области в большей степени имеет место другой механизм зарождения микродефектов (хрупкого микроразрушения) от геометрических концентраторов структуры: в матрице, на границах зерен, от включений и др., в объеме тела с формированием области мелкогранулированной зернистой структуры “рыбий глаз” и образованием фасеток микроскопа. В литературе такое развитие связывается также со скоплением водорода в микропустотах объема тела. Этот механизм наблюдается у железа; низкоуглеродистых, нержавеющей, подшипниковых, пружинных сталей; титановых сплавов. При этом возможен и механизм хрупкого микроразрушения с поверхности тела в том случае, когда поверхность опережает внутренние объемы по накоплению микродефектов (например, как у литых Al-Si сталей, в опытах на кручение ряда сталей); у таких материалов, как правило, не обнаруживается предела

выносливости. К. Батиа с сотр. [6] в области гигацикловой усталости алюминиевых и магниевых сплавов "рыбьих глаз" не наблюдали. В многоцикловой области также возможен второй механизм зарождения хрупкого микроразрушения в объеме тела.

В результате анализа известных работ (см., например, [7-9]) для представительного класса материалов делается вывод о том, что оба механизма могут реализовываться при любой частоте (скорости нагружения) в зависимости от областей по долговечности. У материалов, усталостные свойства которых зависят от частоты, эти области могут зависеть от частоты нагружения.

Список литературы

1. Шаняевский А.А., Никитин А.Д., Palin-Luc T., Bathias C., Масштабная иерархия процессов малоцикловой, многоцикловой и сверхмногоцикловой усталости разрушения титанового сплава ВТ3-1, Физическая мезомеханика, т. 17, №4, С.59-68, 2014
2. Ботвина Л.Р. Кинетика разрушения конструкционных материалов, М.: Наука, 230 с., 1989
3. Терентьев В.Ф., Кораблева С.А., Усталость металлов, М.: Наука, 480 с., 2015
4. Завойчинская Э.Б., Общие закономерности и критерии разрушения твердых тел на разных масштабных структурных уровнях при длительном нагружении (обобщающая статья), Заводская лаборатория. Диагностика материалов, том. 88, №, 48-62, 2022
5. Zavoychinskaya E. B. On High- and Very High Cycle Fatigue of Metals and Alloys at Axial Loading // Structural Integrity, Springer Nature (Switzerland), V.24, p. 211-218, 2022
6. Bathias C., Paris P.C., Gigacycle fatigue in mechanical practice, New York: Dekker Publisher, 304 с., 2005
7. Jeddi D., Palin-Luc T., A Review About the Effects of Structural and Operational Factors on the Gigacycle Fatigue of Steels, Fatigue Fract Eng Mater Struct, v.41, pp. 969-990, 2018
8. Sakai T., Nakagawa A., Oguma N., Nakamura Y., Ueno A., Kikuchi S., Sakaida A. A review on fatigue fracture modes of structural metallic materials in very high cycle regime, International Journal of Fatigue v. 93, pp. 339-351, 2016
9. Christ H. J.(Ed.) Fatigue of Materials at Very High Numbers of Loading Cycles , Springer, 627 p. , 2018

Исследование траекторий движений заряженных микрокапель в электрических и газодинамических полях

Васильев А.А.^{1,2}, Громов И.А.², Кулешов Д.О.^{2,3}, Булович С.В.^{1,2}

¹СПбПУ Петра Великого

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³ИАП РАН

e-mail: hellchemist@mail.ru

К настоящему времени сформировалось и активно развивается новое направление в химии, известное как микрокапельная химия, предполагающее проведение химических реакций в микро- и нанокapлях, создаваемых различными методами, в том числе и электрораспылением жидкостей. Перспективной системой генерации заряженных микрокапель с помощью электрораспыления является система с транспортным противоэлектродом, описанная в работе [1]. Данная система обладает рядом преимуществ перед другими используемыми системами, однако для их эффективной реализации необходимо иметь модельные представления о движении заряженных микрокапель в электрических полях и воздушных потоках, которые позволят оптимизировать параметры работы системы.

В данной работе представлены результаты численного моделирования траекторий движений заряженных микрокапель в электрических и газодинамических полях. Формирование электрического поля происходит за счет разности потенциалов на транспортном противоэлектроде и капиллярах. Газодинамическая структура потока формируется с помощью кольцевой пристенной недорасширенной струи, истекающей из кольцевого капилляра. Подача раствора осуществляется через соосный круглый капилляр.

Для нахождения характеристик течения газа в капилляре и кольцевой струе использовалась система уравнений Навье-Стокса в осесимметричной постановке. Численное интегрирование выполнялось по методу контрольного объема. Для решения задачи использовался модуль ANSYS Fluent версии 2021R1. Моделирование турбулентности осуществлялось с помощью k- ω SST модели турбулентности. Для описания движения капель решалась траекторная задача. Для определения напряженности электрического поля в конфигурации игла – кольцо решена задача Лапласа для потенциала. Размерность использованной расчетной сетки ~140 тысяч ячеек.

Формирование кольцевой струи производилось за счет разницы давлений на входе в капилляр равной $\Delta p = 6; 4; 2; 1$ атм и атмосферой. Температура потока газа на входе в капилляр – 20°C. Электрическое поле было сформировано для двух вариантов значений разности потенциалов на капилляре и транспортном противоэлектроде: $\Delta\phi = 2,4; 5$ кВ. Компоненты вектора напряженности электрического поля были получены с помощью UDF для программного пакета ANSYS Fluent.

Для каждой комбинации электрического и газодинамического полей были рассмотрены постановки с двумя значениями диаметра капель: 30 мкм и 100 мкм; и соответствующими значениями заряда, равными $5.4 \cdot 10^{-13}$ Кл и $1.1 \cdot 10^{-12}$ Кл. Было принято, что за конусом Тейлора разлет капель происходит в телесном угле 90 градусов. Капли имели температуру $T = 300$ К и скорость равную 12 м/с. Суммарное количество моделируемых капель в квазистационарном состоянии – когда количество поступающих капель от источника находится в равновесии с

количеством капель покидающих расчетную область или осаждающихся на поверхности кольцевого противоиэлектрода – находилось в диапазоне от $8 \cdot 10^3$ до $4 \cdot 10^4$.

В случае при $\Delta p = 1; 2$ атм для микрокапель с диаметром 30 мкм воздействие сил Кулона оказывалось преобладающим и влекло как к значительному изменению траекторий движения, так и к осаждению доли частиц на транспортном противоиэлектроде. Для остальных значений разности давлений влияния сил Стокса оказывалось достаточным, чтобы поток газа увлекал за собой большинство капель. Полученные результаты характерны для всех рассмотренных значений разности потенциалов, при его уменьшении доля частиц, движущаяся к противои электроду, также уменьшалась.

Помимо этого, расчеты показали, что капли с диаметром 100 мкм оказались обладающими достаточным начальным импульсом, чтобы остаться недостижимыми со стороны электрического поля и быть лишь в разной степени, в зависимости от разности давлений, подверженными воздействию сил Стокса, разлетаясь с тем меньшим углом, чем больше было значение Δp .

Список литературы

1. Kuleshov D.O., Mazur D.M., Gromov I.A. et al. Journal of Analytical Chemistry. 2020. Vol.75, №13. P. 1647–1652.

Математическое моделирование основных эмиссионных характеристик полевого и термополевого электронных катодов сканирующих электронных микроскопов при исследовании биообразцов

Мамаева С. Н.¹, Соавтор Антонов С.Р.¹, Николаева Н.А.², Максимов Г.В.²

¹Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова

e-mail: *sargylana_mamaeva@mail.ru*

В настоящее время использование электронно-оптических систем на основе термополевых и полевых электронных катодов (ТПЭК и ПЭК) является наиболее перспективным в исследованиях поверхности, морфологии биообразцов для диагностики и терапии заболеваний, в том числе сканирующих электронных микроскопов (СЭМ) для исследования причин возникновения заболеваний и молекулярно-клеточных механизмов развития патологии [1-2].

Например, в исследованиях авторов морфологии эритроцитов крови пациентов с раком шейки матки (РШМ) методом СЭМ были обнаружены на поверхности эритроцитов сухих мазков крови нанометровые объекты, идентификация которых позволила бы внести существенный вклад в решении проблемы определения причин возникновения рецидивов РШМ и явления метастазирования, в разработке методов ранней диагностики [3]. Идентификация этих нанообъектов с помощью СЭМ требует улучшения качества изображения, которого можно было бы добиться при возможности получения электронных пучков СЭМ с характеристиками, подходящими для исследования морфологии биологических образцов. Для этого необходимо разработать математические модели электронных устройств на основе катодов и систем управления электронным пучком с различными вольт-амперными характеристиками (ВАХ) катода в зависимости от параметров электрического поля и электромагнитных линз с учетом формы и размеров инжекторов, пространственного заряда электронного пучка. В данной работе производится сравнение ВАХ ПЭК и ТПЭК на основе результатов численных экспериментов, проводимых на основе математических моделей их основных эмиссионных характеристик.

В качестве систем инжекции чаще всего используется диодная структура, которая состоит из источника заряженных частиц (катод) и объекта воздействия (анод). Такая система представляет собой простейший электростатический ускоритель, в котором за счет приложения разности потенциалов между катодом и анодом получается поток частиц с необходимой энергией. В СЭМ электронные пучки фокусируются магнитным полем для снижения абберации пучка. В качестве фокусирующей системы используются электромагнитные линзы, представляющие собой проволочные катушки.

В данной задаче электронной оптики для расчета эмиссионных характеристик ПЭК и ТПЭК форма поверхности эмиттеров аппроксимируются поверхностями второго порядка, а анод — частью эквипотенциальной поверхности. При построении физических и математических моделей полевого и термополевого диодов учитываются влияния на характеристики диодов пространственного заряда пучка. Экспериментальные исследования эмиссионных характеристик катодов, находящихся во внешнем магнитном поле, показывают существенное влияние на них магнитного поля. Также внешнее магнитное поле управляет и фокусирует пучок. Поэтому в этих моделях учитывается и влияние внешнего магнитного поля. В представляемых моделях электрическое поле играет двойную роль: в случае ТПЭК уменьшает работу выхода электронов с поверхности катода, а также ускоряет их; в случае ПЭК вызывает эмиссию электронов с

поверхности катода, а также ускоряет их. Для моделирования также вводится понятие «крайнего» электрона, траектория движения которого определяет форму и размер пучка. Итак, задача расчета эмиссионных характеристик вдоль траектории крайнего электрона решается с помощью математической модели, включающей следующие уравнения: движения крайнего электрона, Максвелла, непрерывности, Ричардсона-Дэшмана с учетом эффекта Шоттки в случае ТПЭК и Фаулера-Нордгейма в случае ПЭК, а также условия на границе пучок-вакуум для крайних электронов.

Полученные системы, состоящие из 18 обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, решаются с помощью численного метода Рунге-Кутты. В результате получаются траектории крайних электронов, определяющих форму и размер пучков, распределения плотностей зарядов и напряженностей электрических поле, анализ которых позволяет делать выводы для определения тех или иных преимуществ СЭМ на основе ПЭК и ТПЭК для исследования биообразцов.

Список литературы

1. Mestres-Ventura, P. (2007). Applications of Electron Microscopy in Medicine. *Imaging & Microscopy*, 9(3), 44–46. doi:10.1002/imic.200790179
2. Cohen Hyams T, Mam K, Killingsworth MC, Scanning Electron Microscopy as a New Tool for Diagnostic Pathology and Cell Biology, *Micron* (2019), doi: <https://doi.org/10.1016/j.micron.2019.102797>
3. Mamaeva SN, Kononova IV, Alekseev VA, Nikolaeva NA, Pavlov AN, Semenova MN, Maksimov GV. Determination of blood parameters obtained with SEM as a prototype model for evaluating the effectiveness of radiation therapy for cervical cancer. *International Journal of Biomedicine*. 2021;11(1):32-38. doi: 10.21103/Article11(1)_OA6

Наноструктурированные и тонкопленочные материалы

Фотокаталитические свойства диоксид титана, допированного оловом и серой

Чиркунова Н. В.^{1,2}, Дорогов М.В.¹

¹ИТМО

²Тольяттинский государственный университет

e-mail: *natchv@yandex.ru*

В целях преодоления энергетических кризисов, загрязнения окружающей среды и глобального потепления активно исследуется использование солнечной энергии с помощью фотокатализаторов [1–2]. Диоксид титана является перспективным фотокатализатором благодаря высокой эффективности, низкой стоимости, фотостабильности и нетоксичности [3–4]. Особенно привлекательны структуры TiO_2 с большой площадью поверхности в виде нанопорошков и нанопористых структур. При такой структуре скорость реакций, происходящих на поверхности полупроводника, может быть увеличена. Однако диоксид титана относится к широкозонным полупроводникам и его применение ограничено ультрафиолетовой частью спектра. Таким образом, для фотокаталитических реакций с диоксидом титана используется только небольшая доля солнечного света (3–5 %). Улучшение его фоточувствительности к видимому свету стало одной из наиболее важных целей в фотокаталитических и фотоэлектрических приложениях. Расширение спектральной области диоксида титана возможно за счет допирования ионами металлов и неметаллов. Например, допирование ионами металлов такими как Fe, Cr и Ni [5–6]. Альтернативный метод уменьшения ширины запрещенной зоны TiO_2 может быть реализован путем замены кислорода в решетке неметаллическими элементами, такими как C, N, F [7–8]. Отмечается, что при со-допировании активность образцов выше, чем при введении соответствующих примесей по отдельности.

В работе исследуются оптические и фотокаталитические свойства диоксида титана, допированного серой и оловом. Нанопорошок диоксида титана Degussa P25 с размерами частиц менее 50 нм механически смешивали с сульфатом олова (II) SnSO_4 при различных концентрациях 1–5 ат.% допирующих элементов в сумме с последующим отжигом при температуре 360 – 400° С в течении 6 – 18 ч. в атмосфере воздуха. Помимо допирования дополнительно реализуется механическая активация материала, которая так же оказывает влияние на фотокаталитические свойства. Также исследованы структурные, дисперсные и морфологические свойства полученных образцов. Химический состав исследовали с помощью энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного спектрометра, морфологию изучали с помощью сканирующей электронной микроскопии, ширину запрещенной зоны определяли на спектрофотометре с интегрирующей сферой, структуру исследовали методом рентгеновской дифракции.

Морфология полученных материалов в результате со-допирования практически не изменилась, частицы преимущественно сферической формы, диаметр наночастиц диоксида титана варьируется от 10 до 50 нм. На дифрактограмме полученных нанопорошков фиксируются рефлексы от анатаза и рутила, что подразумевает внедрение олова и серы в структуру диоксида титана. Съёмку спектров диффузного отражения образцов диоксида титана до и после допирования проводился в области длин волн 200–1200 нм с шагом 1 нм, анализ осуществлялся с использованием функции Кубелка–Мунка. Отмечено уменьшение ширины запрещенной зоной от 3.2 эВ (чистый диоксид титана) до 2.98 эВ (допированный оловом и серой 5 ат. %).

Образцы допированного оловом и серой TiO_2 исследовали на фотокаталитическую активность в классическом емкостном реакторе при разложении органического модельного загрязнителя метиленового синего (МС) в УФ и видимом диапазоне света. Концентрацию метиленового синего в водном растворе определяли с помощью спектрофотометрии. Согласно полученным данным коммерческий образец сорбирует метиленовый синий на поверхности, но при дальнейшем облучении видимым светом изменения концентрации МС не происходит. Для образца допированного 5 ат% время разложения МС составило 3 часа. Полученные фотокатализаторы обладают высокой фотокаталитической активностью при деградации модельного поллютанта.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор № 075-15-2021-1349)

Список литературы

1. I. Nabi, A. R. Bacha, F. Ahmad, L. Zhang. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9, p. 105964 (2021)
2. X. Cheng, Y. Shang, Y. Cui, R. Shi, Y. Zhu, P. Yang. *Solid State Science*, 99, p. 106075, (2020)
3. T. Y. Peng, D. Zhao, K. Dai, W. Shi, K. Hirao. *Journal Physics Chemistry*, 109, pp. 4947-4952, (2005)
4. G. N. Zhu, Y. G. Wang, Y.Y. Xia. *Energy Environmental Science*, 5(5), pp. 6652-6667, (2012)
5. E.V. Salomatina, D.G. Fukina, A.V. Koryagin, D.N. Titaev, E.V. Suleimanov, L.A. Smirnova. *J. of Environ. Chem. Eng.* 9, p. 106078, (2021)
6. Byung-Geon Park. *Gels*, 8, p. 14, (2022)
7. R. Jaiswal, J. Bharambe, N. Patel, Alpa Dashora, D.C. Kotharia, A. Miotello. *Applied Catalysis B: Environmental*. 168, pp. 333–341, (2015)
8. R. Asahi, T. Morikawa, H. Irie, T. Ohwaki. *Chem. Rev.*, 114, pp. 9824–9852, (2014)

Особенности статистических методов оценки механического поведения наноструктурированных высокопрочных полимерных материалов: критерии нормальности распределения прочности

Бойко Ю. М.¹, Марихин В.А., Мясникова Л.П.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: yuri.boiko@mail.ioffe.ru

В настоящее время благодаря разработке структурно-кинетического метода ориентационного упрочнения полимеров [1] удастся получить сверхпрочные и высокомодульные материалы с экстремальными значениями прочности при растяжении (до $s = 6$ ГПа) и модуля Юнга (до $E = 230$ ГПа), которые в сотни раз превосходят аналогичные значения для полимеров в неориентированном состоянии. Подобные нано-структурированные полимерные материалы, являющиеся «рекордсменами» по удельным (на единицу массы) характеристикам, очень перспективны при использовании в качестве армирующих элементов высокопрочных композитных изделий. Для обеспечения высокой надёжности эксплуатации данных материалов, особенно в изделиях специального назначения, необходимо разработать физически обоснованные и корректные методы определения статистически достоверных механических показателей. Несомненно, эти методы могут основываться на анализе только большого массива данных – десятки – сотни параллельных измерений на идентичных образцах. Несмотря на резкое увеличение трудоёмкости при большом количестве измерений, данный подход позволяет не только определить усредненные значения механических характеристик с высокой степенью достоверности, но и получить ценную информацию о характере их статистических распределений, что необходимо для лучшего понимания механизмов деформирования и разрушения. Данный подход был использован нами ранее [2] для анализа статистических распределений s ряда высокопрочных полимерных материалов в рамках моделей Вейбулла (критический характер протекания локализованных процессов на поверхности) и Гаусса (равновероятностный характер протекания процессов в объёме). Показано, что как архитектура цепи [полиэтилен сверхвысокой молекулярной массы (СВМПЭ), полиамид-6 (ПА-6) или полипропилен (ПП)], так и тип образца (индивидуальные пленочные нити или полифиламентные волокна, состоящие из нескольких сотен отдельных волокон), влияют на статистические параметры распределения s и на его наиболее корректный тип (Вейбулла или Гаусса).

Вместе с тем, в литературе предложен ряд и других подходов [3], позволяющих выявить дополнительные детали в нормальном распределении по Гауссу, которые нами ранее не рассматривались. Таким образом, целью данной работы является проведение впервые статистического анализа распределения прочности семи высокопрочных полимерных материалов, различающихся архитектурой цепи (СВМПЭ, ПА-6 и ПП) и типом образца (моно- или полифиламентные волокна), с использованием графиков нормальной вероятности, графиков квантиль-квантиль и ряда тестов нормальности: Колмогорова-Смирнова, Шапиро-Уилка, Лиллиефорса, Андерсона-Дарлинга, К-квадрата Д'Агостино и Чена-Шапиро [3]. Эти подходы позволяют детализировать механизмы деформирования и разрушения благодаря рассмотрению различных видов отклонений от классической функции Гаусса.

Показано, что соответствие кривых распределения s нормальному распределению, в том числе соблюдение линейности графиков нормальной вероятности (нормальные процентиля в

зависимости от s), более корректно для материалов со сравнительно невысокой прочностью (квазипластичные ПА-6 и ПП, $s < 1$ ГПа) по сравнению со сверхпрочными материалами (квазихрупкий СВМПЭ, $s = 2-6$ ГПа). Показано, что СВМПЭ и ПП демонстрируют более широкое распределение s по сравнению с ПА-6. В то же время, влияние типа образца (моно- или полифиламентное волокно) на это поведение оказалось несущественным. Установлено, что полученные в тестах такие теоретические критерии как “нельзя отклонить нормальность” не гарантируют, что соответствующие аппроксимирующие огибающие кривые гистограмм “функция плотности вероятности – прочность” будут представлять собой колоколообразные кривые Гаусса. На основании проведенных исследований оказалось возможным рекомендовать использование всего комплекса различных статистических подходов, обсужденных в настоящей работе, что является необходимым для более полной и корректной характеристики механического поведения высокопрочных полимерных материалов.

Список литературы

1. Marikhin V.A., Myasnikova L.P. Structural basis of high-strength high-modulus polymers. In: Oriented Polymer Materials / Ed. S. Fakirov. Huthig & Wepf Verlag-Zug, Heidelberg 1996, pp. 38–98.
2. Boiko Yu.M., Marikhin V.A., Myasnikova L.P. *Polymers* 2022, 14 (14), 2841.
3. Yap B.W., Sim C.H. *J. Statistical Comput. Simul.* 2011, 81, 2141–2155.

Селективная эпитаксия в системе GaInP-InP: выбор материала и размерные эффекты

Власов А. С.¹, К.М. Афанасьев¹, Н.А. Калужный¹, Д.В. Лебедев¹, А.В. Малевская¹, С.А. Минтаиров¹, Р.А. Салий¹, И.С. Мухин², А.М. Можаров², А.М. Минтаиров^{1,3}

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе

² Академический университет им. Ж.И. Алферова

³ Университет Нотр Дам, США

e-mail: vlasov@scell.ioffe.ru

Пространственно-контролируемый рост или селективная эпитаксия имеет высокий потенциал, как для прикладных применений, так и для фундаментальных исследований. Разработка технологии выращивания с пространственным контролем является довольно сложной задачей, поскольку она подразумевает необходимость в высоком качестве полупроводникового материала и предварительной обработки, что означает, что поверхность роста будет испытывать контакт с химическими веществами. Наши исследования показали, что большинство химреактивов, используемых для предварительной обработки поверхности роста, снижают интенсивность сигнала фотolumинесценции (ФЛ) квантовых точек (КТ) InP в системе InP/GaInP, что указывает на ухудшение качества материала (его загрязнение). InP КТ были выращены методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (MOVPE). Было показано, что наилучшей комбинацией, которая не снижает сигнал ФЛ квантовых точек, является пленка SiO₂ сформированная испарением электронным пучком и проявленная с помощью разбавленного травителя на основе HF. Показана важность стехиометрического состава пленки SiO₂ (метода напыления) и продемонстрировано, что включение кислорода в нижележащий полупроводник является причиной деградации структур.

Для формирования отверстий для роста квантовых точек была использована электронно-лучевая литография. Разработан двухэтапный процесс взрывной литографии, основанный на комбинации пленок SiO₂ / SiN_x. Метод основан на комбинировании плазмохимического (CF₄) и жидкостного методов травления и разнице в скоростях травления между SiO₂ и SiN_x. Использование двухэтапного травления позволило получить воспроизводимые апертуры менее 100 нм в слое SiN_x, который также обеспечивает стабильность сохранения качества полупроводникового материала.

Ростовые эксперименты показали необходимость ограничения температуры эпитаксии до 600 °С как ввиду нестабильности диэлектрической пленки, так и из-за изменения кинетики компонентов на маскированной поверхности. Обнаружено, что увеличение температуры роста приводит к изменению механизмов релаксации и образованию тороидально-подобных структур внутри апертуры. Зарегистрирован сигнал низкотемпературной фотolumинесценции непокрытых квантовых точек InP в апертурах из SiO₂ и SiN_x.

Формирование одиночных и гетероструктурированных нитевидных нанокристаллов на основе твердых растворов $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ на Si(111)

Кавеев А. К.^{1,2}, Фёдоров В.В.^{1,3}, Дворецкая Л.Н.^{1,3}, Федина С.В.^{1,3}, Мухин И.С.^{1,3}

¹СПбАУ РАН

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³СПбПУ Петра Великого

e-mail: kaveevandrei@yandex.ru

Одной из проблем, стоящих на пути развития электроники и информационных технологий, является проблема интеграции полупроводниковых соединений A_3B_5 и Si. Интеграция этих соединений позволит совместить возможности кремниевой интегральной технологии и возможности создания оптоэлектронных приборов на базе гетероструктур соединений A_3B_5 : оптических сенсоров, линий связи и обработки сигналов [1–3]. Вариантом решения данной проблемы является переход от гетероструктур планарной геометрии к гетероструктурам на основе нитевидных нанокристаллов (ННК) [4]. Привлекательными в данной области являются ННК на основе твердых растворов $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$. InAs является узкозонным полупроводником ($E_g=0.35$ эВ) и отличается высокой подвижностью носителей заряда $40.000 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ и большим временем жизни неосновных носителей, что обуславливает его широкое применение в СВЧ-транзисторах [5], а также в фотодетекторах ближнего ИК-диапазона (1.2-3.6 мкм) [6].

Показано, что на поверхности Si (111), покрытой тонким слоем окисла SiO_x , возможно формирование методом молекулярно-лучевой эпитаксии ННК твердых растворов $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ ($x<0.4$) по самоиндуцированному механизму. Центрами зарождения служат дефекты слоя SiO_x формирующиеся в процессе термического отжига. Плотность формирующихся массивов ННК зависит от температуры и возрастает с ее повышением. На начальном этапе роста формируются две структурных фазы, соответствующие двум типам объектов – трехмерным островкам с кубической структурой типа сфалерита и ННК с гексагональной структурой вюрцита. По мере увеличения размера ННК вклад фазы вюрцита возрастает. Эффективная диффузия адатомов In по боковой грани {11-20} гексагональной структуры и её малая поверхностная энергия способствует выраженному дальнейшему однонаправленному формированию $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ в виде ННК. Установлены эпитаксиальные соотношения: $[0001]_{\text{ННК}} \parallel [111]_{\text{Si}}$, $[11-20]_{\text{ННК}} \parallel [1-10]_{\text{Si}}$. При снижении парциального давления молекулярного пучка As_4 и возрастании парциального давления молекулярного пучка P_2 снижается скорость аксиального и увеличивается скорость радиального роста ННК. При этом удалось достичь стехиометрического состава ННК $\text{InAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}$. При возрастании количества фосфора возрастает количество материала, формирующего паразитный островковый слой вне ННК.

Изучено формирование гетероструктур $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{InAs}$ и показано, что при переходе от основания ННК, образованного InAs, к твердому раствору $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$, на начальном этапе формирование $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ происходит в области вершины ННК, а относительная скорость радиального роста в этот момент незначительна. Выявлена тенденция к радиальному росту с увеличением количества материала, однако при формировании тонких (<100 нм) сегментов

твердого раствора $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ и сохранении достаточно высокого парциального давления потока As_4 , можно снизить скорость нежелательного радиального роста и сформировать аксиальный гетеропереход. При этом присутствие потока As_4 ограничивает предельно достижимую концентрацию фосфора $x=0.1$. При $x=1$ показана возможность формирования широкозонной пассивирующей оболочки InP на ННК-ядре InAs за счет тенденции к аксиальному росту. Для формирования однородной по всей длине ННК оболочки InP необходимо снижение ростовой температуры до $400\text{--}420^\circ\text{C}$ и поддержание высоких значений потока фосфора, превышающих стехиометрическое в значение в 3.5 и более раз. Показано, что несмотря на значительное рассогласование решеток ядра InAs и оболочки InP ($\Delta a/a \sim 3.3\%$), при толщине оболочки до 12 ± 2 нм дефекты формируются только в области вершины ННК, а дефектов на радиальной гетерогранице ядро/оболочка не наблюдается. Выявлено, что структура оболочки полностью повторяет последовательность случайной упаковки ядра ННК. При этом решетка InAs , формирующая ядро ННК, сжимается в направлении роста ННК. Таким образом, формирование решеточно-рассогласованных аксиальных и радиальных гетеропереходов не приводит к ухудшению структурного совершенства, изменению огранки, или морфологии боковой поверхности ННК в системе $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{InAs}$.

Список литературы

1. Yonezu H., Furukawa Y. and Wakahara A., III-V epitaxy on Si for photonics applications *J. Cryst. Growth* 310 4757–62, 2008
2. Lucci I., Charbonnier S., Pedesseau L., Vallet M., Cerutti L., Rodriguez J. B., Tournié E., Bernard R., Létoublon A., Bertru N., Le Corre A., Renneson S., Semond F., Patriarche G., Largeau L., Turban P., Ponchet A. and Cornet C., Universal description of III-V/Si epitaxial growth processes *Phys. Rev. Mater.* 2 060401, 2018
3. Roelkens G., Liu L., Liang D., Jones R., Fang A., Koch B. and Bowers J., III-V/silicon photonics for on-chip and intrachip optical interconnects *Laser Photonics Rev.* 4 751–79, 2010
4. Mårtensson T., Svensson C. P. T., Wacaser B. A., Larsson M. W., Seifert W., Deppert K., Gustafsson A., Wallenberg L. R. and Samuelson L., Epitaxial III–V Nanowires on Silicon *Nano Lett.* 4 1987–90, 2004
5. Takase K., Ashikawa Y., Zhang G., Tateno K. and Sasaki S., Highly gate-tuneable Rashba spin-orbit interaction in a gate-all-around InAs nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistor *Sci. Rep.* 7 930, 2017
6. Robson M., Azizur-Rahman K. M., Parent D., Wojdylo P., Thompson D. A. and LaPierre R. R., Multispectral absorptance from large-diameter InAsSb nanowire arrays in a single epitaxial growth on silicon *Nano Futur.* 1 035001, 2017

Влияние электронного и ионного облучения на люминесценцию гексагонального нитрида бора

Петров Ю. В.¹, Вывенко О.Ф.¹, Гогина О.А.¹, Болотин К.², Ковальчук С.²

¹СПбГУ

²Free University of Berlin

e-mail: *y.petrov@spbu.ru*

Растущий в последнее время интерес к гексагональному нитриду бора (h-BN) обусловлен возможностью создания источников одиночных фотонов на основе точечных дефектов в этом широкозонном полупроводнике. В связи с этим необходимо детальное исследование его люминесцентных свойств, а также возможности их управляемого изменения. Одним из способов локального управления люминесцентными свойствами материалов является облучение сфокусированным ионным пучком, и предварительные результаты по влиянию облучения на свойства гексагонального нитрида бора показывают возможность как увеличения, так и уменьшения интенсивности отдельных полос люминесценции. В данной работе рассматривается влияние локального облучения ионами гелия и электронами на люминесцентные свойства h-BN.

Образцы гексагонального нитрида бора представляли собой тонкие слои, полученные методом эксфолиации из отдельного кристалла и перенесенные на подложку нитрида кремния на кремнии. Облучение ионами гелия проводилось с использованием гелиевого ионного микроскопа Zeiss Orion Plus, с энергией ионов 30 кэВ и дозами от $5 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ до $3 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Облучение электронным пучком проводилось с помощью сканирующего электронного микроскопа Zeiss Supra. Непосредственно в процессе облучения электронами проводилась регистрация катодолюминесценции на различных длинах волн с помощью системы регистрации катодолюминесценции Gatan MonoCL3.

В спектре люминесценции исходных образцов наблюдались полосы с энергиями 5,8 эВ, 3,9 эВ и 1,9 эВ, первая из которых приписывается непрямому экситону [1], а оставшиеся две соответствуют точечным дефектам, конкретная природа которых требует дальнейшего исследования [2,3]. Облучение ионами гелия приводило к росту концентрации центров безызлучательной рекомбинации, что выражалось в значительном уменьшении интенсивности люминесценции непосредственно после облучения. В ходе облучения электронным пучком наблюдались изменения интенсивности отдельных полос, характер которых, по-видимому, зависел от концентрации нарушений структуры материала. Так, в случае исходного нитрида бора, полученного из бариевого расплава при высоком давлении, не наблюдалось существенных изменений интенсивности пика 5,8 эВ, в то время как в случае образца, полученного методом газотранспортной реакции, происходило уменьшение интенсивности той же полосы, сопровождающееся ростом интенсивности полосы 3,9 эВ. При облучении электронами образца, предварительно облученного ионами гелия, наблюдался рост интенсивности полосы 1,9 эВ, в дальнейшем сменявшийся более медленным спадом, причем характерные постоянные времена как для роста, так и для спада интенсивности монотонно увеличивались при увеличении дозы предварительного облучения ионами гелия.

Таким образом, наблюдаемые изменения интенсивности люминесценции гексагонального нитрида бора свидетельствуют о том, что облучение ионным и электронным пучком может быть использовано для управления концентрациями как центров рекомбинации, так и центров

люминесценции различного типа, что в перспективе может быть использовано для управляемого локального создания отдельных центров люминесценции.

Работа выполнена с использованием оборудования Междисциплинарного ресурсного центра по направлению "Нанотехнологии" Научного парка СПбГУ. Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00067, <https://rscf.ru/project/23-22-00067/>

Список литературы

1. G. Cassabois, P. Valvin, B. Gil. *Nature Photonics*, том 10, 262, 2016 г.
2. A. Vokhmintsev, I. Weinstein, D. Zamyatin. *Journal of Luminescence*, том. 208, 363–370, 2019 г.
3. M.E. Turiansky, C.G. Van de Walle. *Journal of Applied Physics*, том. 129, 064301, 2021 г.

Structure of granular composites $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF})_{100-x}$

Трегубова Т. В.¹, Стогней О. В.¹, Макагонов В. А.¹, Каширин М. А.¹, Трегубов И. М.¹

¹ВГТУ

e-mail: *ttv1507@ya.ru*

Образцы гранулированных образцов с бескислородной диэлектрической матрицей системы $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF})_{100-x}$ получены методом ионно-лучевого распыления составных мишеней. В качестве подложек использовались ситалловые (СТ-50) и стеклянные подложки. В результате на поверхностях подложек происходило формирование тонких пленок. Толщина полученных пленок контролировалась с помощью интерферометра МИИ-4 и составила 1-3 мкм. Элементный состав контролировался с помощью сканирующего рентгеновского микроанализатора JXA-840. Концентрация металлической фазы исследуемой системы меняется в широком диапазоне ($14 \text{ ат.}\% \leq x \leq 52 \text{ ат.}\%$). Исследование структуры проводилось на дифрактометре BRUKER D2 Phaser.

Структура тонкопленочных нанокompозитов $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ исследована в широком диапазоне концентраций металлической фазы ($14 \leq x, \text{ ат.}\% \leq 52$). Исследованы фазовый и элементный состав в исходном состоянии.

Установлено, что структура металлической фазы композитов $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ кристаллическая, что обусловлено растворением Zr в диэлектрической матрице.

В композитах $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ при малом содержании металлической фазы на дифрактограммах присутствуют пики, соответствующие кристаллическому фториду MgF_2 . При увеличении концентрации металлической фазы появляются пики, относящиеся к кристаллическому сплаву CoFe. При получении композитов данной системы предполагалось, что структура металлической фазы будет аморфной, поскольку сплав является легко аморфизирующимся. Формирование кристаллического CoFe свидетельствует о том, что атомы циркония при осаждении на поверхность формирующейся пленки, не входят в состав металлической фазы, а взаимодействуют с атомами фтора, который входит в состав диэлектрической матрицы.

Компьютерное моделирование эпитаксиальных пленок Fe на подложке $Cu(100)$

Тихомиров И. В.¹, Белим С.В.¹

¹ОмГТУ

e-mail: ivtikhomirov@omgtu.tech

Методы определения поверхностного потенциала в последние десятилетия привлекли широкий исследовательский интерес. В частности, при напылении эпитаксиальных пленок, для нескольких первых слоев пленки, подложка оказывает существенное влияние на формирование кристаллической структуры пленки. Подложка действует как внешний периодический потенциал. Изменение положений атомов пленки влияет, в частности, на магнитные свойства пленки. Одним из методов исследования эпитаксиальных пленок является численное моделирование их кристаллической структуры с использованием межатомных потенциалов взаимодействия.

Эпитаксиальная система, представляющая собой ультратонкую пленку железа на медной подложке с поверхностью (100) , была выбрана для изучения из-за ее способности стабилизировать ГЦК-фазу, а также за совершенно новые ферромагнитные фазы железа при низких температурах [1,2]. В конце 1980-х годов было обнаружено, что сверхтонкие пленки Fe (толщиной менее 5 атомных слоев), выращенные на ориентированной (100) грани монокристаллов меди, являются ферромагнитными. С тех пор это наблюдение интерпретируется как прямое свидетельство присутствия в этих пленках гипотетической фазы ферромагнитного ГЦК-железа [3]. Помимо актуальности изучения тонких пленок эти численные эксперименты направлены на изучение взаимосвязи кристаллической структуры и магнетизма, что имеет все большее значение для разработки тонких магнитных пленок специального назначения.

В работе проведено численное моделирование кристаллической структуры поверхностных слоев медной подложки (100) и нескольких слоев эпитаксиальной пленки железа при низких температурах. Мы исходили из предположения, что при напылении первого слоя атомов железа на поверхность подложки, они займут положения минимумов потенциала взаимодействия с атомами поверхностных слоев меди. При расположении атомов следующего слоя учитывалось взаимодействие с атомами как подложки, так и предыдущих слоев атомов железа. Для задания взаимодействия использовался широко известный парный межатомный потенциал Леннарда-Джонса, имеющий два параметра: отрицательную амплитуду ϵ и характерное расстояние σ . Задание кристаллической структуры медной подложки проводилось согласно расположению атомов ГЦК-решетки с периодом решетки $3,615 \text{ \AA}$ и поверхностью, ориентированной в плоскости (100) . Параметры потенциала Леннарда-Джонса ϵ и σ для взаимодействия атомов Fe и Cu рассчитывались согласно правилам объединения Лоренца-Бертло. Эти правила являются наиболее широко применимыми и используются по умолчанию во многих пакетах молекулярного моделирования. Апробация метода и выбранных параметров потенциала Леннарда-Джонса проводилась для объемных образцов железа. Были получены минимумы энергии взаимодействия системы для ОЦК и ГЦК решеток с периодами, хорошо согласующимися с соответствующими значениями для альфа- и гамма-железа.

Согласно проведенным численным экспериментам, при напылении атомов железа на подложку они распределяются согласно кристаллической структуре ГЦК-решетки меди, образуя гамма-железо с периодом решетки $3,615 \text{ \AA}$. Известно, что у высокотемпературного гамма-железа

период ГЦК-решетки составляет $3,65 \text{ \AA}$, что соответствует относительной разнице с полученным результатом в 1% . Это позволяет нам сделать вывод, что при напылении ультратонких пленок железа на медную подложку при низких температурах, образуется гамма-железо с соответствующими свойствами.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 23-29-00108

Список литературы

1. A. Biedermann, M. Schmid, and P. Varga, Phys. Rev. Lett. 6, 464 (2001).
2. L. Sandoval, H.M. Urbassek, and P. Entel, New Journal of Physics 11, 103027 (2009).
3. L. Kaufman, E.V. Clougherty, and R.J. Weiss, Acta Met. 11, 323 (1963).
4. S.V. Belim, I.V. Tikhomirov, Journal of Physics: Conference Series 1901, 012103 (2021).
5. S.V. Belim, I.V. Tikhomirov, Scientific Reports 11(1), 21428 (2021).

Многоцикловое электроимпульсное нагружение аморфных сплавов на основе кобальта и железа

Федоров В. А.¹, Плужникова Т.Н.¹, Федотов Д.Ю.¹, Бойцова М.В.¹

¹ФГБОУ ВО "Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина"

e-mail: *fedorov-tsu.tmb@inbox.ru*

Перспективными материалами являются ленточные и объемные аморфные металлические сплавы, они используются в разных отраслях промышленности (от авиастроения до медицинских имплантов нового поколения), работают в различных режимах эксплуатации и подвергаются внешним воздействиям в широком интервале электромагнитного излучения. Однако, физико-механические свойства этих материалов, а также механизмы деформации в этих условиях остаются мало изученными.

В работе исследовались ленточные образцы аморфных сплавов на основе кобальта (содержание кобальта от 70 до 85%) и железа (содержание железа от 73 до 80%). Размеры образцов составляли $40 \times 3,5 \times 0,02$ мм.

Образцы подвергались одноосному растяжению на электромеханической машине Instron-5565 со скоростью движения траверсы 0,1 мм/мин.

В первой серии экспериментов, один образец из аморфного металлического сплава одноосно растягивали. На второй образец аморфного металлического сплава, находящегося на расстоянии 1 мм от деформированного образца, подавали импульсы электрического тока пилообразной формы с плотность тока от $7 \cdot 10^7$ до $5 \cdot 10^8$ А/м². Длительность импульсов составляла $\tau \sim 250$ до 500 мс. Частота варьировалась от $\nu = 0,5$ Гц до 2 Гц.

Экспериментально установлено, что на диаграммах нагружения $\sigma - \epsilon$ при пропускании импульсов электрического тока на недеформированный образец наблюдается значительное снижение механического напряжения на деформированном образце, с образованием сбросов механического напряжения на кривой нагружения. Величина сбросов зависит от плотности подаваемого импульсного тока, частоты и длительности импульсов. После окончания подачи импульсов кривая нагружения возвращается к первоначальному положению. Проведены эксперименты, в которых в качестве второго образца, на который подается электрический импульс, использовались кристаллические диамагнитные материалы (медь), ферромагнитные материалы (кремнистое железо), при тех же параметрах импульсного тока. Однако, использование этих материалов не показало изменения кривой нагружения на ленточных аморфных сплавах. Физическая природа наблюдаемых процессов требует дополнительного изучения.

Во второй серии экспериментов исследовалось изменение механических характеристик аморфных металлических сплавов в зависимости от количества подаваемых импульсов электрического тока. Отмечено, что при увеличении плотности тока электрического импульса, для всех исследуемых сплавов наблюдается линейное снижение предела прочности. Количество импульсов тока, пропущенных через образец до момента разрушения, с увеличением плотности тока напряжения также линейно уменьшается. Значение модуля Юнга при всех указанных режимах практически не меняется.

Электронная микроскопия после процесса разрушения показала, что у аморфных сплавов на основе железа и кобальта наблюдается образование складчатой структуры, а также развитой системы ветвления трещин. При увеличении плотности электрического тока до $5 \cdot 10^8$ А/м², на поверхности образцов, вблизи зоны разрушения наблюдаются локальные зоны оплавления, связанные, по-видимому, с разогревом локальных дефектов структуры при разрушении. При меньших значениях плотности тока таких эффектов не наблюдается. Микротвердость при указанных режимах воздействия электрического тока практически не меняется.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (номер проекта 22-22-00226).

Моделирование и расчет распределения минимального расстояния между УНТ с разной степенью ориентации в полимерной матрице

Васин С. В.¹, Сергеев В.А.^{1,2}

¹УФирЭ им. В.А.Котельникова РАН

²Ульяновский государственный технический университет

e-mail: svasin@ulireran.ru

Для описания физических свойств нанокомпозитов с углеродными нанотрубками важно иметь представление о характере распределения УНТ в полимерной матрице. Так, например, важнейшим параметром, определяющим электропроводность в моделях прыжковой проводимости нанокомпозитов является среднее расстояние между УНТ, а точнее характер распределения минимального расстояния между соседними УНТ [1,2]. Изменение ориентации (выравнивание в определенном направлении) УНТ в полимерной матрице, как известно, существенно меняет свойства нанокомпозитов [3,4]. При изменении ориентации УНТ в полимерной матрице очевидно будет изменяться и расстояние между ближайшими соседними УНТ. Однако в известных работах анализ изменения характера распределения минимального расстояния между УНТ в зависимости от их ориентации (упорядоченности) в полимерной матрице не проводился.

В основе используемой нами методики компьютерного моделирования лежит известный способ задания (генерации) случайного распределения УНТ, в репрезентативном полимерном кубоиде $L_x \times L_y \times L_z$ [1,2]. Каждая УНТ в такой модели может быть описана отрезком прямой. Начальные точки (x_i, y_i, z_i) УНТ генерируются следующим образом:

$$\xi_i = L_i \times rand \quad (\xi = x, y, z) \quad (1)$$

Здесь *rand* - равномерно распределенные случайные числа в интервале [0,1].

Длина l_i i -й УНТ подчиняется распределению Вейбулла [5], функция распределения которого имеет вид:

$$F(x) = 1 - e^{-(x/\lambda)^k} \quad \text{при } x \geq 0 \quad (2)$$

Таким образом, l_i может быть сгенерировано с помощью выражения:

$$l_i = F^{-1}(rand) \quad (3)$$

Соответствующие азимутальные углы φ_i и косинусы полярных углов θ_i также равномерно распределены в диапазонах $[0, 2\pi]$ и $[\cos(\theta_{max}), 1]$, соответственно, а именно:

$$\varphi_i = 2\pi \times rand, \quad \cos \theta_i = (1 - \cos \theta_{max}) \times rand + \cos \theta_{max} \quad (4)$$

Здесь, θ_{max} - максимальный угол выравнивания УНТ, используемый для оценки степени выравнивания. Если $\theta_{max} = \pi/2$, распределение УНТ изотропно. При $\theta_{max} = 0$ УНТ идеально упорядочены (ориентированы).

В случае если координаты конечной точки i -й УНТ $(x_i + l_i \cos \theta_i, y_i + l_i \sin \theta_i \cos \varphi_i, z_i + l_i \sin \theta_i \sin \varphi_i)$ выходят за границы репрезентативного кубоида, применяются периодические граничные условия, для имитации более крупной системы.

В предложенной модели УНТ добавляются в репрезентативный объем одна за другой. На каждом шаге вычисляется расстояние между новой УНТ и добавленными ранее. Эта задача представляет собой, по сути, нахождение минимального расстояния между двумя отрезками в трехмерном пространстве и неоднократно рассматривалась ранее [6]. В случае, если расстояние оказывается меньше диаметра УНТ, считается, что имеет место пересечение трубок, текущая УНТ отбрасывается и генерация новой УНТ повторяется с начала.

Для расчета распределения минимального расстояния между ближайшими соседними УНТ использовались следующие параметры: размер репрезентативного кубоида $6 \times 6 \times 6$ мкм, средняя длина нанотрубок ≥ 2 мкм, диаметр нанотрубок 30 нм, объемная концентрация УНТ – 1%.

Показано, что с увеличением степени ориентации УНТ характер распределения минимального расстояния между УНТ существенно изменяется (из экспоненциального становится логарифмически нормальным), а среднее минимальное расстояние между УНТ заметно возрастает. Предложенная методика и результаты расчета могут быть использованы для моделирования электропроводности, теплопроводности и других физических свойств полимерных нанокompозитов.

Список литературы

1. Hu N., Masuda Z., Yan C., Yamamoto G., Fukunaga H., Hashida T. The electrical properties of polymer nanocomposites with carbon nanotube fillers // *Nanotechnology*. 2008. Vol. 19, № 21.
2. Bao W.S., Meguid S.A., Zhu Z.H., Weng G.J. Tunneling resistance and its effect on the electrical conductivity of carbon nanotube nanocomposites // *J. Appl. Phys.* 2012. Vol. 111, № 9. P. 093726.
3. Vasin S. V., Nizametdinov A.M., Sergeev V.A., Efimov M.S. Structure and electrical conductivity of polyvinyl alcohol films with multi-walled carbon nanotubes, cured in a magnetic field // *Radioelectron. Nanosyst. Inf. Technol.* 2021. Vol. 13, № 4. P. 457–464.
4. Wang Y., Desroches G.J., Macfarlane R.J. Ordered polymer composite materials: Challenges and opportunities // *Nanoscale*. 2021. Vol. 13, № 2. P. 426–443.
5. Wang S., Liang Z., Wang B., Zhang C. Statistical characterization of single-wall carbon nanotube length distribution // *Nanotechnology*. 2006. Vol. 17, № 3. P. 634–639.
6. Lumelsky V.J. On Fast Computation of Distance Between Line Segments // *Inf. Process. Lett.* 1985. Vol. 21, № 2. P. 55–61.

Электронные и оптические свойства гетероструктуры графен/MoS₂

Винокуров П. В.¹, Балахнин А.В., Григорьев Ю.М., Шарин Е.П., Смагулова С.А.

¹Северо-Восточный федеральный университет

e-mail: *pv.vinokurov@s-vfu.ru*

Открытие графена, обладающего рядом уникальных свойств, сильно стимулировало интерес людей к исследованию двумерных материалов. Графен нашел широкое применение в разработке электронных устройств [1, 2]. Однако отсутствие запрещенной зоны у графена ограничивает его применение в электронике. В настоящее время большой интерес вызывает синтез двумерных материалов с полупроводниковыми свойствами. Семейством таких двумерных полупроводников являются дихалькогениды переходных металлов. Наличие запрещенной зоны позволяет использовать двумерные дихалькогениды переходных металлов для создания широкого класса различных электронных устройств. Объемные кристаллы дисульфида молибдена являются полупроводниками с непрямой запрещенной зоной, в то время как однослойные MoS₂ являются прямозонными. Прямозонная структура спектров тонких пленок дихалькогенидов переходных металлов обеспечивает высокий коэффициент поглощения и эффективную генерацию электронно-дырочных пар при фотовозбуждении, что делает монослойные пленки перспективными для оптоэлектронных приложений.

Вертикальная поэтапная укладка разных двумерных слоев на графеновую пленку дает возможность создания ван-дер-Ваальсовых гетероструктур [3], которые могут обеспечивать новые электронные и оптоэлектронные свойства, открывающие беспрецедентные возможности для фундаментальных исследований и практического применения. В последнее время большой интерес представляют гетероструктуры MoS₂/графен. Дисульфид молибдена является фоточувствительным элементом в гетероструктурах MoS₂/графен. Исследования оптических свойств в графен/MoS₂ гетероструктурах до сих пор отсутствуют. Гетерогенная структура графена имеет блестящие перспективы для приложений, а электронная структура MoS₂ с прямой запрещенной зоной является важным свойством для многих оптических приложений; поэтому в этой статье мы исследуем оптические свойства графен/MoS₂ на основе расчетов функционала плотности.

В данной работе были синтезированы домены и пленки из дисульфида молибдена методом химического осаждения из газовой фазы [4]. Для создания гетероструктур графен/MoS₂, выращенные пленки и домены были перенесены с использованием полимеров. Для идентификации полученных структур были сняты спектры комбинационного рассеяния и фотолюминесценции. В рамках теории функционала плотности были исследованы электронные, диэлектрические и оптические свойства гетероструктур графен/MoS₂. Получены зонная структура гетероструктуры графен/MoS₂, зависимость комплексной диэлектрической проницаемости от энергии, спектр комбинационного рассеяния гетероструктуры графен/MoS₂.

Список литературы

- 1.
2. Novoselov, K.S., Geim, A.K.; Morozov S.V., Jiang D.A., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* 2004, 306, 666–669.
3. Zhu H., Zhao L., Liu J., Xu S., Cai W., Jiang S., Zheng L., Su L., Xu J. Monolayer graphene saturable absorber with sandwich structure for ultrafast solid-state laser. *Opt. Laser. Technol.* 2015, 55, 081304.

4. Geim A. K., Grigorieva I. V. Van der Waals heterostructures. *Nature* 2013, 499, 7459, 419-425.
5. Smagulova S. A., Vinokurov, P. V., Semenova, A. A., Popova, E. I., Vasylieva, F. D., Obraztsova, E. D., Fedotov P.V., Antonova I. V. Study of the properties of two-dimensional MoS₂ and WS₂ films synthesized by chemical-vapor deposition. *Semiconductors* 2020, 54, 454-464.

Анализ молекулярной структуры и упаковки концевых групп в n-алканах разной чётности

Гурьева С. А.¹, Борисов А.К.¹, Марихин В.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *swet.gurjewa@gmail.com*

Нормальные алканы $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{n-2}\text{CH}_3$ являются представителями длинноцепочечных молекулярных кристаллов (ДМК) с наиболее простой химической структурой. Выявленные особенности полиморфного перестроения кристаллической структуры ДМК n-алканов при температурных фазовых переходах [1, 2] вызывают потребность в детальном исследовании этапов развития твердофазных переходов в зависимости от чётности n-алканов в связи с различием симметрии молекул и способов их укладки в ламелях с вертикальным и наклонным расположением цепей.

Для объяснения процессов, происходящих при твердофазном переходе, включая конформационные трансформации и видоизменение симметрии взаимной укладки молекул, необходимо выяснить строение тонкой прослойки, образованной ван-дер-ваальсовым контактом (ВДВК) концевых метильных CH_3 групп между молекулами в соседних ламелях.

Расчёты межламеллярного пространства базируются на длине молекулы, при вычислении которой авторы обычно не учитывают рассмотренные ниже факторы. Согласно [3], характерные параметры транс-зигзага молекулы n-алкана, а именно, длины С–С и С–Н связей, а также валентные углы углеродного скелета, на самом деле, несколько уменьшаются к концам молекулы. Это связано с влиянием CH_3 группы на остальную цепь, возмущение от которой, однако, затухает на ближайшей соседней метиленовой группе $\omega\text{-CH}_2$.

При расчёте общей длины молекулы также необходимо учесть специфику строения двух концевых CH_3 групп, в которых одиночные С–Н связи расположены в плоскости транс-зигзага и, следовательно, в длину молекулы внесут вклад их проекции на ось молекулы с учетом ван-дер-ваальсовых радиусов водорода.

Принимая во внимание перечисленные выше структурные особенности, получаем общую формулу длины цепи n-алкана в зависимости от числа углеродных атомов n :

$$L = 1.2835 \cdot n + 2.8965 \text{ (Å)}. \quad (1)$$

Выражение (1) справедливо для всех n-алканов, начиная с $n = 5$, поскольку в таком гомологическом ряду концевые группы оказывают схожее влияние на транс-зигзаг.

Выясним различия межламеллярного пространства в большинстве чётных и нечётных n-алканов. Известно, что n-алканы с чётным n ($6 \leq n \leq 26$) кристаллизуются в триклинной системе, тогда как с нечётным n ($9 \leq n \leq 45, 61, 65, 69$) – в орторомбической [4, 5], при этом у всех n-алканов около точки плавления проявляется либо истинная гексагональная фаза, либо её искажённая модификация. Чётно-нечётные различия молекул в основном проявляются в упаковке концевых групп вследствие различных типов симметрии молекул.

На основании литературных данных для параметров элементарных ячеек (main cell) (a , b , c) [6, 7] и оценок длин молекул по (1), на примере трикозана $C_{23}H_{48}$ и тетракозана $C_{24}H_{50}$, определена глубина ВДВК концевых групп соседних молекул в орторомбической ячейке: $R_{ВДВ} = L - c/2 = 1.27 \text{ \AA}$ и в триклинной ячейке вдоль оси молекулы: $R_{ВДВ} = L - c = 1.20 \text{ \AA}$. В триклинной ячейке необходимо найти истинную глубину ВДВК вдоль оси ламели с учётом наклона молекул. На основании параметров и углов триклинной ячейки удалось рассчитать угол между осью молекулы и осью ламели $\varphi = 21.48^\circ$, а на основании координат концевых атомов углерода [7] – между одиночной концевой С–Н связью и ламеллярной осью $\theta = 24.95^\circ$. Таким образом, найдена глубина ВДВК вдоль оси ламели $R_{ВДВ \text{ на лам. ось}} = L^* - h = 1.59 \text{ \AA}$, где L^* и h – проекции длины наклонной молекулы и параметра c на ось ламели.

Сравнение рассчитанных глубин проникновения ламелей друг в друга подтверждает, что триклинная упаковка является наиболее плотной для ДМК [8], поскольку большая глубина ВДВК концевых групп свидетельствует о более узком межламеллярном пространстве. Наши расчёты согласуются с рассмотрением плотности упаковки концевых групп в наклонных и вертикальных цепях [4], а также с оценками расстояний между плоскостями концевых метильных групп соседних ламелей [9]. Проведённый анализ межламеллярных прослоек в n -алканах разной чётности позволяет на количественном уровне рассматривать изменения структуры n -алканов на молекулярном и надмолекулярном уровнях организации при фазовых переходах.

Список литературы

1. В.А. Марихин, С.А. Гурьева, Л.П. Мясникова, Б.З. Волчек, Д.А. Медведева, ФТТ, **61** (10), 1831 (2019).
2. D. Cholakova, N. Denkov, Advances in Colloid and Interface Science, **269**, 7 (2019).
3. J.N. Scarsdale, H.L. Sellers, L. Schäfer, N.L. Allinger, Journal of Computational Chemistry, **3** (2), 269 (1982).
4. M.G. Broadhurst, J. Res. Natl. Bur. Stand., **66A** (3), 241 (1962). DOI: 10.6028/jres.066a.024.
5. A.-J. Briard, M. Bouroukba, D. Petitjean, N. Hubert, M. Dirand, Journal of Chemical and Engineering Data, **48** (3), 497 (2003).
6. A.E. Smith, J. Chem. Phys., **21**, 2229 (1953).
7. S.C. Nyburg, J.A. Potworowski, Acta Cryst., **B29**, 347 (1973).
8. А.И. Китайгородский. Молекулярные кристаллы. — М.: «Наука», 1971. — 424 с.
9. V. Chevallier, D. Petitjean, V. Ruffier-Meray, M. Dirand, Polymer, **40** (21), 5953 (1999).

Формирование рассеивающего свет микрорельефа при атомно-слоевом осаждении диэлектрика на наноструктурированные пленки оксида индия-олова

Аксенова В. В.¹, Смирнова И.П.¹, Марков Л.К.¹, Павлюченко А.С.¹, Колоколов Д.С.², Меш М.В.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ²АО "СКТБ Кольцова"

e-mail: valeriyaakse@gmail.com

При изготовлении пленочных источников света (светодиодных, дисплейных структур) одной из часто возникающих проблем является низкая эффективность вывода света за счет эффекта полного внутреннего отражения на границе раздела светоизлучающих слоев и прилегающих прозрачных материалов. Свет, излучаемый под углами больше угла полного внутреннего отражения, поглощается в активном слое, снижая эффективность прибора. Для увеличения доли выводимого света на границах активного слоя создается рассеивающий свет рельеф, увеличивающий долю света, выводимого наружу. Такой рельеф может быть заранее сформирован на подложке [1-3], создан в процессе выращивания активных слоев или получен на постростовой стадии травлением или нанесением структурированных слоев [4]. В данной работе решается проблема вывода света из слоя люминофора электролюминесцентных дисплеев, заключенного между двумя слоями диэлектрика. У большинства применяемых материалов слоя люминофора показатель преломления относительно высок ($n(\text{ZnS})=2,3-2,4$, $n(\text{CdS})=2,5$), в то время как показатель преломления слоев диэлектрика имеет более низкие значения ($n(\text{Al}_2\text{O}_3)=1,76$, $n(\text{SiO}_2)=1,45$). Применение слоев диэлектрика с более высоким показателем преломления приводит к возникновению проблемы вывода света в более низкоиндексные окружающие слои. Таким образом, часть света оказывается запертой в активном слое и не выводится из него в плоскопараллельной геометрии слоев.

В данной работе представлен метод создания рассеивающего свет рельефа на стадии формирования нижнего слоя диэлектрика при изготовлении электролюминесцентных ZnS дисплеев. В качестве нижнего подслоя использовался наноструктурированный слой оксида индия-олова (ИТО), представляющий собой расположенные преимущественно перпендикулярно к подложке нитевидные нанокристаллы. Слой ИТО наносился методом электронно-лучевого испарения из гранул ИТО на предварительно нагретую подложку из стекла ВК-7 и дополнительно подвергался отжигу в атмосфере азота. Далее, слой Al_2O_3 наносился методом атомно-слоевого осаждения в установке Picosun P-300B. Нанесение методом атомно-слоевого осаждения происходит циклически при поочередном напуске триметилалюминия (ТМА) и воды. При этом образование пленки Al_2O_3 происходит послойно на всей поверхности нанокристаллов. Поскольку высота нанокристаллов имеет разброс при осаждении Al_2O_3 формируется рельеф на поверхности получаемой пленки с характерным масштабом около 0,5 мкм, что несколько превосходит длину волны видимого излучения в активных слоях электролюминесцентных дисплеев. Таким образом, получаемый рельеф позволяет создать эффективную рассеивающую свет структуру, способствующую повышению эффективности вывода света. Для исследования процесса формирования рассеивающего свет рельефа были изготовлены пленки с различными толщинами слоя Al_2O_3 , получены РЭМ-изображения сколов сформированных пленок, а также измерены диаграммы направленности рассеяния света на них.

Список литературы

1. Z. Lin, H. Yang, S. Zhou, H. Wang, X. Hong, and G. Li, Pattern Design of and Epitaxial Growth on Patterned Sapphire Substrates for Highly Efficient GaN-Based LEDs, *Cryst. Growth Des.* 12, 2836, 2012.
2. S. Zhou, H. Hu, X. Liu, M. Liu, X. Ding, C. Gui, S. Liu, and L. J. Guo, Comparative Study of GaN-Based Ultraviolet LEDs Grown on Different-Sized Patterned Sapphire Substrates with Sputtered AlN Nucleation Layer, *Jpn. J. Appl. Phys.* 56, 111001, 2017.
3. L. K. Markov et al., A Light-Emitting Diode Based on AlInGaN Heterostructures Grown on SiC/Si Substrates and Its Fabrication Technology, *Tech. Phys. Lett.* 48, 31, 2022.
4. L. K. Markov, I. P. Smirnova, M. V. Kukushkin, and A. S. Pavluchenko, Combination of Reactive-Ion Etching and Chemical Etching as a Method for Optimizing the Surface Relief on AlGaInN Heterostructures, *Semiconductors* 54, 2020.

Оптимизации толщины слоя алюминия в процессе металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации кремния

Волковойнова Л. Д.¹, Сердобинцев А. А.¹

¹СГУ им. Н. Г. Чернышевского

e-mail: *loris.volkoff@gmail.com*

В настоящее время большой интерес вызывает разработка новых методов формирования пленок поликристаллического кремния на легкоплавких подложках [1]. Использование легкоплавких подложек позволяет создавать гибкие электронные устройства на основе кремния, что позволит расширить область возможного применения данных устройств. Для упрощения и удешевления процесса кристаллизации был разработан оригинальный метод металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации аморфного кремния на полиимидных пленках [2]. Суть метода заключается в использовании инфракрасного лазера с длиной волны 1064 нм для воздействия на тонкий слой металла, нанесенный на слой аморфного кремния. Слой металла поглощает энергию лазерного излучения и передает ее слою кремния, вызывая его кристаллизацию. Для снижения температуры образования кристаллического кремния используется механизм алюминий-индуцированной кристаллизации [3]. Целью данной работы было определить оптимальную толщину слоя алюминия для кристаллизации 1 микрона аморфного кремния на полиимидной подложке.

Для изучения влияния толщины слоя алюминия на степень кристаллизации кремния была создана серия образцов с толщинами алюминия 50 нм, 100 нм, 200 нм, 300 нм, 400 нм и 500 нм. На каждом образце было обработано лазером по 5 участков со скоростями перемещения лазерного луча 100 мм/с – 300 мм/с с шагом 50 мм/с. Другие параметры лазерного излучения были постоянны: мощность излучения 0,2 Вт, частота излучения 99 кГц, длительность импульса 100 нс.

В ходе исследования было определено, что оптимальные режимы располагаются в диапазоне толщин алюминия 100-300 нм и при скорости перемещения лазерного луча 150 мм/с. При данных параметрах доля кристаллизованной фазы в образце в среднем составила 80%.

При толщине слоя алюминия 50 нм энергия, переданная кремнию, оказалась настолько большой, что кремний испарился с подложки. При толщине 500 нм энергии оказалось недостаточно для удаления всего слоя алюминия. Таким образом при увеличении толщины слоя алюминия необходимо снизить скорость движения лазерного луча, чтобы в одну точку попадало больше импульсов, что увеличит передаваемую энергию. При уменьшении толщины слоя алюминия, наоборот, необходимо уменьшить количество импульсов, падающих на один участок образца, а значит увеличить скорость движения лазерного луча.

Наилучший результат показал образец с толщиной 100 нм при скорости обработки 150 мм/с, поскольку исследования показали, что кремний при данных параметрах полностью кристаллизован.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00047, <https://rscf.ru/project/23-22-00047/>.

Список литературы

1. N. Vouroutzis, J. Stoemenos, N. Frangis, G.Z. Radnóczy, D. Knez, F. Hofer, B. Pécz, Structural characterization of poly-Si Films crystallized by Ni Metal Induced Lateral Crystallization // *Sci. Rep.*, 9, pp. 1–8, (2019);
2. A.A. Serdobintsev, V.A. Luzanov, I.O. Kozhevnikov, P. V. Ryabukho, D.M. Mitin, D.N. Bratashov, A. V. Starodubov, A.M. Pavlov, Thin amorphous silicon films crystallization upon flexible substrates // *J. Phys. Conf. Ser.*, 1400 (2019) 055034.
3. Z. Wang, L.P.H. Jeurgens, E.J. Mittemeijer, eds., *Metal-Induced Crystallization*, Taylor & Francis Group, LLC, Boca Raton (2015).

Композиты на основе углеродных материалов и оксидов металлов для гибридных суперконденсаторов

Несов С. Н.¹, Стенькин Ю.А.², Болотов В.В.^{1,2}, Матюшенко С.А.^{1,2}

¹Omsk State Technical University

²FSBIS Omsk Scientific Centre of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

e-mail: *nesov55@mail.ru*

В работе исследуются структура и основные электрохимические характеристики композитов на основе многостенных углеродных нанотрубок (производство ИК СО РАН), оксида марганца и технического углерода различных марок для применения в качестве электродов гибридных суперконденсаторов. Суперконденсаторы - электрохимические источники тока, обладающие высокими значениями удельной емкости, быстрой скоростью заряда и разряда, высокой циклической стабильностью [1]. Традиционно применяемые для производства электродов суперконденсаторов углеродные материалы запасают заряд за счет формирования двойного электрического слоя на границе контакта поверхности электрода с электролитом. Таким образом значение их удельной емкости определяется удельной площадью поверхности. Дополнительно повысить емкостные характеристики можно внедрением в углеродную матрицу оксидов переходных металлов [2]. Они обеспечивают дополнительное запасание заряда за счет протекания обратимых окислительно-восстановительных реакций при взаимодействии с ионами электролита (псевдоемкость). Одним из наиболее доступных и перспективных материалов в данном случае является оксид марганца, который обладает высоким теоретическим значением удельной емкости. Существенно ограничивающим фактором его применения в производстве электродов суперконденсаторов является достаточно высокое электросопротивление. Композиты на основе углеродных материалов и данного оксида способны сочетать в себе и характеристики необходимые для достижения высоких характеристик электродов (высокие удельная емкость, проводимость и удельная площадь поверхности).

Технический углерод, как правило, обладает глобулярной структурой и равномерное распределение наночастиц и слоев оксида металла по объему или поверхности глобул является достаточно сложной задачей. В то же время хорошо изучены методы синтеза композитов на основе углеродных нанотрубок и оксида марганца, которые позволяют добиваться равномерного распределения оксидного компонента в углеродной матрице в виде слоев или наночастиц с различными размерами и морфологией [1,2]. В работе предложено применять композиты на основе многостенных углеродных нанотрубок и оксида марганца (МУНТ/MnO_x) в качестве электрохимически активной добавки к различным маркам технического углерода для повышения электрохимических характеристик. Для синтеза композитов был использован метод гидротермального синтеза. Структура композитов исследовалась с помощью методов электронной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной микроскопии. Электрохимические характеристики электродов на основе полученных композитных материалов изучались с применением методов циклической вольтамперометрии и гальваностатического заряда-разряда.

Показано, что удельная емкость электродов, изготовленных на основе МУНТ, а также ТУ составляет порядка 25 Ф/г при плотности тока 0.2 А/г. При этом удельная емкость электродов на основе композита МУНТ/MnO_x, а также композита с 10 % добавкой ТУ превышает значение

100 Ф/г при указанной плотности тока. Установлено, что увеличение количества ТУ до 50% в составе электродов приводит к некоторому снижению удельной емкости материалов. Однако, при этом наблюдается заметная стабилизация емкостных характеристик материала при увеличении разрядного тока. Анализ циклической стабильности композитных электродов показал сохранение не менее 95% удельной емкости после 1000 циклов заряда-разряда. Проведенные исследования показали, что сформированный композит на основе МУНТ и оксида марганца может применяться как в качестве основы для производства электродов суперконденсаторов с повышенной емкостью, так и в качестве активной добавки к различным маркам ТУ, изменяющей электрохимические характеристики в широком диапазоне.

Работа выполнена в рамках проекта программы "Приоритет 2030" (ОмГТУ)

Список литературы

1. F. Bu, W. Zhou, Yihan Xu, Yu Du, C. Guan, W. Huang / Recent developments of advanced micro-supercapacitors: design, fabrication and applications // *npj Flex Electron* **4**, 1-16 (2020).
2. C. An, Y. Zhang, H. Guo, Y. Wang / Metal oxide-based supercapacitors: progress and perspectives // *Nanoscale Adv.* **1**, 4644–4658 (2019).

Электрохимические характеристики композитов полианилина с многостенными углеродными нанотрубками, декорированными оксидом марганца

Лобов И. А.¹,
¹ОНЦ СО РАН

e-mail: LI__87@mail.ru

Композиты полианилина (ПАНИ) с углеродными нанотрубками (УНТ) являются перспективными материалами для электрохимических приложений. ПАНИ обладает высоким значением псевдоёмкости за счёт возможности протекания в нём окислительно-восстановительных реакций. Добавление даже небольшого количества УНТ приводит к значительному увеличению электропроводности, удельной площади поверхности и механической прочности. Однако проблема циклической стабильности и утечки заряда остаётся актуальной. Сами по себе УНТ обладают слабыми ёмкостными характеристиками. Декорирование поверхности УНТ оксидами марганца позволяет повысить удельную ёмкость в несколько раз. Добавление оксида рения позволяет повысить скоростные характеристики за счёт увеличения доли Mn(IV) [1]. Можно предположить, что подобное модифицирование нанотрубок может оказать положительный эффект и на композиты с ПАНИ. Стандартный синтез композитов ПАНИ осуществляется путём *in-situ* полимеризации анилина в соляной кислоте. Известно, что соляная кислота активно реагирует с оксидами марганца, поэтому в данной работе вместо неё использовалась рениевая кислота (HReO₄).

Коммерчески произведённые многостенные УНТ (МУНТ) вымачивали в 56% водном растворе азотной кислоты в течение 1 минуты для повышения гидрофильности. Формирование МУНТ@MnOx осуществлялось методом простого гидротермального синтеза в водном растворе перманганата калия с последующим отжигом при 500°C в вакуумной печи для изменения структуры и фазового состава оксида марганца. Композит ПАНИ@Re/МУНТ@MnOx (I) получали методом химической окислительной полимеризации анилина в 1М водном растворе HReO₄ при 0°C. В качестве окислителя выступал пересульфат аммония. Массовая доля нанотрубок по отношению к анилину: 10%. Для оценки вклада оксида марганца в композите на электрохимические характеристики был синтезирован композит ПАНИ@Re/МУНТ (II) при тех же условиях.

Исследование ЦВА осуществлялось в трёхэлектродной ячейке при скоростях развёртки от 1 до 100 мВ/с в диапазоне напряжений от 0 до 800 мВ. В качестве электролита выступала 1М HCl. Форма кривых типичная для полианилина с локальными максимумами, соответствующими переходам между различными окислительными формами полимера. Удельная ёмкость при скорости развёртки 1 мВ/с составляет 296 Ф/г и 275 Ф/г для ПАНИ@Re/МУНТ@MnOx и ПАНИ@Re/МУНТ, соответственно. Испытания композитов в зарядно-разрядном режиме проводились при токах от 0,5 до 5 А/г. Композит (I) имеет в полтора-два раза большую ёмкость по сравнению с композитом с не модифицированными МУНТ (317 Ф/г против 225 Ф/г при 0,5А/г; 224 Ф/г против 102 Ф/г при 5А/г). Испытания саморазряда показали падение напряжения на 5% для композита (I) и 20% для композита (II) за 1 час. Таким образом, декорирование МУНТ оксидом марганца снижает просадку ёмкости при увеличении плотности тока гальваностатического разряда композитов с ПАНИ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10030, <https://rscf.ru/project/23-22-10030/>.

Список литературы

1. Korusenko, P.M.; Nesov, S.N. Composite Based on Multi-Walled Carbon Nanotubes and Manganese Oxide with Rhenium Additive for Supercapacitors: Structural and Electrochemical Studies. *Appl. Sci.* 2022, 12, 12827. <https://doi.org/10.3390/app122412827>

Влияние соотношения компонентов в гетерогенном материале CdS-PbS на его фотоэлектрические характеристики и их стабильность во времени

Козловский А.В.¹, Чуфарова Н.А.², Байбикова Д.Р.¹, Сердобинцев А.А.¹, Стецюра С.В.¹

¹СГУ имени Н.Г. Чернышевского

²УрФУ имени Б.Н. Ельцина

e-mail: *kozlowsky@bk.ru*

Полупроводниковые материалы и структуры на основе сульфидов металлов занимают важное место в современной электронике, что связано с разнообразием их электрических и оптических свойств. Одним из таких соединений является CdS, который применяется в фотоэлектрических преобразователях и других устройствах микро- и оптоэлектроники. Однако фотодegradация полупроводников группы A^2B^6 приводит к недолговечности приборов на их основе [1].

Стабильность фотоэлектрических характеристик и дegradационная стойкость поликристаллических пленок A^2B^6 увеличивается при добавлении соединений группы A^4B^6 , например PbS. Ранее такие исследования проводились на образцах с соотношением CdS и PbS 9:1, полученных термическим испарением в вакууме [2, 3].

В данном исследовании использовалась технология гидрохимического осаждения. Метод является экономически выгодным и получил достаточно широкое распространение. Ранее он был апробирован для получения пленок твердых растворов на основе PbS [4].

В этой работе изучены пленочные структуры с разным соотношением CdS и PbS – в одних образцах преобладало содержание CdS, в других - PbS. Целью работы было изучение гетерогенных пленочных структур на основе CdS-PbS в зависимости от соотношения компонентов в готовой пленке и установление особенностей изменения тока от времени, возникающих под действием освещения разных спектральных диапазонов.

Исследуемые пленки осаждались из реакционной смеси в присутствии комплексных солей двух металлов и халькогенизатора. В качестве соли кадмия использовался ацетат кадмия, и его концентрация варьировалась для разных образцов от 0,06 М до 0,1 М, соль свинца при этом оставалась для всех образцов постоянной - 0,04 М. Пропорции CdS и PbS в полученных пленках зависят также от лигандов, рН и температуры раствора, поэтому были проведены исследования состава готовых пленок методом энергодисперсионного анализа. Установлено следующее соотношение фаз CdS и PbS в образцах: партия 1– 70% CdS и 30% PbS; партия 2 – 50% CdS и 50% PbS; партия 3– 20% CdS и 80% PbS; партия 4 – 14% CdS и 86% PbS.

Изображения поверхности образцов, полученные с помощью сканирующей электронной микроскопии, показали, что при преобладании CdS на поверхность пленки выталкиваются преципитаты PbS, что объясняется малой растворимостью PbS в CdS. В случае преобладания компонента PbS, количество отдельных кристаллитов CdS на поверхности гораздо меньше, т.к. CdS растворяется намного лучше в PbS.

Фотоэлектрические свойства исследовались с помощью анализатора Agilent B1500a в режимах продольной и поперечной фотопроводимости. Для освещения использовалась галогенная лампа Motis с регулируемым уровнем мощности. Спектр лампы на минимальной мощности не

включал длины волн из диапазона собственного поглощения CdS, но при этом соответствовал области поглощения поликристаллического PbS и твердых растворов на его основе. Вольтамперные характеристики (ВАХ) и зависимости токов во времени измерялись после длительной выдержки в темноте, при освещении и сразу после его выключения.

Анализ ВАХ для образцов с преобладанием CdS показал, что предварительное облучение ближним ИК излучением приводит к уменьшению темнового сопротивления в 2 раза. В продольном режиме фотопроводимость более выражена за счет высокого темнового сопротивления. Кинетические зависимости тока показали, что темновое сопротивление соответствует исходному после засветки видимым светом, но уменьшается после ИК облучения. Установлено, что посредством выбора спектрального диапазона можно активировать процессы, приводящие к стабилизации, либо, наоборот, к деградации характеристик исследуемых пленок – наличие включений PbS в пленке CdS снижает фотодegradацию за счет стока радиационных дефектов в PbS, но при ИК засветке снижение межфазных барьеров приводит к устойчивому снижению темнового сопротивления, что негативно отражается на стабильности фотоэлектрических характеристик.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00194, <https://rscf.ru/project/22-22-00194/>.

Список литературы

1. Морозова Н.К., Аббасов И.И. Основные эффекты кислородных центров в оптике $A^{II}B^{VI}$ // Физика и техника полупроводников, Т. 56(5), С. 486-490, 2022.
2. Memarian N., Rozati S.M., Concina I., Vomiero A. Deposition of Nanostructured CdS Thin Films by Thermal Evaporation Method: Effect of Substrate Temperature // Materials (Basel), Vol. 10(7), P. 773, 2017.
3. Маляр И.В., Стецюра С.В. Влияние морфологии и состава фаз поверхности на радиационную стойкость гетерофазного материала CdS-PbS // Физика и техника полупроводников, Т. 45(7), С. 916-922, 2011.
4. Маскаева Л.Н., Смирнова З.И., Воронин В.И., Марков В.Ф. Ионнообменный синтез тонких пленок твердых растворов замещения в системе CdS-PbS // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Т. 8(3), С. 55-61, 2011.

Фотоэлектрические характеристики и морфология поверхности сульфида кадмия, модифицированного арахином железа

Харитонов П. Г.¹, Глуховской Е.Г., Козловский А.В., Стецюра С.В.

¹СГУ имени Н.Г. Чернышевского

e-mail: *haritonovapg@gmail.com*

Ранее нами была показана возможность создания гетерофазных магниточувствительных структур на основе поликристаллических пленок CdS:Fe [1]. Атомы Fe в процессе высокотемпературного отжига диффундируют из металлизированного покрытия в пленку CdS и образуют твердый раствор $Cd_xFe_{1-x}S$. Благодаря ограниченной растворимости указанных компонентов друг в друге, различной скорости диффузии Fe внутри кристаллитов и по межкристаллитным границам, процессам окисления поверхности в процессе отжига в поликристаллической пленке конкурировали несколько процессов – преципитации, диффузии и окисления, что привело к образованию нескольких видов фаз, неравномерно расположенных на поверхности и в объеме [1]. Так были зарегистрированы фазы FeS и Fe₂O₃, благодаря которым материал проявлял свойства полумагнитного полупроводника. При этом исследование фокусировалось на обнаружении новых для данного материала магнитных свойств, а отслеживанию изменения фотоэлектрических характеристик на разных этапах создания гетерофазной структуры не уделялось должного внимания.

Для установления роли поликристаллического строения CdS и скорости диффузии на фазовый состав и, соответственно, функциональные свойства итоговой структуры в данном исследовании часть экспериментов была проведена на монокристаллических пластинах CdS. Кроме того, использование монокристаллической основы представляет самостоятельный интерес, поскольку на монокристаллах халькогенидов кадмия продолжают исследования, направленные на расширение диапазона их применимости и улучшения свойств [2,3]. В связи с этим особое внимание уделяется модифицированию свойств приповерхностной области кристаллов.

Для модификации использовалась ранее апробированная на поликристаллических пленках методика нанесения ультратонкого покрытия арахином железа (ArchFe) по технологии Ленгмюра-Шеффера[4]. Поверхность монокристалла CdS обладает шероховатостью на наноуровне, что позволяет изучать собственную морфологию покрытия ArchFe в зависимости от количества нанесенных монослоев. В результате получены сканы поверхности в режимах атомно-силовой микроскопии и сканирующей микроскопии зонда Кельвина для разных толщин покрытия. Установлены зависимости шероховатости поверхности и поверхностного потенциала от количества монослоев, составляющих покрытия. Нанорельеф поверхности изменился при нанесении до 25 монослоев ArchFe менее чем в 1,4 раза по сравнению с монокристаллической пластиной CdS. При этом изменения поверхностного потенциала составляют до 180%. Проведено сопоставление рельефа поверхности с распределением потенциала Кельвина и наличием флуктуаций в концентрации Fe в нанесенном покрытии. Эти характеристики представляют практический интерес при использовании слоистой структуры CdS/ArchFe в качестве транзьюсера при создании биодатчиков, поскольку и поверхностный потенциал, и морфология поверхности существенно влияют на адсорбцию биообъектов на такую подложку.

Особое внимание было уделено изучению фотоэлектрических характеристик. Получено, что нанесение монослоев ArchFe на CdS приводит к росту темнового сопротивления, что при малых

напряжениях (до 5-7 В) приводит к увеличению кратности изменения тока при освещении. При больших значениях рабочего напряжения фотократность незначительно уменьшается – до 20 % от исходного значения.

Следующий этап модификации поверхности заключался в отжиге полученной структуры при температуре 500°C в течение 30, 40 и 60 минут. В процессе отжига органическая составляющая покрытия сублимировала, а атомы Fe диффундировали в CdS, меняя свойства приповерхностной области кристалла и, соответственно его фотоэлектрические характеристики.

Исследование распределения атомов Fe и кислорода по глубине проникновения в CdS методом вторичной ионной масс-спектрометрии и использование этих данных в модели преципитации FeS в CdS позволило определить распределение фаз в приповерхностной области CdS.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00194, <https://rscf.ru/project/22-22-00194/>.

Список литературы

1. Стецюра С.В., Харитонова П.Г., Маляр И.В. Полумагнитное пленочное покрытие на основе фоточувствительного полупроводника // Прикладная физика. 2020. № 5. С. 66-72.
2. Huo X.Q., Si H.Q., Zhao K., Zhang Y.W., Cheng H.J., Xu Y.K. High infrared transmittance CdS single crystal grown by physical vapor transport // Journal of Semiconductors. 2018. 39(12). 123003.
3. Egarievwe S. U., Yang G., Egarievwe A.A., Okwechime I.O., Gray J., Hales Z. M., Hossain A., Camarda G.S., Bolotnikov A.E., James R.B. Post-growth annealing of Bridgman-grown CdZnTe and CdMnTe crystals for room-temperature nuclear radiation detectors // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2015. V. 784. P. 51–55.
4. Стецюра С.В., Глуховской Е.Г., Козловский А.В., Маляр И.В. Создание ультратонкого источника примеси для снижения радиационных потерь фоточувствительных пленок CdS // Журнал технической физики. 2015. Т. 85, № 5. С. 116-122.

Особенности роста нитевидных наноструктур InP на подложках кремния из насыщенных паров индия и фосфора в квазизамкнутом объёме

Карлина Л.Б., Власов А.С., Илькив И.В., Вершинин А.В., Сошников И.П.

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

² СПБАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия

³ ИАП РАН, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: *karlin@mail.ioffe.ru*

Проблемы производства оптоэлектронных устройств интегрированных с кремниевой технологией представляют особый интерес. Одно из направлений в этой области связано с выращиванием наноструктур III-V фосфидов на кремниевой подложке [1-5]. Ставшие традиционными технологии выращивания таких структур основаны на каталитическом росте по механизму пар-жидкость-кристалл (ПЖК) и включают использование наноразмерных капель катализатора, предварительно нанесенных на поверхность кремния. Процесс подготовки структуры подложка-капли катализатора перед началом роста наноструктур, как правило, включает ряд технологических операций с целью изменения толщины или удаления слоя естественного окисла на поверхности кремниевой подложки и/или предварительного формирования каталитических центров роста нанодисперсных капель перитектических сплавов индий-золото [1].

В работе впервые проведены экспериментальные исследования каталитического роста InP наноструктур по механизму пар-жидкость-твёрдое из источника насыщенных паров Sn-InP в квазиравновесных условиях в квазизамкнутом объёме [6] на активированной золотом поверхности кремния (111) содержащий естественный слой окисла 2÷2.5 нм. Основное внимание было уделено существенному упрощению начальной стадии подготовки синтеза наноструктур.

Коллоидные капли золота диаметром 60 ± 5 нм наносились на поверхность подложек Si (111), содержащий естественный окисел, из коллоидного раствора в соответствии с ранее развитой методикой. Для синтеза наноструктур подложки кремния с коллоидными частицами золота помещались в ростовую камеру непосредственно под источник паров фосфора и индия [6]. В процессе нагрева образцов и испаряемого материала формировались нанодисперсные частицы золото-индий-фосфор. Рост наноструктур осуществлялся в атмосфере водорода при температуре $500\pm 10^\circ\text{C}$ в течение 60 ± 10 минут.

Исследования поверхностной морфологии методом растровой электронной микроскопии обнаружило присутствие нитевидных нанокристаллов InP (ННК) различной высоты и диаметра. Анализ размеров ННК свидетельствует об их зависимости от времени процесса. Сопоставление длины и диаметра ННК показывает возрастающую от насыщения зависимость, что свидетельствует о преимущественно классическом ПЖК механизме роста. Дифракционная картина от полученных образцов показывает присутствие гексагональной (вюрцитной) фазы в InP ННК.

Спектры рамановского рассеяния от образцов с синтезированными наноструктурами демонстрируют присутствие пиков со сдвигом частоты $\sim 303/343\text{ см}^{-1}$, соответствующих модам поперечных и продольных колебаний InP. Положение и интенсивность колебаний оказывается

неоднородным по поверхности образца и соответствует различной плотности и размеру полученных наноструктур. Изучение спектров фотолюминесценции показало наличие полосы излучения с центром на длине волны ~880 нм, что соответствует ширине запрещенной зоны InP.

Таким образом продемонстрирована возможность выращивания InP ННК из паровой фазы на подложках кремния с естественным слоем окисла. Данная технология открывает возможность значительного упрощения и снижения стоимости получения приборов на основе интегральной структуры фосфид индия- кремний.

Список литературы

1. Mavel A., Chauvin N., Regreny Ph., Patriarche G., Masenelli B., Gendry M., *J. Crystal Growth* **458** (2017) 96
2. Jaffa A., Regreny P., Patriarche G., Chauvin N. and Gendry M., *Nanotechnology* **31** (2020) 354003
3. Breuer S., Hilse M., Geelhaar L., Riechert H., *J. Crystal Growth* **323** (2011) 311
4. Chuang L.C., Moewe M., Crankshaw Sh., Chang-Hasnain C., *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008) 013121
5. Fonseka H.A., Tan H.H., Wong-Leung J., Kang J.H., Parkinson P. and Jagadish C., *Nanotechnology* **24** (2013) 465602
6. Vlasov A.S., Karlina L.B., Ber B.Ya., Bert N.A., Boiko M.E., Kazantsev D.Y., Levin A.A., Smirnov A.B., Smirnova I.P., Soshnikov I.P., *Mat. Today Comm.* **31** (2022) 103232

Влияние структуры и химического состава на газочувствительные свойства индивидуальных наноструктур SnO_x/N-МУНТ

Соколов Д. В.¹, Несов С. Н.¹, Болотов В. В.¹
¹ОНЦ СО РАН

e-mail: *classicsub-zero@mail.ru*

Многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ), покрытые оксидами металлов, могут быть использованы в качестве функциональных элементов в современных электрохимических конденсаторах и газовых наносенсорах [1]. Одним из перспективных чувствительных материалов являются оксид олова (SnO, SnO₂), который в зависимости от структуры пленок демонстрирует повышенную чувствительность к газам, однако исследуются только в виде массивов из большого количества МУНТ, декорированных оксидом металла [2-4]. Формирование диоксида олова на поверхности индивидуальных нанотрубок может позволить достичь высокой степени миниатюризации за счет повышения сенсорных параметров итогового нанокompозита. Устойчивое закрепление оксида на поверхности нанотрубки возможно с помощью модифицирования поверхности МУНТ путем легирования (азотом) или радиационными дефектами (например, облучение ионами инертных газов) [5]. В представленной работе исследованы сенсорные свойства индивидуальных наноструктур на основе индивидуальных модифицированных МУНТ, покрытых оксидом олова с различной структурой и химическим составом.

Массивы легированных азотом МУНТ (N-МУНТ) были синтезированы CVD-методом при пиролизе ацетонитрила в потоке аргона при 800 °С. В качестве катализатора роста использовались наночастицы железа, подводимые в зону синтеза в виде ферроцена с реакционной смесью на подложку SiO₂/Si. Облучение массивов N-МУНТ проводилось ионами аргона в течение 15 мин с энергией 15 кэВ и дозой 10¹⁶ см⁻².

Оксид олова наносился на поверхность облученных N-МУНТ методом магнетронного распыления мишени металлического олова в двух режимах:

- 1) в атмосфере аргона при давлении 0,1 Па с мощностью разряда 50 Вт;
- 2) в смеси Ar+O₂ при давлении 0,85 Па с мощностью разряда 70 Вт.

Исследование структуры нанокompозитов было выполнено с помощью спектроскопии тонкой структуры поглощения рентгеновских лучей (NEXAFS) в центре синхротронного излучения BESSY II.

Наноструктуры в виде индивидуальных нанотрубок и пучков оксид олова/N-МУНТ были получены нанесением суспензии синтезированного нанокompозита в дихлорметане на матрицу золотых микроэлектродов методом spin-coating. С помощью атомно-силового микроскопа обнаруживались индивидуальные оксид олова/нанотрубки, расположенные между двумя микроэлектродами. Газовый отклик определялся как относительное изменение сопротивления наноструктур в потоке сухого азота до и после экспозиции в анализируемом газе с концентрацией 500 ppm каждый: CO, NO₂, NH₃ и H₂S.

Результаты NEXAFS исследований показали, что без использования реакционного газа (кислорода) в процессе магнетронного распыления формируется нестехиометрическая смесь оксидов олова с различной структурой на поверхности нанотрубок ($\text{SnO}_x/\text{N-МУНТ}$). Во втором случае оксид олова является поликристаллическим SnO ($\text{SnO}/\text{N-МУНТ}$).

Абсолютные средние значения газового отклика для индивидуальных облученных N-МУНТ, $\text{SnO}_x/\text{N-МУНТ}$ и $\text{SnO}/\text{N-МУНТ}$ находятся в диапазоне 1,2 – 9,4 и 0,6 – 10,6 %, соответственно. При этом для образцов $\text{SnO}/\text{N-МУНТ}$ значения газового отклика по модулю соответствует интервалу 0,5 – 37,5 %, что в случае NH_3 и NO_2 в 2 – 4 раза больше относительно индивидуальных пучков N-МУНТ и $\text{SnO}_x/\text{N-МУНТ}$, соответственно.

Таким образом, поликристаллический оксид олова (II) на поверхности нанотрубок в несколько раз увеличивают отклик к NH_3 и NO_2 индивидуальных наноструктур $\text{SnO}/\text{N-МУНТ}$. Было установлено, что индивидуальные наноструктуры на основе оксида олова и нанотрубок имеют наибольший отклик к NO_2 . Благодаря наноразмерным геометрическим параметрам, полученные индивидуальные $\text{SnO}/\text{N-МУНТ}$ наноструктуры могут быть использованы как селективные элементы в газовых наносенсорах.

Работа выполнена по государственному заданию Омского научного центра СО РАН (номер госрегистрации 121021600004-7), используя оборудование Центра коллективного пользования Омского научного центра СО РАН.

Список литературы

1. Hu Y., Guo C., Carbon Nanotubes and Carbon Nanotubes/Metal Oxide Heterostructures: Synthesis, Characterization and Electrochemical Property, Carbon Nanotubes - Growth and Applications, edited by M. Naraghi, 23-28, 2011.
2. Tyagi P., Sharma A., Tomar M., Gupta V., A comparative study of RGO-SnO₂ and MWCNT-SnO₂ nanocomposites based SO₂ gas sensors, Sensors and Actuators B: Chemical, vol. 248, 980-986, 2017.
3. Aroutiounian V., Adamyan Z., Sayunts A., Khachaturyan E., Adamyan A., Fitl P., Vlcek J., MWCNTs/SnO₂ Harmful Gas Sensors, Proceedings Sensor 2017, 708-713, 2017.
4. Liu H., Zhang W., Yu H., Gao L., Song Z., Xu S., Li M., Wang Y., Song H., Tang J., Solution-Processed Gas Sensors Employing SnO₂ Quantum Dot/MWCNT Nanocomposites, ACS Applied Materials & Interfaces, vol. 8, 840-846, 2015.
5. Davletkildeev N. A., Sokolov D. V., Mosur E. Yu., Bolotov V. V., Gas sensing properties of individual composite nanostructures TiO_{2-x}/MWCNT and SnO_x/MWCNT measured by scanning probe microscopy, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, vol. 699, 012010, 2019.

Формирование наноструктурированной пленки оксида олова на пористом кремнии

Ким К. Б.¹, Леньшин А.С.^{1,2}, Нифталиев С.И.¹,
¹VSUET, ²VSU

e-mail: *kmkseniya@yandex.ru*

В настоящее время для контроля и анализа загрязняющих веществ в окружающей среде широко используются газочувствительные сенсоры. Современные датчики требуют постоянного улучшения для достижения требуемой чувствительности, селективности и надежности работы. В качестве подложки газочувствительных датчиков используют пористый кремний, имеющий высокую удельную поверхность, что является важной характеристикой для адсорбции газов [1]. В работе для улучшения характеристик датчиков на подложках пористого кремния синтезировали тонкую пленку оксида олова золь-гель методом. Среди многих методов изготовления тонких пленок золь-гель метод имеет ряд преимуществ: низкие энергетические затраты, простое и дешевое оборудование, а также возможность контролировать пористость кремния [2]. Наночастицы SnO₂ обладают такими уникальными свойствами, как большая удельная поверхность, широкая запрещенная зона, низкая стоимость, высокая химическая реакция с газами, высокая чувствительность и нетоксичность материала [3, 4].

Пленки оксида олова получали золь-гель методом на подложках монокристаллического кремния.

Подложки пористого кремния получали электрохимическим анодированием монокристаллического кремния КЭФ (111). Для приготовления золь использовали легкогидролизующиеся соединения – этиловый эфир ортокремниевой кислоты (ТЭОС, Si(OC₂H₅)₄). Реакции гидролиза и поликонденсации ТЭОС проводили в присутствии хлорида олова (SnCl₂·2H₂O).

Анализ поверхности пористого кремния с частицами оксида олова оценивали методом атомно-силовой микроскопии. Осаждение металлоксидной пленки олова на пористом кремнии приводит к образованию гранул (менее 100 нм) и крупных пор. Анализ образцов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показал, что олово в образцах присутствует в основном в оксидной фазе с небольшим присутствием металлической фазы.

Для оценки электрических свойств полученных нанокомпозитов использовали метод спектроскопии импеданса. Анализ полученных годографов позволяют сделать вывод, что в присутствии восстанавливающего газа релаксационный максимум сдвигается в более высокочастотную область, при этом частота увеличивается в 2 раза.

Результаты, описанные в работе, показывают, что золь-гель метод может успешно использоваться для формирования пленок оксида олова на пористом кремнии. Показано, что осаждение оксида олова на пористом кремнии приводит к увеличению накопления заряда в присутствии восстанавливающих газов, а значит, у сенсоров на основе оксидов олова и пористого кремния значительно увеличится чувствительность к газам-реагентам.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-73-00154

Список литературы

1. Al-Enizi A.M., Naushad M., Al-Muhtaseb A.H. Synthesis and characterization of highly selective and sensitive Sn/SnO₂/N-doped carbon nanocomposite (Sn/SnO₂@ NGC) for sensing toxic NH₃ gas. Chem. Eng. J. 2018. V.345. P. 58–66.
2. Baker P.G.L. , Sanderson R.D., Crouch A.M. Sol–gel preparation and characterisation of mixed metal tin oxide thin films. Thin Solid Films. 2007. V. 515. P. 6691-6697.
3. Roy S.S., Podder J. Synthesis and optical characterization of pure and Cu doped SnO₂ thin films deposited by spray pyrolysis. J. Optoelectron. Adv. Mater. 2010. V. 12(7). P. 1479-1484.
4. Turgut G., Keskenler E.F., Aydin S., Sonmez E. Effect of Nb doping on structural, electrical and optical properties of spray deposited SnO₂ thin films. Superlattices Microstruct. V. 56. P. 107–116.

Рост ориентированных многостенных углеродных нанотрубок на структурах SiO₂/Si, модифицированных ионным облучением

Князев Е. В.^{1,2}, Болотов В.В.^{1,2}, Поворознюк С.Н.^{1,2}, Стенькин Ю.А.¹

¹Омский научный центр СО РАН

²Омский государственный технический университет

e-mail: knyazevyegor@mail.ru

Интерес исследователей к многостенным углеродным нанотрубкам (МУНТ) обусловлен их уникальными физико-химическими свойствами. Механическая прочность, широкий диапазон проводимости, химическая инертность и автоэмиссионные свойства делают МУНТ перспективным материалом для производства сенсоров, сорбентов, элементов химических источников тока и т.д. [1].

Одним из наиболее распространенных методов синтеза МУНТ является химическое осаждение из газовой фазы (CVD) при этом в реакторе происходит пиролиз углеводородного прекурсора в присутствии металлического катализатора, обеспечивающий рост МУНТ. Данный метод синтеза обладает высокой производительностью процесса, а также позволяет получать слои углеродных нанотрубок, ориентированных перпендикулярно поверхности подложки. В тоже время к недостаткам данного метода синтеза можно отнести широкий диапазон значений внешнего диаметра полученных нанотрубок и неоднородная плотность синтезируемого слоя МУНТ, что негативно сказывается на свойствах как автоэмиссионных катодов, так и химических источников тока [2].

Оптимизации морфологических характеристик полученных слоев нанотрубок может быть достигнута путем модификации поверхности ростовой подложки ионным облучением с целью более равномерного распределения по поверхности частиц катализатора во время синтеза. В данной работе исследованы параметры слоев МУНТ на различных этапах CVD-синтеза, при модификации ростовой подложки.

Ростовые подложки SiO₂/Si, облучались ионами Ar⁺ с энергией 15кэВ и токе 2 мА длительностью 20, 40 и 60 мин. Синтез слоев МУНТ проводился при разложении смеси ацетонитрила и ферроцена в соотношении 100:2. Температура в зоне реакции составляла 800⁰С, длительность синтеза варьировалось от 5 до 30 минут. Определение морфологических параметров слоя МУНТ на различных этапах синтеза проводилось методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе Jeol JSM 6610-LV.

Проведенные исследования позволяют заключить, что обработка ростовых подложек не привела к существенным изменениям диаметра нанотрубок для всех режимов обработки поверхности, что связано с особенностями синтеза и подачи прекурсоров в зону реактора. Данные РЭМ поверхности ростовых подложек на начальных этапах роста МУНТ (длительность синтеза 5 минут) показали, что предварительное облучение ростовой подложки ионами аргона приводит к увеличению плотности зародышей МУНТ более чем в 4 раза, при постоянной концентрации прекурсора и катализатора в зоне реактора. Исследование слоев МУНТ прошедших полный цикл синтеза показало, что облучение ростовой подложки ионами аргона длительностью 60 минут позволяет сформировать слой нанотрубок с более однородной поверхностью, без крупных

артефактов. Метод ионной обработки поверхности ростовой подложки позволяет улучшить морфологические параметры слоя МУНТ, уменьшив неоднородность по толщине и плотности слоя нанотрубок.

Работа выполнена в рамках государственного задания Омского научного центра СО РАН (номер госрегистрации проекта 12021600004-7). В работе было использовано оборудование Омского регионального центра коллективного пользования СО РАН.

Список литературы

1. A. Thapa, Y.R. Poudel, R. Guo, K.L. Jungjohann, X. Wang, W. Li, Carbon, 171, 188 (2021). DOI: 10.1016/j.carbon.2020.08.081
2. Н.В. Лянгузов, Е.В. Никитина, В.С. Сим. Письма в ЖТФ, 2022, Т. 48, С.23-27. DOI: 10.21883/PJTF.2022.07.52288.19008

Синтез и идентификация аддуктов фуллеренола-24 с переходными металлами и лантаноидами (на примере Zn, Co, La)

Кузнецов В. В.¹, А.А.Гурьева^b, В.П.Герман^b, В.А.Кескинов^b, Н.А.Чарыков^{b,c}, Н.А.Куленова^a, Б.К.Шаймарданова^a, М.А.Саденова^a, Л.В.Шушкевич^a, А.А.Блохин^{a,b}, Д.Г.Летенко^d

¹СПбГЭТУ "ЛЭТИ"

^aЦентр "Veritas", Восточно-Казахстанский государственный технический университет им.Д.Серикбаева, Казахстан

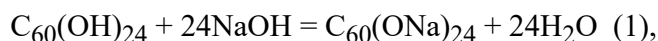
^bСПбГТИ (ТУ)

^dСПбГАСУ

e-mail: vvkuznetsov@inbox.ru

Важным применением фуллеренолов является синтез аддуктов фуллеренолов переходных и f-металлов (на примере Zn, Co, La)-фуллеренол-Ме, с последующим их использованием в качестве малорастворимых доноров микроудобрений для агрохимических целей.

Синтез проводили в два этапа:



Где: x – валентность Ме (2 - Zn, Co; 3 – La), y – фактор замещения Na на Ме в натриевом аддукте. Для синтеза использован наиболее популярный и доступный фуллеренол-24 $C_{60}(OH)_{24}$ [1, 2].

Схема синтеза

1. Растворение 2.9 г. Фуллеренола-24 в 300 см³ 0.01 М раствора $NaOH$ на механической мешалке в течение 2 ч. Фильтрация полученного раствора на бумажном фильтре "синяя лента". Образуется коничневый водный раствор $C_{60}(OH)_{24}$. Доведение pH раствора до значений 7-8 отн. ед. при добавлении нескольких капель 1 М раствора HCl .
2. Приготовление 100 мл раствора $MeCl_x$ с весовой концентрацией 60 г/дм³ ($CoCl_2$), 55 г/дм³ ($ZnCl_2$), 93 г/дм³ ($LaCl_3$), на механической мешалке в течение 2 ч. Фильтрация полученного раствора на бумажном фильтре "синяя лента".
3. Добавление водного раствора $MeCl_x$ по каплям к водному раствору $C_{60}(OH)_{24}$. Выстаивание полученного раствора с образованным осадком в течение 24 ч. Образуется рыхлый аморфный коричневатый осадок. Фильтрация полученного гетерогенной смеси на бумажном фильтре "синяя лента".
4. Трехкратная промывка осадка метанолом CH_3OH по 50 см³ растворителя. Окончательное прокаливание аддуктов в сушильном шкафу при температуре около 70⁰С в течение 90 мин. Ожидаемая масса аддуктов – около 3.5 ÷ 4.0 г.
5. В результате были получены граммозы количества аддуктов фуллеренола-24: $C_{60}(ONa)_{16}(O_2Co)_4$; $C_{60}(ONa)_{16}(O_2Zn)_4$; $C_{60}(ONa)_{15}(O_3La)_3$.

Идентификация аддуктов фуллеренола, переходных и f-металлов

По своему детальному и элементному составу смешанные $C_{60}(ONa)_{24-yx}(O_xMe)_y$, ($Me = Zn, Co, La$) очень близки друг к другу. Поэтому электронные фотографии, ИК- и электронные спектры, данные ВЭЖХ этих фуллеренолов практически идентичны. Небольшие отличия проявляются в данных элементного анализа и внешнем виде кристаллов на оптическом микроскопе.

Для идентификации аддуктов использованы следующие методы физико-химического анализа:

- ИК-спектроскопия (Инфракрасный Фурье-спектрофотометр типа IR Spirit Compact FTIR (Shimadzu), $\tilde{\nu} = 400 - 4000 \text{ см}^{-1}$);
- Электронная спектроскопия (Спектрофотометр электронный типа Spectrophotometer UV5 (Mettler Toledo), $\lambda\lambda = 180 - 1110 \text{ нм}$);
- Электронной микроскопии (Микроскоп электронный Vega TeSCAN. Увеличение до *100 000, Энергодисперсионный рентгенофлуоресцентный элементный анализ);
- Высокоэффективная жидкостная хроматография (Хроматограф жидкостной типа Lumachrom фирмы «Lumex», С.-Петербург). Условия проведения: сорбент – “Nucleosil C18”, подвижная фаза – 2 мас. % CH_3CN , 0.1 мас. % CF_3COOH , 97.9 мас. % – H_2O , детектор спектрофотометрический при $\lambda=330 \text{ нм}$;
- Масс-спектроскопия (Масс-спектрограф Maldi TOF MS (Bruker), диапазон масс – до 3 кДа, ионизация – Электронный удар).

Результаты и выводы

Авторами синтезированы аддукты фуллеренола-24 ($C_{60}(OH)_{24}$) с переходными металлами и лантанидами (на примере Zn, Co, La) с образованием тетра- и три-аддуктов $C_{60}(ONa)_{16}(O_2Co)_4$; $C_{60}(ONa)_{16}(O_2Zn)_4$; $C_{60}(ONa)_{15}(O_3La)_3$. Идентификация аддуктов и определение их составов проведено методами: инфракрасной, электронной спектроскопии, высокоэффективной жидкостной хроматографии; масс-спектрометрии; рентгенофлуоресцентного элементного анализа.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00064, <https://rscf.ru/project/23-23-00064/>, и поддержано программно-целевым финансированием республики Казахстан по теме BR10965186 "Разработка и внедрение геоинформационной поддержки "умного" сельского хозяйства для улучшения управления агро- промышленным комплексом".

Список литературы

1. N. A. Charykov, K. N. Semenov, V. A. Keskinov et al. Cryometry and excess thermodynamic functions in water soluble of the fullereneol $C_{60}(OH)_{24}$. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2020, 11 (2), P. 1–9. DOI 10.17586/2220-8054-2020-11-2-000-000.
2. V.V.Sharoyko, S.V.Ageev, N.A.Charykov, et al. Physicochemical study of water-soluble $C_{60}(OH)_{24}$ fullereneol. *J.Molec.Liquids*. Volume 311, 1 August, 2020 , 113360-113411. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113360>

3. N.A. Charykov, V.A. Keskinov, K.A. Tsvetkov, et.al. Solubility of Rare Earth Chlorides in Ternary Water-Salt Systems in the Presence of a Fullerenol— $C_{60}(OH)_{24}$ Nanoclusters at 25 °C. Models of Nonelectrolyte Solubility in Electrolyte Solutions. Processes. 2021 , 9 (2), P.349; <https://doi.org/10.3390/pr9020349>
- 4.

Структурные характеристики и СВЧ отражающие свойства аморфных наногранулированных композитов $(\text{CoFeB})_x+(\text{SiO}_2)_{1-x}$

Антонец И. В.¹

¹СГУ им Пителима Сорокина

e-mail: *aiv@mail.ru*

Наноструктурированные композиты, содержащие, гранулы железа, кобальта, циркония, бора, вкрапленные в диэлектрическую матрицу, активно исследуются в последние десятилетия в связи с разработкой новейших малогабаритных устройств СВЧ [1–3]. Аморфные композиты, содержащие в составе сплава только металлические гранулы, обладают рядом уникальных свойств. Ферромагнитный металл в таких композитах обуславливает гигантское магнитосопротивление [4] и высокий уровень поглощения СВЧ излучения [5]. Цирконий содержащие композиты могут обладать СВЧ проводимостью на два-четыре порядка превышающие статическую на постоянном токе задолго до порога перколяции [6,7]. Подобные композиты обладают высокой удельной проводимостью $10^2 - 10^5$ См/м и изменяющимся в широком диапазоне коэффициентом отражения СВЧ волн 0.01–0.96 при содержании металлической фазы 30–70 ат. % и толщиной сотни нанометров–единицы микрометров [8–11].

В настоящей работе приведены результаты исследований структуры аморфных наногранулированных композитов $(\text{CoFeB})_x+(\text{SiO}_2)_{1-x}$, в которых в составе сплава наряду с металлическими гранулами (железа и кобальта) присутствуют гранулы полуметалла (бора). Определены толщина и состав композитных пленок. Представлены результаты экспериментальных исследований СВЧ коэффициента отражения в диапазонах частот 8 – 12 ГГц и 25 – 36 ГГц. Оценено влияние структурных характеристик и состава на отражающие свойства пленок. Для серии образцов из 12 пленок получены зависимости коэффициентов отражения, прохождения и поглощения от частоты и содержания металлической фазы.

Композитные гранулированные пленки состава $(\text{CoFeB})_x+(\text{SiO}_2)_{1-x}$, где $x \sim 0.32-0.52$ толщиной 0.6 – 0.8 мкм получены в атмосфере азота при неглубоком вакууме 10^{-5} Торр на подложках из лавсана толщиной 0.02 мм. Пленки изготовлены методом ионно-лучевого напыления в Воронежском государственном техническом университете. Элементный состав и толщина пленок определялись с помощью электронного микроскопа Tescan MIRA 3 LMN SEM (Чехия). Исследование топографии поверхности проводилось с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) Интегра Prima (NT-MDT, Россия) в полуконтактном режиме. СВЧ коэффициенты отражения, прохождения и поглощения от композитных пленок при нормальном падении волны определялись при помощи измерительной установки, включающей генератор качающейся частоты ГКЧ 61 и ГКЧ 62, индикатор коэффициента стоячих волн (КСВН) и ослабления сигнала Я2Р-67, волноводный комплект рефлектометров – направленных выделителей сигналов. Для оценки воздействия магнитного поля на коэффициент отражения СВЧ волн, часть волновода с композитной пленкой помещалась в зазор электромагнита с индукцией магнитного поля до 0.3 Тл. Удельная проводимость рассчитывалась по обратной величине удельного электрического сопротивления, измеряемого на постоянном токе двузондовым методом с использованием потенциометрической методики замещения. Все исследования были проведены при комнатной температуре.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований воздействия магнитных полей на коэффициент отражения СВЧ волн композитных пленок $(\text{CoFeB})_x(\text{SiO}_2)_{1-x}$. Из серии образцов отобраны 8 пленок для которых получены зависимости коэффициента отражения от частоты и содержания металлической фазы при индукции магнитного поля 0 – 0.3 Тл с шагом 0.05 Тл, а также зависимости коэффициента отражения от индукции магнитного поля для различных частот и содержаний металлической фазы.

Найдена эффективная толщина пленок, состоящих только из гранул сплава, с учетом содержания металлической фазы, по которой определена проводимость гранул. Используя механизм внутригранулярных токов [11], по спектрам отражения СВЧ волн оценены промежутки между гранулами и длина свободного пробега электронов. Получены зависимости длины свободного пробега электронов от коэффициента отражения СВЧ волн и содержания металлической фазы с учетом эффективной толщины пленок.

Работа выполнена при поддержке РФФ № 21-72-20048.

Список литературы

1. Vendik I. B., Vendik O. G., Metamaterials and their application in microwaves: A review, *Technical Physics*, v. 58(1), 1-24, 2013
2. Zolotukhin I. V., Kalinin Yu. E., Ponomarenko A. T. et. al., Metal-dielectric nanocomposites with amorphous structure, *J. Nanostructured Polymers and Nanocomposites*, v. 2(1), 23, 2006
3. Kalinin Yu. E., Remizov A. N., Sitnikov A. V., Electrical properties of amorphous $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ nanocomposites, *Physics Solid State*, v. 7, 2146–2152, 2004
4. Gerber A., Milner A., Groisman B. et. al., Magnetoresistance of granular ferromagnets, *Phys.Rev.B*, v. 55(10), 6446, 1997
5. Kazantseva N. E., Ponomarenko A. T., Shevchenko V. G. et. al., Properties and prospects for the use of granular ferromagnets in the microwave field, *Physics and chemistry of materials processing*, v. 1, 5, 2002
6. Antonets I. V., Kotov L. N., Kalinin Yu. E. et. al., Dynamic conductivity of amorphous nanogranular films in the microwave frequency range, *Technical Physics Letters*, v. 40(7), 584–586, 2014
7. Antonets I. V., Kotov L. N., Kirpicheva O. A. et. al., Static and dynamic conduction of amorphous nanogranulated metal–dielectric composites, *Journal of Communications Technology and Electronics*, v. 60(8), 904–914, 2015
8. Antonets I. V., Kotov L. N., Golubev Ye. A., Influence of composition and nanogranular structure of $(\text{Co+Fe+Zr})/(\text{ZrO})$ composite films on conductivity and microwave reflective properties, *Materials Chemistry and Physics*, v. 240, 122097, 2020
9. Antonets I. V., Kotov L. N., Golubev E. A. et. al., The structure, conductive properties, and reflective properties of amorphous granulated $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{ZrO})_{1-x}$ composite films, *Technical Physics*, v. 62(2), 261–269, 2017
10. Antonets I. V., Golubev E. A., Kotov L. N. et. al., Nanostructure and electrical conductivity of amorphous granulated $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ composite Films, *Technical Physics*, v. 61(3), 416–423, 2016
11. Antonets I. V., Golubev Ye. A., Shcheglov V. I. Algorithm for determining the structural characteristics of amorphous nanogranulated composites from the microwave waves reflection or conductivity, *Materials Chemistry and Physics*, v. 290, 126533, 2022

Синтез и исследование наноструктур на основе асбестов и пористых стекол с включением 2-метилбензимидазола в систему нанонитей и нанопор

Балашова Е. В.¹, Левин А.А.¹, Павлов С.И.¹, Давыдов В.Ю.¹, Смирнов А.Н.¹,
Фокин А.В.¹, Старухин А.Н.¹, Кричевцов Б.Б.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *balashova@mail.ioffe.ru*

Наноразмерные кристаллы и структуры на их основе представляют большой интерес [1]. Представленная работа посвящена изучению органических наноструктур, полученных введением молекул 2-метилбензимидазола (МБИ) в пористые стекла и хризотил-асбест. Кристаллы МБИ, образованные гетероциклическими молекулами, обладают сегнетоэлектрическими свойствами выше комнатной температуры. Поскольку поры стекол и трубки асбеста имеют диаметр нескольких нанометров, представляет интерес исследовать образование в таких системах нанокристаллов МБИ и изучить их кристаллическую структуру в различных наноматрицах (2D и 3D), а также ИК спектры, фотолюминесценцию (ФЛ) и диэлектрические свойства таких структур.

Введение молекул МБИ в поры стекол и трубки асбеста осуществлялось помещением незаполненных образцов в расплав МБИ. Исследование кристаллической структуры проводилось методом рентгеновской дифракции (XRD) с использованием дифрактометра D2 Phaser (Bruker AXS, Германия), ИК спектры (FTIR) были получены с помощью ИК-Фурье спектрофотометра IRPrestige-21 (Shimadzu, Япония). Для исследования спектров люминесценции использовалась установка T64000 (HoribaJobin – Yvon, Франция).

Изучение рефлексов XRD дает информацию о размере кристаллитов в направлении перпендикулярном поверхности пластины, на которую падают рентгеновские лучи. В пластинах хризотил-асбеста нитеподобные поры идут параллельно поверхности. Анализ XRD картины рефлексов в асбесте показал наличие в них МБИ, причем средний размер кристаллитов МБИ составляет $D = 9,1(9)$ нм, что соответствует внутреннему диаметру асбестовых нитей. При введении МБИ в нити асбеста в спектре ИК поглощения кроме линий асбеста наблюдаются дополнительные группы пиков, связанных с внутренними колебаниями молекулы МБИ. Введение МБИ сопровождается также возрастанием интенсивности ФЛ примерно в 40 раз при возбуждении на длине волны $\lambda = 326$ нм. Спектральное положение полос люминесценции в ФЛ спектре асбест/МБИ оказались очень близки к значениям, полученным для кристаллов α - и γ -глицина (Gly:CA) и триглицинсульфата (TGS:CA) с примесью органических циклических молекул кроконовой кислоты (CA) [2,3], что позволяет предположить похожие механизмы формирования ФЛ.

Образцы пористого стекла имели размеры пор $\sim 2,5$ нм и ~ 7 нм. В отличие от асбеста, в пористых стеклах реализуется случайное расположение пор. Все наблюдаемые XRD рефлексы от образцов с разным размером пор с включением МБИ относятся к решетке МБИ. Анализ профилей рефлексов свидетельствуют о наличии в образцах нанокристаллитов МБИ разного размера с близкими параметрами элементарной ячейки. Наибольшее количество кристаллитов МБИ (~ 70 вес.%) имеет размер, совпадающий с диаметром пор. В образцах имеется $\sim 0,75$ вес.%

кристаллитов размером $\sim 60 - 100$ нм. Оставшиеся $\sim 29,25$ вес % кристаллитов имеют размеры ~ 10 нм в МВІ2.5 и ~ 20 нм и ~ 30 нм в МВІ7.

Сравнительные исследование ФЛ стёкол с размерами пор 2,5 нм и 7 нм без МВІ и с МВІ при возбуждении светом ($\lambda = 326$ нм) показали, что интенсивность ФЛ стекол увеличивается весьма незначительно при введении МВІ по сравнению с МВІ в наноасбесте.

Диэлектрические исследования наностёкол с МВІ показали увеличение эффективной диэлектрической проницаемости и изменение показателя степени частотной зависимости проводимости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ГФЕН в рамках научного проекта № 21-52-53015.

Список литературы

1. Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties & Applications, 2nd ed., G. Cao, Y. Wang (eds.), World Scientific Publishing Company; Singapore: 2010, p. 581.
2. E. Balashova et al. Crystals **12** (2022) 1342. <https://doi.org/10.3390/cryst12101342>
3. E. Balashova et al. Crystals **12** (2022) 679. <https://doi.org/10.3390/cryst12050679>

Модификация тонких слоёв *h*-BN зондом сканирующего зондового микроскопа.

Гущина Е. В.¹, Малых Д.А.¹, Дунаевский М.С.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *katgushch@yandex.ru*

Исследования двумерных материалов (2D) активно ведутся последнее десятилетие [1]. Одним из самых известных и исследованных двумерных материалов на сегодняшний день считается графен. Ему посвящено огромное количество работ [1], однако, научный интерес сдвигается в сторону и других 2D-материалов, например, дихалькогенидов переходных металлов (MoS_2 , MoSe_2 , MoTe_2 , WS_2 , WSe_2 , WTe_2), а также гексагонального нитрида бора (*h*-BN). Объемные кристаллы нитрида бора использовались в качестве изолирующей подложки при исследовании свойств графена, но в данный момент особый интерес представляют Ван-дер-Ваальсовы гетероструктуры, содержащие тонкие слои различных 2D-материалов, включая гексагональный нитрид бора. Тонкий слой *h*-BN (с шириной запрещенной зоны 5.9 эВ) может быть использован в качестве барьера [2] между проводящими слоями (либо слоями полупроводниковых материалов) в гетероструктуре. Кроме того, наметилась тенденция к выделению области исследования, так называемой, «борки» 2D-материалов [3]. В процессе сборки такие материалы определенной толщины укладываются друг на друга с применением различных методов. Основным и широкораспространенным способом осаждения слоёв на поверхность является эксфолиация (отщепление тонких слоёв скотчем от объёмного кристалла). При этом толщины осажденных слоев могут варьироваться. Наибольший интерес представляет возможность модификации толщины этих слоёв и достижение монослойных (бислойных) покрытий. Одним из методов, позволяющих модифицировать тонкие слои 2D-материалов является метод сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ).

В данной работе продемонстрирована возможность передвижения и скручивания, небольших по площади фрагментов (флэйков) *h*-BN с помощью зонда сканирующего зондового микроскопа. Основная идея заключается в воздействии СЗМ-зондом и последующем отслаивании верхних слоёв, связанных с нижележащими слоями слабыми силами Ван-дер-Ваальса.

Методика модификации поверхности с помощью СЗМ-зонда заключалась в следующем. Сначала в полуконтактном режиме СЗМ сканируется выбранная область. Затем размер области сканирования уменьшается в 2-3 раза и подводится к фрагменту, который планируется загнуть или отодвинуть. Далее, используя контактный режим работы СЗМ, выбранная область сканируется с силой примерно 0.5-1 мкН. Надо отметить, что зонд воздействует вдоль определенного выбранного направления. Это позволяет более эффективно сдвинуть или загнуть слой. После этого воздействия восстанавливается исходный размер области сканирования и полуконтактный режим СЗМ. В результате, регистрируется рельеф, получившийся после воздействия.

В результате таких манипуляций наблюдаются или закрученные области, или сдвинутые. В результате удавалось сдвинуть часть изначально толстых пленок и получить тонкие слои, содержащие порядка 10 монослоёв.

Список литературы

1. Geim A.K., Grigorieva I.V., Van der Waals heterostructures, *Nature*, V. 499, 419-425, 2013
2. Xu M., Tao Liang., et.all, Graphene-Like Two-Dimensional Materials, *Chem. Rev.*, V. 113, 3766–3798, 2013
3. Haigh S. J. Gholinia A., et.all, Cross-sectional imaging of individual layers and buried interfaces of graphene-based heterostructures and superlattices, *Nature Materials*, V. 11, 9, 764-767, 2012.

Варизонность 2D слоев CdTe в фазе сфалерита и в фазе с граничными атомами халькогена

Гавриков А. А.¹, Кузнецов В.Г.^{1,2}, Колобов А.В.¹

¹РГПУ им. А. И. Герцена

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: antongavr@gmail.com

После открытия уникальных электронных свойств графена усилился интерес к поиску новых 2D-материалов, особенно с полупроводниковыми свойствами, который привел к интенсивным исследованиям дихалькогенидов переходных металлов [1,2], полупроводников класса AIIIIVI [3], а также топологических изоляторов, таких как Sb_2Te_3 или Bi_2Te_3 [4]. Во всех этих материалах ковалентно связанные слои удерживаются вместе слабыми силами Ван-дер-Ваальса (vdW), что объясняет их альтернативное название vdW-кристаллы. Особый интерес представляет тот факт, что в большинстве таких материалов vdW щель образуется между атомными плоскостями из тяжелых частиц халькогена (Se, Te). Уменьшение толщины полупроводников до нескольких монослоев часто приводит к структурной релаксации и появлению новых свойств. Это послужило стимулом для исследования электронной структуры CdTe в фазе сфалерита (zinc-blende, zb) толщиной 1–4 монослоя (ML) и в фазе, сформированной инвертированными блоками inv-2ML (1 vdW = inv-2ML) толщиной 1 – 3 блока. Для фазы сфалерита характерно чередование слоев Cd-Te-Cd-Te, в то время как vdW-кристалл состоит из 2ML-блоков, внешние плоскости которых образованы атомами халькогена, а атомы металла находятся внутри блока.

Для данных структур были проведены расчеты энергетических зон, плотностей состояний (DOS) и парциальных плотностей состояний (PDOS) с помощью плосковолнового кода CASTEP методом теории функционала плотности (DFT) в приближении обобщенного градиента (GGA) с обменно-корреляционными функционалами в форме PBE и PBEsol и vdW поправками Grimme-D2, как без учета спин-орбитального взаимодействия (SOC), так и с его учетом. Для описания взаимодействия валентных электронов с остовом были использованы скалярно-релятивистские псевдопотенциалы в расчетах без учета SOC, и полностью релятивистские (J-зависимые) псевдопотенциалы в расчетах с учетом SOC.

Зонные расчеты показали, что DFT гэп (минимальное значение запрещенной зоны) CdTe в фазе сфалерита имеет значение близкое к нулю и мало меняется при переходе от zb-bulk к слою толщиной 2ML. При дальнейшем уменьшении толщины до 1ML наблюдается резкое увеличение DFT гэпа до 1,2 эВ. Фаза сфалерита в пределе 1ML является прямозонным полупроводником с DFT гэпом в точке Г. Учет SOC приводит к увеличению гэпа только в случае объемного материала. Для слоев nML (n = 1,2,3,4) учет SOC не приводит к существенному изменению зонной структуры.

Рассчитанные PDOS позволили определить, что верх валентной (v) зоны CdTe как zb-bulk, так и zb-nML (n = 1,2,3,4), сформирован из p-состояний теллура, причем для тонких слоев четко наблюдаются пики, число которых равно числу монослоев. Дно зоны проводимости (с-зоны) в равной степени включает в себя p- и s- состояния Cd, а также s-состояния Te, причем последние расположены выше по энергии.

В случае CdTe с инвертированной структурой материал является прямозонным для всех изученных толщин, причем гэп уменьшается по мере увеличения количества vdW блоков: от 1,1 эВ для 1vdW блока до 0,6 эВ для слоя из 3-х vdW блоков и для объемного vdW-кристалла. Учет SOC приводит к уменьшению гэпа для предельно тонких слоев 1vdW, и к его увеличению в более толстых слоях из 2vdW, 3vdW блоков и в объемном vdW-кристалле.

Из расчетов PDOS следует, что, как и в случае zb-nML ($n = 1,2,3,4$) слоев, в vdW-CdTe верх v -зоны сформирован из p -состояний Te, а дно s -зоны в равной степени включает в себя p - и s -состояния Cd. В случае vdW-кристаллов число пиков p -состояний Te в v -зоне на один больше в случае предельно тонких слоев 1vdW, что может быть связано с числом внешних атомных плоскостей, сформированных атомами халькогена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766).

Список литературы

1. K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T. F. Heinz, Phys. Rev. Lett. 2010, 105, 136805.
2. A. Kolobov, J. Tominaga, Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenides, Springer International Publishing, Cham, Switzerland 2016.
3. D. A. Bandurin, A. V. Tyurnina, G. L. Yu, A. Mishchenko, V. Zólyomi, S. V. Morozov, R. K. Kumar, R. V. Gorbachev, Z. R. Kudrynskiy, S. Pezzini, Z. D. Kovalyuk, U. Zeitler, K.S. Novoselov, A. Patané, L. Eaves, I. V. Grigorieva, V. I. Faiko, A. K. Geim, Y. Cao, Nat. Nanotechnol. 2017, 12, 223.
4. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, Physics 2009, 5, 438.

Разработка перспективных ВСП проводников с использованием различных мишеней ReBCO

Гурьев В. В.¹, Куликов И.В.¹, Абдуханов И.М.², Алексеев М.В.², Белотелова Ю.Н.², Волков П.В.¹, Коновалов П.В.², Круглов В.С.¹, Крылов В.Е.¹, Лазарев Д.В.¹, Никонов А.А.¹, Овчаров А.В.¹, Раков Д.Н.², Шавкин С.В.¹

¹НИИЦ Курчатовский институт

²АО «ВНИИНМ» им. Бочвара

e-mail: GuryevVV@mail.ru

В электромагнитных системах будущих проектов, в том числе в области управляемого термоядерного синтеза, предполагается использовать кабели, изготовленные из лент на основе высокотемпературных сверхпроводников. В мире ведутся интенсивный поиск технологических решений по изготовлению ВСП проводников, удовлетворяющих высоким требованиям к токнесущей способности и прочностным характеристикам в сильном магнитном поле.

В настоящей работе представлены результаты электрофизических исследований серий образцов ВСП проводников, изготовленных в НИИЦ «Курчатовский институт» с использованием мишеней различного химического состава $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (ReBCO), где Re обозначает Y, Gd, Sm, Eu, Dy или их комбинацию. Все мишени были изготовлены в АО «ВНИИНМ». Эпитаксиальное осаждение сверхпроводящего слоя проводилось методом импульсного лазерного осаждения (PLD) на предварительно подготовленные подложки из нержавеющей стали с текстурированными слоями YSZ и CeO_2 . Для каждого типа мишени подбирался свой оптимальный режим осаждения, с точки зрения максимизации критического тока при температуре кипения азота, в собственном поле.

Подтверждено, что температура сверхпроводящего перехода приблизительно линейно зависит от ионного радиуса соответствующего редкоземельного элемента: Y ($R=1.015 \text{ \AA}$, $T_c=89.9 \text{ K}$), Dy ($R=1.03 \text{ \AA}$, $T_c=91.4 \text{ K}$), Gd ($R=1.06 \text{ \AA}$, $T_c=93.0 \text{ K}$), Eu ($R=1.07 \text{ \AA}$, $T_c=92.7 \text{ K}$), Sm ($R=1.08 \text{ \AA}$, $T_c=92.8 \text{ K}$). При увеличении толщины сверхпроводящего слоя величина критического тока выходит на насыщение, что связано с ухудшением качества текстуры. Это означает что плотность критического тока не одинакова по толщине, что приводит к нетривиальным эффектам. Оценены токи насыщения в пределе больших толщин, и показано возрастание от $\sim 350 \text{ A}$ до $\sim 900 \text{ A}$ в ряду $\text{Y} \rightarrow \text{Dy} \rightarrow \text{Eu} \rightarrow \text{Gd} \rightarrow \text{Sm}$, ток приведен на сантиметр ширины ленты.

Измерены угловые зависимости критического тока в полях до 1,5 Тл при температуре кипения азота (77.4 К). Наибольшей анизотропией обладают ленты на основе DyBCO (фактор анизотропии, т.е. отношение критического тока при ориентации поля в плоскости ленты, перпендикулярно току, к критическому току при ориентации поля по нормали к ленте - 4). В случае Eu наблюдается дополнительный широкий пик при ориентации поля по нормали к ленте и фактор анизотропии снижается до 0,9. Среди исследованных ReBCO наименьший критический ток при 77 К у YBCO. При этом для гелиевой температуры (4,2 К), эти ленты демонстрируют наибольшую токнесущую способность, что, по-видимому, обусловлено появлением частиц Y_2O_3 , выступающих в роли эффективных центров пиннинга.

Структура и электронные характеристики композитов на основе нанокремнезема и оксидов металлов: экспериментальный и *ab initio* анализ

Сачков В. А.¹, Несов С.Н.¹, Болотов В.В.¹

¹ФГБУН ОНЦ СО РАН

e-mail: vikansach@gmail.com

Оксиды олова и титана являются перспективными материалами для изготовления чувствительных электродов в литий-ионных батареях и химических источников тока [1]. Оксиды металлов, как правило, являются полупроводниками с низкой электропроводностью, что снижает их электрохимические характеристики. Поэтому в качестве пористой матрицы для получения композитов используются различные типы проводящих углеродных материалов, таких как графены, технический углерод, углеродные нановолокна и углеродные нанотрубки (УНТ) [2]. Химическая инертность углеродных материалов ограничивает равномерное распределение оксидов металлов по их поверхности, что снижает возможность получения композитов с воспроизводимыми морфологией, структурой и стабильными свойствами. Методы, используемые для функционализации УНТ – обработка в различных агрессивных средах или применении ионно-плазменных видов обработки [3]. Применение функционализации приводит к увеличению количества структурных дефектов, оборванных химических связей и закреплению функциональных групп на углеродной поверхности, которые в свою очередь, выступают в качестве мест надежного закрепления металлов или их оксидов. Тип взаимодействия на интерфейсе определяет адгезионные характеристики, а также значительно сказывается на транспорте зарядов. Поэтому комплексный экспериментальный и теоретический анализ атомной, электронной структуры функционализированных УНТ является актуальной задачей для получения материалов с повышенными характеристиками.

В настоящей работе в качестве экспериментального материала исследовалась структура композитов на основе многостенных углеродных нанотрубок и оксидов олова и титана. Осаждение оксидов металлов проводилось с применением метода магнетронного распыления. В качестве метода функционализации поверхности использовано облучение непрерывным пучком ионов аргона. С применением рентгеновских методов были получены данные о химическом состоянии поверхности МУНТ и оксидов металлов вблизи интерфейсов. Методами электронной микроскопии зафиксировано повышение адгезии и равномерности распределения оксидов металлов к поверхности МУНТ, обработанных ионным пучком.

«*Ab initio*» анализ интерфейсов проводился с использованием теории функционала плотности в приближении (GGA PBE for Solids). Моделирование было основано на экспериментальных данных. Расчеты показали, что при наличии структурных дефектов и функциональных групп на графеновой поверхности и на интерфейсах композитов происходит формирование устойчивых комплексов М-О-С (М = Sn, Ti) с частичной гибридизацией валентных электронов металла, кислорода и углерода. На это указывает анализ изменения электронной плотности и значений энергии связи.

Анализ полных и частичных плотностей состояний вблизи уровня Ферми для различных конфигураций кластеров оксидов титана и олова, взаимодействующих с дефектной углеродной поверхностью, позволил исследовать их электронную структуру. Установлено, что характер

проводимости на интерфейсах может иметь как металлический, так и полупроводниковый характер. В определенных случаях наблюдалось формирование запрещенной зоны.

Полученные в работе результаты могут быть использованы при разработке методов получения композитных материалов на основе наноуглерода и оксидов различных металлов с воспроизводимой структурой и характеристиками для практических применений.

Работа выполнена в рамках государственного задания ОНЦ СО РАН (номер госрегистрации проекта

121021600004-7).

Список литературы

1. H. Yoo, G. Lee, J. Choi, Binder-free SnO₂-TiO₂ composite anode with high durability for lithium-ion batteries, RSC Adv. 9 (2019) 6589–6595, <https://doi.org/10.1039/C8RA10358E>.
- 2.
3. J. Piwek, A. Platek, K. Fic, E. Frackowiak, Carbon-based electrochemical capacitors with acetate aqueous electrolytes, Electrochim. Acta 215 (2016) 179–186, <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2016.08.061>.
- 4.
- 5.

Исследование фотоиндуцированных процессов в единичных твердотельных нанопорах с интегрированными плазмонными структурами

Ваулин Н. В.^{1,2}, Афоничева П.К.², Лебедев Д.В.^{1,2,3}, Букатин А.С.^{1,2}, Мухин И.С.¹, Евстапов А.А.²

¹СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, ² ИАП РАН, ³ СПбГУ

e-mail: nikitavaylin@mail.ru

Сегодня нанопоровые технологии позволяют детектировать [1], анализировать [2] и манипулировать [3] малыми концентрациями веществ (аналита). Такие возможности стали основой для нового класса устройств, направленного на анализ биологических соединений и секвенирование ДНК. Принцип работы микрофлюидного нанопорового устройства заключается в измерении ионного тока, протекающего через единичную пору. В момент прохождения через пору (транслокации), молекула аналита частично перекрывает её внутренний объем, вызывая скачкообразное изменение уровня тока. Величина изменения тока зависит от электрохимических свойств молекулы аналита и поверхности поры, а также от отношения их размеров.

Факторами, ограничивающими применение твердотельных нанопор, являются низкое отношение сигнал/шум и высокая скорость транслокации. Способом решения этих проблем является формирование плазмонных структур в области нанопоры [4]. При облучении плазмонных структур светом на резонансной частоте происходит локальное усиление электромагнитного поля вблизи нанопоры. Локализованное электромагнитное поле может быть использовано в качестве оптического пинцета для управления транспортом молекул через нанопору и снижения скорости транслокации. Благодаря резонансному поглощению, плазмонные структуры также могут использоваться для эффективного локального нагрева окружающего пространства, увеличивая проводимость поры и повышая точность детектирования [5].

В данной работе исследуются образцы SiN мембран толщиной до 20 нм с интегрированными Au плазмонными bow-tie антеннами, между которыми сформированы одиночные нанопоры. Первым этапом формирования образцов является рост слоя SiN на Si подложке методом LP-CVD. Далее методами плазмохимического травления формируется «свободно подвешенная» SiN мембрана. На мембране методами электронной литографии формируются Au bow-tie антенны, представляющие собой 2 треугольника, направленные вершинами друг к другу. Расстояние между ближайшими вершинами антенн составило ~10 нм. Между антеннами, литографией сфокусированным электронным пучком образуются единичные нанопоры диаметром ~5 нм.

Экспериментальные исследования фотоиндуцированных процессов в нанопорах заключаются в измерении тока, текущего через образец в проточной микрофлюидной ячейке, заполненной раствором KCl 1M + IPA (1:1), при заданной разности потенциалов. Образцы облучались лазерным излучением ($\lambda=632$ нм) и излучением в широком спектральном диапазоне (галогенная лампа). Исследовались как мембраны с интегрированными нанопорами, так и сплошные мембраны. При облучении нанопор лазерным излучением мощностью 10 мВт, равновесный уровень тока возрастает на 10,37%. При облучении образцов излучением с широким спектром, ток растет на 27,8%. Сплошные мембраны не демонстрируют повышения равновесного уровня тока при аналогичном облучении, однако на них присутствуют кратковременные, скачкообразные изменения уровня тока, соответствующие моментам включения/выключения

излучения. Это можно объяснить генерацией/рекомбинацией фотоэлектронов на поверхности кремниевой подложки и поверхностных состояниях мембраны. Данный эффект не приводит к изменению проводимости мембраны, однако дополнительно заряжает/разряжает двойные электрические слои (ДЭС), вызывая кратковременные изменения тока. Повышение уровня равновесного тока в нанопоровых образцах может быть связано с ростом проводимости поры за счет изменения конфигурации ДЭС на её стенках и локальным нагревом из-за плазмонных структур.

Проведенные исследования позволят лучше понять влияние излучения на транспортные характеристики нанопор. Это необходимо для дальнейших работ по увеличению отношения сигнал/шум и улучшению сенсорных свойств структур. Исследование влияния излучения на плазмонные структуры позволит лучше управлять молекулярным транспортом через нанопоры.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-74-10117)

Список литературы

1. Spitzberg, Joshua D., et al. "Plasmonic-nanopore biosensors for superior single-molecule detection." *Advanced Materials* 31.23 (2019): 1900422.
2. Wang, Rui, et al. "Single-molecule discrimination of labeled DNAs and polypeptides using photoluminescent-free TiO₂ nanopores." *ACS nano* 12.11 (2018): 11648-11656.
3. Garoli, Denis, et al. "Plasmonic nanopores for single-molecule detection and manipulation: toward sequencing applications." *Nano letters* 19.11 (2019): 7553-7562.
4. Shi, Xin, et al. "Integrating Sub-3 nm Plasmonic Gaps into Solid-State Nanopores." *Small* 14.18 (2018): 1703307.
5. Nicoli, Francesca, et al. "DNA translocations through solid-state plasmonic nanopores." *Nano letters* 14.12 (2014): 6917-6925.

Моделирование солнечного элемента на основе гетероперехода $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{ZnO}$.

Гуляева И. А.¹, Саенко А.В.¹, Петров В.В.¹
¹ИНЭП ЮФУ

e-mail: *tenirka@mail.ru*

В данной работе проведено численное моделирование солнечного элемента на основе нанокристаллических пленок на основе оксида кобальта и чистого оксида цинка, синтезированных методом твердофазного пиролиза [1]. Исследовано влияние концентрации акцепторов в слое Co_3O_4 на фотоэлектрические параметры солнечного элемента. Моделирование проводилось в программе численного моделирования SCAPS-1D (симулятор емкости солнечных элементов) [2].

При моделировании рассматривался солнечный элемент, состоящий из: фронтального контакта (Indium-Tin Oxide), фотоактивного слоя р-типа Co_3O_4 , фотоактивный кристалл кремния n-типа (ZnO), и тыльный контакт (Co). Для полупроводниковых слоев эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным $2 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$, а тепловая скорость носителей заряда 10^7 см/с . Ширина запрещенной зоны для слоя Co_3O_4 составила 1,5 эВ, а для слоя ZnO $E_g=3,3 \text{ эВ}$. Сродство к электрону (χ) для слоя Co_3O_4 составило 3,8 эВ, а для ZnO $\chi=4 \text{ эВ}$. Для слоя Co_3O_4 эффективная плотность состояний для зоны проводимости N_C составляла $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а для валентной зоны $N_V=1,1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Для слоя ZnO $N_C=2,2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $N_V=1,8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. При моделировании принималось, что основными дефектами в слое Co_3O_4 являются вакансии кислорода, которые также являются акцепторами. Механизм рекомбинации описывался согласно теории Шокли-Рида-Холла. Работа выхода из фронтального контакта (ITO) составляла 4,4 эВ, а из тыльного контакта (Co) – 5 эВ [3].

Основным фактором, влияющим на его фотоэлектрические параметры, является концентрация акцепторов в слое Co_3O_4 . Для исследования этого фактора на фотоэлектрические параметры солнечного элемента проведено моделирование при изменении концентрации акцепторов в слое Co_3O_4 в диапазоне от 10^{16} - 10^{18} см^{-3} , концентрации доноров в ZnO равной 10^{19} см^{-3} , подвижности дырок в ZnO равной $25 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, подвижность электронов равна $100 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Для слоя Co_3O_4 концентрация электронов и дырок была равна 1,5.

При увеличении концентрации акцепторов в слое Co_3O_4 поглощается меньшее количество фотонов с длиной волны до границы поглощения, что приводит к генерации меньшего количества избыточных носителей заряда и, соответственно, уменьшению плотности тока короткого замыкания с $18,295 \text{ мА/см}^2$ до $7,188 \text{ мА/см}^2$. Увеличение концентрации акцепторов в слое Co_3O_4 от 10^{16} до 10^{18} см^{-3} также приводит к уменьшению напряжения холостого хода в два раза с 6,7 до 3,09 В. Таким образом, оптимальная концентрация акцепторов фотоактивного слоя Co_3O_4 составляет порядка 10^{16} см^{-3} .

Используя оптимальные значения концентрации акцепторов в слое Co_3O_4 (10^{16} см^{-3}) была получена максимальная эффективность солнечного элемента на основе р-n гетероперехода

$\text{Co}_3\text{O}_4/\text{ZnO}$ равная 10,91 % (18,295 мА/см², напряжение холостого хода 6,72 В, фактор заполнения 8,87 %). Результаты могут быть использованы при разработке и формировании структур солнечных элементов на основе оксидных полупроводников.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-29-00621, <https://rscf.ru/project/22-29-00621/>) в Южном федеральном университете.

Список литературы

1. Gulyaeva I.A., Ignatieva I.O., Bayan E.M., Petrov V.V. Study Of Structural Properties And Photoconductivity Of $\text{Co}_3\text{O}_4 - \text{ZnO}$ Thin Films // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки 2022, т.15, вып.3.3. с.271-275.
2. Саенко А.В., Петров В.В. Численное моделирование структуры солнечного элемента на основе Co_3O_4 . // В сб. тр. 11-го межд. молод. симп. «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (Анализ современного состояния и перспективы развития)» («LFPM-2022»), 26-28.12.2022, г.Ростов-на-Дону. 2022. Т. 2. С.162-165.
3. Гуляева И.А., Петров В.В. Моделирование в SCAPS-1D гетеропереходов $\text{ZnO}(\text{Al})/\text{Si}(\text{p})$ // В сб. тр. 11-го межд. молод. симп. «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (Анализ современного состояния и перспективы развития)» («LFPM-2022»), 26-28.12.2022, г.Ростов-на-Дону. 2022. Т. 2. С. 138-140.

Синтез субмикронных GaAs слоев на кремнии для приборов оптоэлектроники

Лендяшова В. В.¹, Илькив И.В.², Бородин Б.Р.³, Сошников И.П.³, Резник Р.Р.², Цырлин Г.Э.¹

¹Алфёровский университет

²СПбГУ

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: erilerican@gmail.com

Интеграция полупроводниковых структур на основе соединений A^3B^5 на кремний представляет значительный интерес в связи с перспективами создания на их основе оптоэлектронных интегральных схем с более высоким быстродействием и низким энергопотреблением [1,2]. Один из наиболее перспективных подходов основан на монокристаллической интеграции путем прямого синтеза A^3B^5 структур на кремниевых подложках. Несмотря на то, что к настоящему времени были достигнуты определенные успехи в области получения планарных A^3B^5 гетероструктур на кремнии, в т.ч. создании на их основе инжекционных лазеров с непрерывным режимом работы при комнатных температурах [3] синтез буферных слоев с высоким кристаллическим качеством до сих пор представляет высокую технологическую сложность и является весьма ресурсозатратным. Это связано с тем, что для улучшения кристаллического качества формируемых на кремнии A^3B^5 слоев, в частности, подавления возникновения дислокаций и антифазных доменов является необходимостью формирование толстых (порядка 3-5 мкм) буферных слоев с градиентным составом [4,5] и упругонапряженными сверхрешетками [6,7], использование Si(100) подложек с отклонением 4-6° в направлении [110] [6] и т.д. Поэтому все более актуальными становятся исследования, направленные на уменьшение толщины буферных слоев и использование массивов самоорганизующихся A^3B^5 квантовых точек (КТ) в качестве активной области структуры. Связано это, главным образом, с меньшим влиянием дислокаций на массивы КТ, что позволяет регистрировать более интенсивный по сравнению с гетероструктурами на основе квантовых ям сигнал излучения. Настоящая работа посвящена изучению процессов формирования субмикронных GaAs слоев методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) на подложках кремния различной ориентации с последующим созданием на их основе гетероструктур с внедренными КТ.

Синтез структур осуществлялся с использованием МПЭ установки Riber Compact 21 EB200, оборудованной эффузионными источниками для роста A^3B^5 соединений, а также электронно-лучевыми испарителями для Si и Ge. В качестве подложек использовались пластины Si(100) как с разориентацией 4°, так и сингулярные. Сначала осуществлялось жидкофазное химическое травление подложек с последующим термическим отжигом в ростовой камере при 900°C для удаления тонкого слоя оксида и формирование буферного слоя Si слоя толщиной 50 нм при 600°C. После этого температура подложки опускалась до 550°C и выращивался слой GaAs толщиной 150 нм. Затем при температуре 450°C были выращены слои GaAs (50 нм)/In_{0.1}Ga_{0.9}As (100 нм)/GaAs (50 нм). Поверх них выращивался при температуре 550°C слой GaAs толщиной 0.5 мкм, после чего осуществлялся циклический термический отжиг. Морфология полученных структур исследовалась методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ).

В результате проведенных работ было показано, что разработанный многостадийный подход к синтезу позволяет получать буферные GaAs слои с толщиной порядка 850 нм и шероховатостью до 3 нм. При этом было установлено, что слои, выращенные на Si(100) 4°, обладают шероховатостью порядка 2 нм. В то же самое время слои, выращенные на Si(100) подложках, обладают более гладкой и однородной поверхностью ($R_{\text{rms}} \sim 1.5$ нм). Таким образом, данный метод роста GaAs слоев может позволить использовать их в качестве буферных для последующего синтеза гетероструктур с InAs КТ.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (0791-2023-0004). Исследование морфологии образцов выполнено в рамках исследовательского гранта СПбГУ № 94031047.

Список литературы

1. Thomson D. et al, Roadmap on silicon photonics, Journal of Optics, T. 18(7), 073003, 2016
2. Chen X. et al, The emergence of silicon photonics as a flexible technology platform, Proceedings of the IEEE, T. 106(12), 2101-2116, 2018
3. Jiang C. et al, Demonstration of room-temperature continuous-wave operation of InGaAs/AlGaAs quantum well lasers directly grown on on-axis silicon (001), Applied Physics Letters, T. 121(6), 061102, 2022
4. Tanoto H. et al, Electroluminescence and structural characteristics of InAs/In_{0.1}Ga_{0.9}As quantum dots grown on graded Si_{1-x}Ge_x/Si substrate, Applied Physics Letters, T. 95(14), 141905, 2009
5. Loke W. K. et al, In_{0.3}Ga_{0.7}As heterojunction bipolar transistor grown on GeSi substrate for high-frequency application, Materials Science in Semiconductor Processing, T. 146, 106663, 2022
6. Kunert B. et al, How to control defect formation in monolithic III/V hetero-epitaxy on (100) Si? A critical review on current approaches, Semiconductor Science and Technology, T. 33(9), 093002, 2018
7. Norman J. C. et al, A review of high-performance quantum dot lasers on silicon, IEEE Journal of Quantum Electronics, T. 55(2), 1-11, 2019

Разработка технологии плазмохимического осаждения фосфида бора при низкой температуре

Максимова А. А.¹, Уваров А.В.¹, Баранов А.И.¹, Вячеславова Е.А.¹ и Гудовских А.С.¹

¹СПБАУ РАН

e-mail: *deer.blackgreen@yandex.ru*

Фосфид бора (BP) является новым материалом для использования в фотовольтаике, который обладает рядом привлекательных характеристик. BP химически инертен, устойчив к окислению при больших температурах, обладает высокой теплопроводностью и механической стабильностью [1]. Также было теоретически показано, что BP один из самых перспективных материалов для создания прозрачных проводящих покрытий р-типа, так как является непрямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 2 эВ, при этом ширина зоны для прямого перехода составляет 4 эВ, что предполагает низкие оптические потери [2]. Благодаря этому, использование фосфида бора для создания солнечных элементов (СЭ) может способствовать увеличению тока короткого замыкания по сравнению с использованием аморфного гидrogenизированного кремния (a-Si:H). С другой стороны, отрицательный (-0.3 ± 0.1 эВ) разрыв валентной зоны (ΔE_V) для границы раздела BP/Si [3] обеспечивает необходимую селективность, что делает фосфид бора отличным кандидатом в качестве селективного дырочного контакта, не требуя дополнительного слоя оксида индия-олова (ITO) [4].

Для большинства приборов в фотовольтаике, в том числе солнечных элементов, предпочтительна низкая температура осаждения слоев для снижения общей стоимости производства. В данной работе слои фосфида бора были выращены методом плазмохимического осаждения на подложках кристаллического кремния (100) при низкой температуре (350 °C). В качестве прекурсоров были использованы смеси диборана (B_2H_6/H_2) и фосфина (PH_3/H_2) с водородом, осаждение производилось при разных мощностях плазмы (20-200 Вт) в течение 20 минут. Был проведен быстрый термический отжиг структур при высокой температуре 700 °C в инертной атмосфере. Также были исследованы структурные и композиционные свойства слоев с помощью растрового электронного микроскопа и спектроскопии комбинационного рассеяния.

Согласно результатам, полученным с помощью РЭМ и комбинационной спектроскопии, слои имеют аморфную структуру, и их толщина составляет порядка 200-300 нм. Спектры комбинационного рассеяния всех образцов показали уширенные пики при 450 см^{-1} и $\approx 700 \text{ см}^{-1}$ соответствующие аморфному фосфиду бора [5]. Отжиг образцов оказал влияние на структуру слоев и привел к частичной кристаллизации, был детектирован пик кристаллического фосфида бора при 823 см^{-1} . Таким образом, впервые было проведено успешное осаждение фосфида бора при низкой температуре.

Список литературы

1. Neuberger M. III–V Semiconducting Compounds. Springer US, 1971.
2. Varley J.B. и др. High-Throughput Design of Non-oxide p-Type Transparent Conducting Materials: Data Mining, Search Strategy, and Identification of Boron Phosphide // Chemistry of Materials. American Chemical Society (ACS), 2017. Т. 29, № 6. С. 2568–2573.
3. King S.W. и др. Valence Band Offset at a-B:H and a-BP:H/Si Interfaces // ECS Journal of Solid State Science and Technology. The Electrochemical Society, 2012. Т. 1, № 5. С. P250–P253.
4. Гудовских А.С. и др. Формирование селективного контакта BP/Si с помощью низкотемпературного плазмохимического осаждения // Письма в журнал технической физики. Ioffe Institute Russian Academy of

Sciences, 2021. Т. 47, № 2. С. 49.

5. На V.-А. и др. Boron phosphide as a p-type transparent conductor: Optical absorption and transport through electron-phonon coupling // Physical Review Materials. American Physical Society (APS), 2020. Т. 4, № 6.

Влияние композиционного и структурного беспорядка на свойства двумерных полупроводников A^{III}B^{VI}

Степанов Р. С.¹, Марланд П. И.¹ Анисимова Н. И.¹ Колобов А. В.¹

¹РГПУ

e-mail: *step-rom-serg@mail.ru*

Двумерные (2D) полупроводники A^{III}B^{VI}, такие как InSe и GaSe, привлекают большое внимание в связи с перспективами их использования в различных приложениях микроэлектроники. Квазидвумерный полупроводник InSe привлекателен благодаря рекордно высокой подвижности носителей заряда и сильно анизотропным свойствам. Кроме того, в нем отсутствуют оборванные связи и поверхностные состояния [1]. Также InSe позволяет варьировать ширину запрещенной зоны в широком диапазоне (от 1,4 до 2,6 эВ) за счет изменения количества слоев [2], а взаимодействие Ван дер Ваальса между этими слоями, позволяет создавать гетероструктуры практически независимо от постоянных решетки [3].

Одним из возможных способов расширения функциональности материалов является изготовление квазибинарных сплавов. Параметры кристаллической структуры в таких материалах изменяются, в основном линейно, в соответствии с законом Vegarda [4], хотя возможно и более сложное поведение [5]. Предметом данной работы являются квазибинарные сплавы InSe-GaSe, изучаемые с помощью моделирования из первых принципов на основе теории функционала плотности. В работе изучено влияние композиционного и структурного беспорядка на электронные и оптические свойства слоистых квазибинарных селенидов галлия и индия. Исследуются также различия свойств в зависимости от взаимного расположения слоев InGaSe (при одноосном сжатии и скольжении слоев относительно друг друга).

В работе получены данные зависимости зонной структуры от распределения катионов индия и галлия. Нами отмечено уменьшение ширины запрещенной зоны при случайном распределении катионов индия и галлия и при распределении соответствующему конфигурации Se-In-Ga-Se - VdW - Se-In-Ga-Se. При остальных конфигурациях происходит увеличение ширины запрещенной зоны. Обнаружено значительное влияние расстояния между слоями на ширину запрещенной зоны при сжатии вдоль оси с. Можно предположить, что это свойство можно использовать для создания гибких электронных устройств с возможностью внешнего воздействия. В то же время существенного влияния латерального смещения слоев на электронную структуру обнаружено не было. Выявлено значительное увеличение ширины запрещенной зоны для случая со смесью β и γ фаз. Продемонстрирована анизотропия оптических свойств и появление хвоста оптического поглощения в структурах со случайным расположением катионов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766).

Список литературы

1. Sánchez-Royo J. F. et al. Optical and photovoltaic properties of indium selenide thin films prepared by van der Waals epitaxy // *Journal of Applied Physics*. – 2001. – Т. 90. – №. 6. – С. 2818-2823.
2. Venanzi T. et al. Photoluminescence dynamics in few-layer InSe // *Physical Review Materials*. – 2020. – Т. 4. – №. 4. – С. 044001.
3. Kim S. J. et al. Materials for flexible, stretchable electronics: graphene and 2D materials // *Annual Review of Materials Research*. – 2015. – Т. 45. – С. 63-84.

4. Srour J. et al. Crystal structure and energy bands of (Ga/In) Se and Cu (In, Ga) Se₂ semiconductors in comparison //Physica Status Solidi (b). – 2016. – T. 253. – №. 8. – C. 1472-1475.
5. Bodlos R. et al. Ab initio investigation of the atomic volume, thermal expansion, and formation energy of WTi solid solutions //Physical Review Materials. – 2021. – T. 5. – №. 4. – C. 043601.
- 6.

Электронный транспорт и динамика разрушения филаментов в мемристивной системе наночастиц серебра

Василевская Ю. О.^{1,2}, Савицкий А.И.², Сибатов Р.Т.²

¹Национальный исследовательский университет "МИЭТ", кафедра квантовой физики и наноэлектроники, Зеленоград, Москва, Россия

²НПК "Технологический центр", Зеленоград, Москва, Россия

e-mail: fedorovauo@mail.ru

Среди наиболее перспективных архитектур для нейроморфных вычислений можно выделить систему взаимосвязанных переключающих элементов – мемристоров, выполняющих роль нейрона в этих устройствах. По сути мемристор является нелинейным двухполюсным электрическим компонентом, способным изменять сопротивление в зависимости от предыстории приложенного к нему напряжения. С момента предсказания мемристора Чуа [1] и его физической реализации [2], было представлено множество технологических подходов к его формированию и описанию основных физических принципов работы [3]. Литографические методы изготовления мемристоров являются дорогостоящими в связи с необходимостью детерминистически создавать точные и надежные наноразмерные межсоединения, в связи с чем, разрабатывается альтернативный подход – самоорганизация нейроморфной сети «снизу вверх» за счет образования проводящих соединений (филаментов) между наночастицами или нанопроволоками различных металлов [4].

В данной работе с помощью расчётов на основе теории функционала плотности и метода неравновесных функций Грина исследован квантовый электронный транспорт между наночастицами серебра с образовавшимися наростами, впоследствии формирующими филамент. Рассчитаны спектры пропускания для различных конфигураций и получены зависимости кондактанса от расстояния между крайними атомами. С помощью метода молекулярной динамики исследована кинетика образования и разрушения филаментов из атомов серебра различной структуры. Задачи моделирования были реализованы с помощью программного обеспечения QuantumATK. Полученные зависимости кондактанса и времени разрушения филаментов от расстояния между нанoeлектродами и от толщины филаментов могут быть использованы в вероятностной модели случайных скачков сопротивления в мемристивных устройствах. Далее обсуждаются необходимые обобщения модели работы [5] в соответствии с полученными результатами численного эксперимента: в частности, допускается неэкспоненциальная зависимость темпов скачков сопротивления от напряжения и немарковский характер случайных блужданий в пространстве сопротивлений.

Для проверки выводов, сформулированных на основе численных результатов, были изготовлены и исследованы перколяционные мемристивные массивы наночастиц серебра. Использовались планарные структуры на термически окисленной кремниевой подложке со сформированными на ней двумя золотыми электродами прямоугольной формы. В зазоре величиной 2 мкм между электродами формировался массив серебряных наночастиц методом двухстадийного вакуум-термического испарения с последующей термообработкой после каждой стадии испарения. Полученный массив наночастиц можно рассматривать как сложную перколяционную сеть, представляющую естественную твердотельную систему с нейроморфным поведением. Предложенная модель оказалась способной описать динамику сопротивления при постоянном напряжении и переключения между емкостным и мемристивным состояниями в таких системах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FNRМ-2022-0008).

Список литературы

1. Chua L. Memristor-the missing circuit element // IEEE Transactions on circuit theory. – 1971. – Т. 18. – №. 5. – С. 507-519.
2. Strukov D. B. et al. The missing memristor found // Nature. – 2008. – Т. 453. – №. 7191. – С. 80-83.
3. Caravelli F., Carbajal J. P. Memristors for the curious outsiders // Technologies. – 2018. – Т. 6. – №. 4. – С. 118.
4. Sangwan V. K., Hersam M. C. Neuromorphic nanoelectronic materials // Nature nanotechnology. – 2020. – Т. 15. – №. 7. – С. 517-528.
5. Dowling V. J., Slipko V. A., Pershin Y. V. Probabilistic memristive networks: Application of a master equation to networks of binary ReRAM cells // Chaos, Solitons & Fractals. – 2021. – Т. 142. – С. 110385.

Эффективные модули упругости нанокompозита с аморфной матрицей.

Семенов А. А.¹, Коных Д.А.¹, Бельтюков Я.М.¹,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: aleksandr.semenov@mail.ioffe.ru

Аморфные стеклообразные материалы обладают пространственно-неоднородными микроскопическими упругими свойствами из-за их неупорядоченной структуры [1], что приводит к необходимости изучения неаффинных деформаций аморфных твердых тел при однородном напряжении. Наличие неаффинных деформаций наблюдается в ряде аморфных материалов, которыми, в том числе, являются полимеры, такие как полистирол и полиметилметакрилат.

Добавление наночастиц в полимерную матрицу даже в небольших концентрациях может приводить к значительным изменениям упругих свойств [2], что вызывает значительный интерес к таким нанокompозитным материалам [3]. Важной характеристикой аморфных нанокompозитов является соотношение характерных размеров аморфной среды и масштабов неаффинных деформаций. Если масштаб неаффинных деформаций много меньше размера аморфной среды, то для описания механических свойств такой системы можно использовать классическую теорию упругости с макроскопическими модулями упругости. Однако в нанокompозитных системах содержащих аморфные материалы, некоторые области могут иметь небольшие характерные размеры, сравнимые с масштабом неаффинности. В таком случае необходимо учитывать влияние неаффинных деформаций на границах раздела аморфной матрицы и включений, что невозможно в рамках классической теории упругости [4, 5]. При этом влияние частиц на эффективные модули упругости композита существенно растет при уменьшении размеров включений до размеров сравнимых с масштабом неаффинности, при той же объемной доли включений.

С помощью аппарата метода случайных матриц, мы показали, что локальные упругие свойства аморфных материалов могут быть описаны с помощью уравнения

$$\alpha(\mathbf{r}) = 1 + \xi^2 \Delta \ln \alpha(\mathbf{r}),$$

где $\alpha(\mathbf{r})$ — эффективный локальный упругий контраст с упругими свойствами матрицы вдали от границ с другими материалами, а ξ — масштаб неаффинных деформаций.

Для анализа упругих свойств аморфных нанокompозитов мы рассмотрели численную модель нанокompозита с аморфной матрицей. В качестве модели рассматривался композит с периодически расположенными кубическими ячейками со сферическими включениями радиуса R , расположенными в центре каждой ячейки. Такая модель позволила изучать распределение упругих деформаций внутри одной ячейки с одним включением.

С помощью численного решения уравнения (1), мы получили распределение упругого контраста в аморфной матрице, усредненного по различным конфигурациям беспорядка. Результаты показывают, что вокруг наночастицы образуется область, в которой упругие модули существенно превосходят соответствующие объемные значения. Полученное распределение $\alpha(\mathbf{r})$ в пространстве позволило применить классическую теорию упругости для нахождения

макроскопических эффективных упругих свойств рассматриваемого нанокompозитного материала.

Мы получили значения модуля объемного сжатия K и модуля сдвига G в зависимости от радиуса наночастицы. Было показано, что при масштабе неаффинных деформаций $\xi = 0$ (среда без беспорядка), макроскопические модули упругости композита полностью соответствуют значениям модулей посчитанных с помощью классических уравнений Мори-Танака. Однако в случае, когда $\xi \sim R$, значения упругих модулей композита становятся существенно превосходящими предсказания теории Мори-Танака. При этом, нами было показано, что формулы Мори-Танака остаются применимыми, если считать радиус включений эффективно увеличенным на величину порядка масштаба неаффинных деформаций ξ .

Авторы благодарят Российский научный фонд за финансовую поддержку (грант № 22-72-10083).

Список литературы

1. K. Yoshimoto, T. S. Jain, K. Van Workum, P. F. Nealey, and J. J. de Pablo, *Physical Review Letters* 93, 175501 (2004).
2. S.-Y. Fu, X.-Q. Feng, B. Lauke, and Y.-W. Mai, *Composites Part B: Engineering* 39, 933 (2008).
3. Y. Mai and Z. Yu, *Polymer Nanocomposites*, Woodhead Publishing Series in Composites Science and Engineering (Elsevier Science, 2006).
4. А.А. Семенов, Д.А. Конюх, Я.М. Бельтюков, Неаффинные деформации и локальные упругие свойства аморфных наноструктур, *ФТТ* 64, 8 (2022)
5. Y. M. Beltukov, D. A. Conyuh, and I. A. Solov'yov, *Physical Review E* 105, L012501 (2022).

Наноразмерное профилирование полупроводниковых структур для устройств кремниевой фотоники

Морозова Ю. В.¹, Климин В. С., Кесслер И. О., Маркитан Д. В.

¹ЮФУ

e-mail: *ulamrzv@gmail.com*

Целью данной работы является изучение закономерностей влияния режимов плазмохимической обработки в разряде комбинированной плазмы на геометрические параметры полученных на поверхности пластин кремния наноразмерных структур для создания устройств кремниевой фотоники. В ходе экспериментальных исследований процесс травления разделялся на два этапа, включающих в себя обработку индуктивно-связанной плазмой и емкостной плазмой. В результате экспериментальных исследований были получены структуры высотой 245,2 нм с шероховатостью $1,56 \pm 0,1$ нм и углом наклона структуры 21,2 град.

В настоящее время большой интерес вызывает разработка устройств кремниевой фотоники [1]. Данному направлению посвящено большое количество теоретических и экспериментальных исследований, среди которых можно выделить вопросы, связанные с процессами формирования упорядоченных кремниевых наноразмерных структур [2]. Наиболее перспективным методом создания наноразмерных структур, отличающихся контролируемыми параметрами, является фотолитография с последующим плазмохимическим травлением [3]. Данные процессы требуют изучения влияния режимов обработки в разряде комбинированной плазмы на параметры сформированных наноразмерных структур [4]. Целью данного исследования являлось определение закономерностей получения наноразмерных кремниевых структур методом плазмохимического травления в комбинированном плазменном разряде для последующего применения структур в кремниевой фотонике.

В ходе экспериментальных исследований использовались подложки n-Si (100), которые проходили предварительные этапы очистки. Следующим этапом являлось формирование маскирующего покрытия из плазмостойкого фоторезиста SPR-220 фотолитографическим методом. Далее проводилось плазмохимическое травление с использованием фторидной плазмы. Основными химически активными частицами при травлении кремния являются атомы фтора, а при реактивном ионном травлении частично радикалы SF_5 . Процесс травления разделен на два этапа, так как в разряде комбинированной плазмы присутствуют физическая и химическая составляющие. На первом этапе изучалось влияние мощности источника индуктивно-связанной плазмы (ИСП) на высоту, шероховатость и угол наклона стенки структур при плазмохимической обработке, на втором этапе определялось влияние мощности источника емкостной плазмы (ЕСП) и напряжения смещения на высоту, шероховатость и угол наклона стенки структур при плазмохимической обработке.

В результате исследований было установлено, что зависимости высоты структуры и шероховатости от мощности источника ИСП, имеют линейный характер. При повышении мощности шероховатость уменьшается, что объясняется эффектом плазмохимической полировки. При увеличении источника мощности ИСП увеличивается угол наклона стенки структуры, вследствие увеличения анизотропии процесса. Кроме того, при увеличении мощности источника ЕСП, высота структуры увеличивалась, за счет увеличения потока заряженных частиц к подложке, а угол наклона стенки структуры уменьшался. Таким образом были получены

структуры высотой 245,2 нм с шероховатостью $1,56 \pm 0,1$ нм и углом наклона структуры 21,2 град.

Таким образом, с помощью проведенных исследований были установлены закономерности влияния режимов плазмохимической обработки в разряде комбинированной фторидной плазмы на геометрические параметры полученных на поверхности пластин кремния наноразмерных структур.

Список литературы

1. Seo, D., Bae, J. S., Oh, E., Kim, S. & Lim, S. // J. Vac. Sci. Technol., B. 2012. V. 30. Art No. 06FF02.
2. Dowling, K.M.; Ransom, E.H.; Senesky, D.G., J. // Microelectromech. 2017. V. 26. P. 135–142.
3. Osipov A.A., Iankevich G.A., Speshilova A.B., Osipov A.A., Endiarova E.V., Berezenko V.I., Tyurikova, I.A., Tyurikov, K.S., Alexandrov, S.E. // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 19977.
4. Tasaka A., et al. // J. Vac. Sci. Technol. 2007. V. 25. P. 391.

Формирование кристаллических кремниевых структур на нановолокнистых нетканых материалах с помощью лазер-стимулированной металл-индуцированной кристаллизации

Сердобинцев А. А.¹, Карташова А.М.¹, Волковойнова Л.Д.¹,

¹СГУ им. Н. Г. Чернышевского

e-mail: *SerdobintsevAA@sgu.ru*

В настоящее время идет активное развитие микроэлектроники, одним из основных используемых материалов которой был и остается кремний. В связи с этим разработка технологических подходов для формирования кремниевых структур на новых типах подложек не теряет своей актуальности [1]. Формирование структур на гибких полимерных подложках может быть основой для реализации биосенсоров или устройств для преобразования солнечной энергии, которые с легкостью принимают необходимую форму и обладают небольшими весом и толщиной.

В настоящей работе кристаллические кремниевые структуры формировались на нановолокнистых нетканых материалах, полученных методом электроформования из раствора полиакрилонитрила. На нетканую подложку наносился слой аморфного кремния методом магнетронного распыления. Затем полученная структура подвергалась лазерному отжигу, причём использовался лазер с длиной волны 1064 нм для минимизации воздействия отжига на подложку. Так как кремний практически не поглощает в этом диапазоне, необходимо либо повышение мощности лазера, либо использование поглощающего материала. Второй вариант представляется более перспективным, так как снижает энергозатраты и сохраняет ресурс лазера. В рамках концепции поглощающего слоя разработана и успешно апробирована методика лазер-стимулированной металл-индуцированной кристаллизации [2], которая будет применена и в этой работе. Кроме того, ранее было обнаружено явление автокристаллизации кремния при совместном напылении Si и Al из двух магнетронных источников [3]. Такой подход также будет апробирован в настоящей работе.

В качестве поглощающего материала в настоящей работе использовался алюминий. Было получено и исследовано три типа образцов: образец из чистого кремния (образец сравнения); образец, состоящий из смеси кремния с алюминием (получен совместным распылением Si и Al из двух магнетронных источников); образец, состоящий из слоя кремния, покрытого слоем алюминия (последовательное напыление Si и Al). Мощность магнетронов, время их работы, давление в рабочей камере и прочие характеристики были неизменны во всех процессах.

На предварительном этапе для каждого образца был определён наиболее предпочтительный режим лазерного отжига. В результате было выделено три режима, которые затем были применены для лазерного отжига различных участков каждого из трёх образцов. Режимы были подобраны таким образом, что разрушения нановолокнистой подложки или отслоения кремниевого покрытия не происходило.

Проверка наличия кристаллизованной фазы осуществлялась при помощи спектроскопии комбинационного рассеяния. Наибольшее содержание кристаллической фазы (более 93 %) обнаружено в образце, состоящем из двух слоев, причём такой результат был достигнут в двух режимах отжига из трёх. Образец, являющийся смесью кремния с алюминием, кристаллизован лишь на 50 %, также в двух режимах отжига. Образец из чистого кремния кристаллизован лишь

на 6,25 % при использовании наиболее интенсивного по степени воздействия режима, в остальных режимах кремний остается аморфным.

В заключение можно сказать, что использование алюминия в качестве отдельного поглощающего слоя представляется наиболее эффективным подходом к формированию кристаллических кремниевых структур на нановолокнистых нетканых подложках. Смешивание кремния и алюминия в одном слое приводит к примерно в два раза меньшей степени кристаллизации по сравнению с отдельными слоями. Чистый кремний без поглощающего материала ожидаемо кристаллизуется наименее эффективно.

Список литературы

1. Do Y., Jeong D.Y., Lee S., Kang S., Jang S. and Jang J., Remarkable Improvement in Foldability of Poly-Si Thin-Film Transistor on Polyimide Substrate Using Blue Laser Crystallization of Amorphous Si and Comparison with Conventional Poly-Si Thin-Film Transistor Used for Foldable Displays. *Adv. Eng. Mater.*, Volume 22, 1901430, 2020.
2. Serdobintsev A.A., Kozhevnikov I.O., Starodubov A.V., Ryabukho P.V., Galushka V.V. and Pavlov A.M., Scalable Approach for Amorphous Thin Silicon Films Near-IR Laser-Induced Crystallization Using Nickel Absorption Layer. *Phys. Status Solidi A*, Volume 216, 1800964, 2019.
3. Serdobintsev A.A., Galushka V.V., Volkovoyanova L.D., Kozhevnikov I.O., Prikhozhenko E.S., Artyukhov D.I., Gorshkov N.V., Pavlov A.M., Starodubov A.V., Controlled autocrystallization in magnetron co-sputtered Si-Al films, *Vacuum*, Volume 203, 111304, 2022.

Органическая макромолекула на свободном и эпитаксиальном графене в модели HOMO - LUMO

Давыдов С.Ю.¹, Лебедев А. А.¹

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе

e-mail: shura.lebe@mail.ioffe.ru

Выявленная в работе [1] уникальная способность детектировать адсорбцию одиночной молекулы сделала графен одним из самых привлекательных материалов для резистивных газовых сенсоров, а в последнее время и для биосенсоров [2]. Характерные объекты исследования в последнем случае – макромолекулы (ММ), – представляют собой системы (бляшки– plaques) с большим количеством атомов и линейными размерами порядка сотни Å. Причем ни геометрия такой бляшки, ни площадь ее контакта с подложкой не только неизвестны, но и не являются строго фиксированными. Ясно, что прямое применение методов DFT (density functional theory) в данном случае затруднительно. Поэтому в работе [3] для описания связи (адгезии) ММ с однолистным графеном (SLG) была предложена модель оборванных связей (DBM – dangling bonds model), которые как раз и считались ответственными за сшивку (stitching) ММ с SLG. В рамках DBM благодаря упрощенной схеме рассмотрения задачи удалось получить аналитические выражения для перехода заряда и энергии адгезии. В настоящей работе для тех же целей предлагается двухуровневая модель макромолекулы, нижний полностью заполненный уровень которой обозначается как HOMO (higher occupied molecular orbital), а пустой верхний уровень – как LUMO (lower unoccupied molecular orbital). Такую модель мы в дальнейшем будем именовать HLM (HOMO-LUMO model).

Как и в [3], в качестве источников оборванных связей рассмотрим следующие молекулярные фрагменты ММ: O₂, NO, NH, CH₂, NH₂ и CH₃. Считаем при этом, что именно эти фрагменты граничат с SLG. Для ММ, адсорбированной на SLG, энергии HOMO и LUMO положим равными. Воспользовавшись далее методами теории адсорбции [4], легко найти плотности состояний, числа заполнения и соответствующие заряды и для взаимодействующих со свободным графеном HOMO и LUMO. Считая, что интегралы перехода электрона между ММ и SLG одинаковы для HOMO и LUMO и равны \int , получаем \int , где \int – интеграл перехода электрона между ближайшими атомами в графене, за нуль энергии принята точка Дирака. Суммарный заряд, переходящий с ММ на SLG, равен \int , т.е. переход заряда между ММ и недопированном SLG отсутствует. При \int величина \int возрастает, а \int убывает, в результате чего SLG обогащается электронами и обретает n-тип проводимости. При \int картина обратная, и SLG имеет p-тип проводимости.

В случае адсорбции ММ на эпитаксиальном графене (эпиграфене) применима та же схема рассмотрения, что и для свободного графена. Особое внимание уделено подложкам – политипам SiC: 3C, 8H, 6H, 4H, 27R, 21R, 15R. Показано, что в случае недопированных политипов значения чисел заполнения HOMO и LUMO в ряду 3C → 4H, соответствующему увеличению степени гексагональности политипа, возрастают, а суммарный заряд на ММ убывает. При этом электроны переходят в SLG, который приобретает заряд \int . Таким образом, наибольший заряд получает SLG, сформированный на 3C-SiC. Следует добавить, что на переход заряда между ММ и SLG/политип SiC влияет выбор грани политипа. Так, например, для структуры SLG/6H-SiC работы выхода электрона для Si-и C-граней различаются на ~ 1.5 eV.

С теоретической точки зрения НЛМ является частным случаем DBM [3]. Действительно, в рамках НЛМ учитываются только две связи ММ с подложкой (НОМО и LUMO), и ММ рассматривается как целое. Согласно DBM, с подложкой взаимодействует набор отдельных (не зависящих друг от друга) молекулярных фрагментов ММ, каждому из которых приписывается его собственная связь с подложкой. Однако в ситуации, когда экспериментальная информация крайне ограничена, НЛМ представляется вполне приемлемой моделью для первичных оценок перехода заряда.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФ 22-12-00134 (С.Ю.Д). Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

1. F. Schedin, A.K. Geim, S.V. Morozov, E.W. Hill, P. Blake, M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov. *Nature Mater.* 6, 652 (2007).
2. A.A. Lebedev, S.Yu. Davydov, I.A. Eliseyev, A.D. Roenkov, O. Avdeev, S.P. Lebedev, Y. Makarov, M. Puzyk, S. Klotchenko, A.S. Usikov. *Materials* 14, 590 (2021).
3. С.Ю. Давыдов. *ФТТ* 64, 2050 (2020).
4. С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем*. СПб.: Изд-во «Лань», 2014.

Исследование возможности повышения годовой выработки электроэнергии за счет использования кремниевых солнечных элементов с наноструктурированной поверхностью

Ярчук Э. Я.¹, Вячеславова Е. А.², Гудовских А. С.^{1,2}, Шварц М. З.³

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

²Академический университет

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *ernst_yarchuk@mail.ru*

Одной из главных задач развития солнечной энергетики является постоянное улучшение параметров солнечных элементов, а также поиск материалов и соединений, которые могут быть применены для улучшения выходных характеристик и повышения выходной мощности. Существенной проблемой солнечной энергетики является потеря значительной части энергии света из-за отражения от поверхности солнечного элемента, которая наиболее остро проявляется на больших углах падения солнечных лучей при использовании солнечных элементов в стационарных энергетических системах без применения систем слежения за источником света.

Обращаясь к «солнечным» материалам, к рассмотрению предлагается модификация кремния – так называемый чёрный кремний (black silicon, b-Si, ЧК). Такой вид кремния представляет собой особую структуру из нановолокон конической формы субмикронных величин, получаемых методом криогенного травления в индуктивно-связанной плазме [1]. Его главная особенность и преимущество заключается в более низком коэффициенте отражения на значительной части солнечного спектра, который, в среднем, на порядок ниже, чем у поверхности обычных образцов кремния, применяемого в солнечной энергетике [2].

В настоящей работе проведено экспериментальное исследование зависимости полного отражения от поверхности двух образцов чёрного кремния от длины волны солнечного спектра в диапазоне от 300 нм до 1200 нм в сравнении с отражением от поверхности образца текстурированного кремния, выполненного по технологии НТТ, по той же части спектра. Измеренные зависимости полного отражения по спектру были пересчитаны в средневесовой показатель отражения (Weighted Average Reflectance – WAR) для учёта всех возможных реальных углов падения солнечного света и получены зависимости для данных образцов [3]. Также рассчитана потенциальная годовая выработка электроэнергии солнечными элементами на основе данных образцов.

Полученные результаты измерений и вычислений подтверждают теоретические расчёты и доказывают повышение эффективной выработки электроэнергии солнечных элементов на основе чёрного кремния при его использовании в реальных солнечных установках. Так, коэффициент отражения для чёрного кремния в процентах до двух раз ниже в зависимости от конкретной длины волны, а уменьшение средневесового показателя отражения для образцов чёрного кремния в процентах составляет до четверти в зависимости от образца и от угла падения лучей в сравнении с образцом текстурированного кремния. При этом годовой прирост выработки электроэнергии при использовании черного кремния составляет 7,34% и 6,33% для СЭ с отражательной способностью двух полученных для исследования образцов соответственно при оптимальном угле наклона системы относительно земной поверхности.

Анализ полученных данных показал, что наибольший эффект и прирост производительности достигается при наибольших углах падения света на солнечный элемент, то есть в реальных условиях – в утренние и вечерние часы световых суток при установке солнечного элемента под оптимальным углом для конкретного месторасположения и времени года, что объясняется морфологией поверхности чёрного кремния.

Список литературы

1. Study of Cryogenic Unmasked Etching of “Black Silicon” with Ar Gas Additives / E.A. Vyacheslavova, I.A. Morozov, D.A. Kudryashov, A.V. Uvarov, A.I. Baranov. A.A. Maksimova, S.N. Abolmasov and A.S. Gudovskikh, ACS Omega 2022, 7, 7, 6053-6057
2. Silver catalyzed nano-texturing of silicon surfaces for solar cell applications / S.K. Srivastava, D. Kumar, Vandana, M. Sharma, R. Kumar, P.K. Singh, Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 100 (2012) 33
3. Performance and durability of broadband antireflection coatings for thin film CdTe solar cells / G. Womack, P.M. Kaminski, A. Abbas, K. Isbilir, R. Gottschalg, and J.M. Walls, J. Vac. Sci. Technol. A 35, 021201 (2017) 1–11

Наноструктурированные биоцидные композиты на основе ЭПР-активных биядерных 1,10-фенантроцианинов (би-1,10-фенантролиленов) Zn(II), Cd(II), Mn(II) и Co(II) – мягких коллоидных стекол с температурно-доступными низшими электронными триплетными состояниями

Демидов В.Н.¹, Иванова А.Г.¹, Богомолова Е.В.², Сухаржевский С.М.³, Ефимова Л.Н.¹, Вошиков В.И.¹, Глебова И.Б.¹, Пахомова Т.Б.⁴, Пастон С.В.³

¹Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН

²Ботанический институт им. В.Л. Комарова РАН

³Санкт-Петербургский государственный университет

⁴Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет)

e-mail: vndemidov@mail.ru

Наноструктурированные металл-содержащие композиционные материалы захватывают все большие сферы применения, проникая в различные новые и нетрадиционные области, например, биомедицинскую, включая металло-лекарства, а также технологию органо-неорганических экологически безопасных биоцидных составов («зеленые» биоциды) [1] для защиты от биоразрушения и (био)коррозии. В настоящей работе представлены результаты физико-химического исследования (методами ИК-спектроскопии, электронной спектроскопии поглощения, спектроскопии ЭПР, измерения электропроводности, вязкости и поверхностного натяжения растворов) новых наноразмерных биядерных металло-1,10-фенантроцианинов (металло-би-1,10-фенантролиленов), содержащих редокс-индифферентные ионы Zn(II) [Ar]3d¹⁰ и Cd(II) [Kr]4d¹⁰, а также редокс-активные ионы Mn(II) [Ar]3d⁵ и Co(II) [Ar]3d⁷ – мягких коллоидных (рентгено-аморфных) стекол. Структура новых биядерных комплексов может быть отражена формулами: (phen)_nM²⁺(μ-PCN)M²⁺(phen)_n(⁻OAc)₄, (phen)_nM²⁺(μ-PC⁻)M²⁺(phen)_n(OAc)₃ (первичные *пурпурно-фиолетовые формы*, начальная и депротонированная) и (phen)_nM²⁺(μ-PCN')M²⁺(phen)_n(OAc)₄ (*редокс-производные желто-коричневые формы*) M²⁺ = Zn²⁺, Cd²⁺, Mn²⁺, Co²⁺, phen = 1,10-фенантролин, μ-PCN, μ-PC⁻, μ-PCN' – мостиковые хромофорные фармакофорные 1,10-фенантроцианиновые (би-1,10-фенантролиленовые) лиганды, ⁻OAc – ацетатные анионы, n = 0-2). Они являются аналогами известных, но практически не изученных апохиноцианиновых хромофоров [2]. Для соединений характерны формирование полукolloидных растворов и твердое стеклообразное состояние (*мягкие коллоидные стекла*).

Синтез этих веществ осуществлен путем методологии прямой CН-функционализации электрон-дефицитных N-герероаренов, согласно развиваемым нами методам металл-ассистированного недегидрогенативного (суммарно изогипсического) C(sp²)H-сочетания координированных 1,10-фенантролинов [3] в расплавах 1,10-фенантролиновых ацетатов, предшественников M²⁺(phen)_n(OAc)₂, n = 1-3. Представленные комплексы являются наноразмерными (наноструктурированными) как в твердом стеклообразном состоянии, так и во многих органических растворителях, а также в воде. Они обладают высокой биологической активностью (бактерио-, виро-, фунги- и цитостатической) [3] и проявляют свойства комплексонов ДНК. У этих соединений методом спектроскопии ЭПР в стеклообразном состоянии и в растворах обнаружены термически индуцируемые переходы из основного синглетного

состояния в температурно-доступное низшее по энергии электронное триплетное бирадикальное состояние.

На основе 1,10-фенантроцианинов (би-фенантролиленов) нами созданы наноструктурированные биоцидные композиты (полимерсодержащие жидкие составы), позволяющие защищать древесные, бетонные и стальные материалы от биоразрушения (биокоррозии) под действием микромицетов, в том числе биообрастания морскими и речными организмами и химической коррозии за счет формирования на поверхности таких материалов наноструктурированных биоцидных защитных твердых пленок. Результаты физико-химического исследования таких пленок также будут представлены в докладе.

Работа была выполнена в ИХС РАН в рамках темы госуд. бюджета: «Физико-химич. основы неорг. синтеза микро- и нанострукт. неорг., органо-неорг. и керамич. материалов и покрытий для био-, энерго- и ресурсосберег. технологий» (1021050501070-0-1.4.3, № 0097-2022-0006); а также в БИН РАН, тема госуд. бюджета: «Биоразнообразие, экология и структурно-функц. особенности грибов и грибоподобных протистов» (122011900033-4).

Исследование ЭПР комплексов было проведено в РЦ «МРМИ» СПб ГУ на спектрометре ELEXSYS E580 (X-ДИАПАЗОН).

Список литературы

1. Muhammad Aqeel Ashraf, Saleem Ullah, Irshad Ahmad, et al. 2014. V. 94 (3). P. 388-403. <https://doi.org/10.1002/jsfa.6371>.
2. Mustroph H. / Phys. Sci. Rev. 2021. V. 6. No. 6. P. 175-177. <https://doi.org/10.1515/psr-2020-0147>.
3. Демидов В.Н. Автореф. дисс. д.х.н. Санкт-Петербург, СПб ГТИ (ТУ), 2010.

Рамановская спектроскопия для характеристики поликристаллов детонационного наноалмаза

Трофимук А. Д.¹, Шаронова Л.В.¹, Кидалов С.В.¹, Швидченко А.В.¹, Кириленко Д.А.¹, Стовпяга Е.Ю.¹, Дидейкин А.Т.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: trofimuk.ad@mail.ioffe.ru

Детонационные наноалмазы (ДНА) получают в результате контролируемого подрыва взрывчатых веществ при отрицательном балансе кислорода [1]. Продуктом синтеза являются наноразмерные кристаллиты ДНА (диаметр кристалла порядка 3-8 нм), соединённые друг с другом в крупные образования (до 200 нм) [2]. Характер связи между кристаллитами в продуктах детонации зачастую различный: “мостиковые” ковалентные связи с ионами металлов, спекание с аморфным sp^2 -углеродом или же ван-дер-ваальсово взаимодействие кристаллитов гранями. Развитые в последние годы методы химической очистки и деагрегации позволяют выделять отдельные кристаллиты ДНА с размером 5 нм, однако более половины массы продукта не поддаётся деагрегации. Задача всесторонней характеристики недеагрегируемых кристаллитов ДНА принципиально важна: понимание структуры таких структур и характера связи между кристаллитами напрямую определит новые химико-физические подходы к очистке и более полной деагрегации и понимания процессов, происходящих при детонационном синтезе.

Физические эффекты, лежащие в основе спектроскопии комбинационного рассеяния (рамановской спектроскопии), зависят в первую очередь от природы исследуемого материала, а также размеров кристаллов и наличия люминесцирующих центров. В данной работе мы определяем специфические особенности в рамановских спектрах различных порошков ДНА, позволяющие не только однозначно характеризовать структуру образцов с различной морфологией, но и установить природу связи между индивидуальными кристаллитами, в том числе – в поликристаллах.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе (№ 0040-2019-0013). ПЭМ-исследования проводились на оборудовании ФЦКП «Материаловедение и характеристика в передовых технологиях» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Рентгеновские исследования проведены на оборудовании Инжинирингового центра СПбГТИ(ТУ). Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (Договор 17912ГУ/2022).

Список литературы

1. Detonation Nanodiamonds: Science and Applications // A. Vul', O. Shenderova, eds. New York: Jenny Stanford Publishing, 2013. 346 p.
2. Eidelman E.D. et al. A stable suspension of single ultrananocrystalline diamond particles // Diamond and Related Materials. 2005. V. 14. P. 1765–1769.

Квантовый транспорт во фрактальных решетках с кулоновским взаимодействием

Конобеева Н. Н.¹, Трофимов Р.Р.¹, Белоненко М.Б.¹

¹ВолГУ

e-mail: *yana_nn@volsu.ru*

Целью настоящей работы является исследование квантового переноса, а, именно, динамики электронной плотности во фрактальной решетке. Считаем, что фрактальная решетка составлена из нанопроволок, и имеет вид треугольника Серпинского в направлении перпендикулярном направлению распространения электронов.

Хорошо известно, что фракталы представляют собой сложную структуру с дробной размерностью и обладают свойством самоподобия [1]. Их часто используют при описании различных явлений и процессов. Но более важным их применением является возможность получать новые научные результаты в различных предметных областях, в том числе в физике.

Что касается квантового транспорта, то необходимо отметить, что уже проведены некоторые исследования в этой области. Изучен квантовый перенос одиночных фотонов в фотонной решетке с фрактальной структурой [2]. Ведется разработка и исследование новых материалов с фрактальной структурой, в которых возможен электронный транспорт [3]. Однако взаимодействие между квантовым переносом и фрактальностью все еще требует дополнительного изучения. Отметим, что в вышеупомянутых исследованиях использовалось одноэлектронное приближение. В данной работе мы будем исследовать процесс переноса электронов во фрактальных структурах в многоэлектронном приближении, что меняет динамику волновой функции. Это позволит выявить особенности свойств материалов с такой структурой, которые могут внести существенный вклад в разработку новых устройств с фрактальной геометрией.

Гамильтониан электронной системы может быть записан с использованием модели Хаббарда [4]:

$$H = - \sum_{mj\sigma} \gamma_{mj} a_{m\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_m U a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma} a_{m-\sigma}^+ a_{m-\sigma}$$

здесь γ_{mj} – интеграл перескока между узлами m и j во фрактальной решетке (между ближайшими соседями), U – величина кулоновского отталкивания электронов на одном узле, $a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma}$ – операторы рождения/уничтожения электронов на m -ом узле со спином σ (минус перед σ означает «спин вниз»).

Далее записывалось уравнение движения Гейзенберга и осуществлялся переход к континуальному пределу вдоль оси нанопроволоки. Получено уравнение, описывающее динамику распространения волн электронной плотности в волноводной структуре с фрактальной геометрией, которое решалось численно.

В результате проведенного исследования обнаружено, что полученные решения имеют доменную структуру, то есть области с различной плотностью электронов. Наличие такой структуры может оказаться полезным для обнаружения эффектов памяти в электронной подсистеме фрактальных волноводов.

Авторы благодарят за поддержку численного моделирования с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов Российский Научный Фонд (проект № 23-71-00016).

Список литературы

1. B.B. Mandelbrot. The fractal geometry of nature. New York: Times Books, 1982, 468 p.
2. X.-Y. Xu, X.-W. Wang, D.-Y. Chen, C.M. Smith, X.-M. Jin. Nature Photonics, V. 15, P. 703–710 (2021).
3. S.N. Kempkes, M.R. Slot, S.E. Freeney, S.J.M. Zevenhuizen, D. Vanmaekelbergh, I. Swart, C. Morais Smith. Nature Physics, V. 15, P. 127–131 (2019).
4. J. Hubbard. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, V. 276 (1365), P. 238–257 (1963).

Особенности фазового перехода в тонких пленках суперионного полупроводника AgI

Кононов А. А.¹, Ильинский А.В.², Кастро Р.А.¹, Климов В.А.², Пашкевич М.А.³, Попова И.О.¹, Шадрин Е.Б.²

¹РГПУ

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³СПбПУ

e-mail: kononov_aa@icloud.com

В последние годы большой интерес вызывают исследования твердотельных материалов с ионной проводимостью, которые получили название «суперионники» [1-4]. Перспективная для практического использования особенность таких материалов, заключается в том, что они имеют высокие значения ионной проводимости в твердом состоянии. Такая особенность является крайне редкой, так как, в отличии от суперионников, большинство материалов достигают высокой ионной проводимости уже после плавления, а жидкое состояние материала имеет серьёзные проблемы в отношении его практического использования. Соответственно, твердотельные суперионники являются весьма перспективными для практического использования в различных электронных устройствах благодаря наличию в них ионной проводимости после совершения суперионного фазового перехода при сохранении твердотельного состояния.

Исследование фазовых переходов в твердых телах является предметом многочисленных исследований, и одним из высокоинформативных методов в данном направлении является метод диэлектрической спектроскопии (ДС) [5-7]. Данный метод позволяет производить косвенные наблюдения за динамикой релаксационных процессов, имеющих место в исследуемом материале и происходящих при изменении частоты внешнего электрического поля и температуры образца. Метод ДС крайне чувствителен даже к незначительным изменениям в структуре и свойствах материалов, а анализ экспериментальных результатов значительно расширяет представления о механизме фазовых превращений в исследуемых образцах.

В качестве объекта исследований был выбран йодид серебра (AgI), который является классическим суперионным полупроводником. Образцы представляли собой тонкие кристаллические пленки на слюдяных подложках. Диэлектрические измерения были выполнены на спектрометре «Concept 81» Novocontrol Technologies (Междисциплинарный ресурсный центр коллективного использования РГПУ им. А. И. Герцена "Современные физико-химические методы формирования и исследования материалов для нужд промышленности, науки и образования"). Диэлектрические спектры измерялись в частотном диапазоне 10^{-1} Hz – 10^7 Hz. Температура образца T с шагом 5°C варьировалась в интервале 20 – 240°C.

Частотные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь $tg\delta$ показывают существование релаксационного процесса в области средних частот при температурах ниже фазового перехода. Исследования показали, что при нагреве до температуры фазового перехода ($\sim 150^\circ\text{C}$) частота главного релаксационного процесса резко смещается с 2000 Гц при 140°C до 620 кГц при 150°C . Интересно отметить, что при снижении температуры образца переход в полупроводниковое состояние происходит при более низкой температуре, чем температура перехода в суперионное состояние при нагреве, т.е. наблюдается явление гистерезиса.

Обнаруженные особенности фазового перехода в суперионном полупроводнике AgI можно объяснить сменой преобладающего типа проводимости с ростом температуры, а также активизацией процесса генерации более подвижных кинетических единиц при фазовом переходе полупроводник-суперионник. Более подробно эти вопросы рассмотрены в тексте доклада.

Список литературы

1. Вергентьев Т. Ю. и др. Поведение низкочастотной проводимости нанокompозитного йодида серебра в области суперионного фазового перехода, Физика твердого тела, том. 55(1), 157-162, 2013
2. Абдулгафаров Р. Р., Цыганкова Л. В., Бухарбаев Д. Н. Изучение фазового перехода в суперионных проводниках, Двадцать шестая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных. ВНКСФ–26, Уфа, ООО \"Альтаир\", 321-322, 2020
3. Биккулова Н. Н. и др. Размытый фазовый переход из суперионного в несуперионное состояние в монокристалле $Cu_{1.8}Se$, Кристаллография, том. 58(4), 603-603, 2013
4. Сидоров Н. В. и др. Суперионный фазовый переход в твердых растворах, Особенности ингибирования кислотной коррозии стали непердельными альдегидами, 232-233, 2013
5. Ильинский А. В. и др. Фазовый переход полупроводник–суперионик в пленках сульфида серебра, Физика твердого тела, том. 62(12), 2138-2146, 2020
6. Kononov A. A. et al. Dielectric relaxation in amorphous and crystalline Sb_2Te_3 thin films, Journal of Materials Science: Materials in Electronics, том. 32(10), 14072-14078, 2021
7. Castro R. A. et al. Dielectric and structural study of polymer composites based on polyethylene and barium titanate, AIP Conference Proceedings, AIP Publishing LLC, Vol. 1859, article 020002, 2017

Формирование канального кремния для создания фильтрующих слоев

Ивлев К. Е.¹, Болотов В.В.¹, Пономарева И.В.¹, Князев Е.В.¹

¹ОНЦ СО РАН

e-mail: *ivlev@obisp.oscsbras.ru*

Макропористый кремний является перспективным материалом для производства различных устройств, поскольку есть возможность формировать массивы каналов с различными диаметрами. На основе макропористого кремния (размеры пор > 50 nm) создают такие устройства, как литий-ионные батареи, газовые и биосенсоры, а также фильтры и сорбенты [1,2]. Ранее были получены пористые мембраны, частично сорбирующие диоксид азота [3]. В данной работе рассмотрены особенности формирования канального кремния с использованием освещения для создания фильтрующих слоев.

Образцы пористого кремния формировались на пластинах КЭФ 1 (100) методом анодного травления в электролите состава HF:C₂H₅OH 1:1 в двухкамерной электрохимической ячейке, оснащенной сапфировым окном для освещения кремния в процессе получения. Исследовалось влияние интенсивности света от лампы накаливания мощностью 95 Вт и 300 Вт. Плотность тока при травлении для всех образцов была 100 мА/см². В таком режиме формируются макропоры диаметром 100-300 нм, стенки макропор покрыты слоем микропористого кремния. После получения образцы промывались водой и выдерживались в 0,1 М растворе NaOH для удаления микропористого кремния. При этом диаметры макропор увеличиваются до 400-600 нм. Таким образом, возможно варьирование морфологии пор в широких пределах.

В отсутствие освещения большое анодное напряжение приводит к генерации электронно-дырочных пар благодаря лавинному пробоею на дефектных местах поверхности кремния. Эти места становятся точками растворения кремния, через них в основном протекает ток пробоя. Электрические пробои так же происходят и на стенках пор, что приводит к росту боковых пор (боковое ветвление). Без освещения толщина слоя микропористого кремния составляет порядка 70 нм, а в образцах, полученных с освещением, она возрастает до 200 нм. Во всех образцах после экспозиции в щелочи на поверхности стенок пор наблюдаются пирамидальные лунки. Форма лунок указывает на иерархическую структуру микропористого кремния, бывшего на их месте. Иерархическая структура формируется благодаря тому, что от главных пор в направлениях <100> отходят боковые меньшего размера, от боковых в таких же направлениях распространяются поры еще меньшего размера и т.д. С помощью экспозиции в щелочи пористых слоев получены каналы с диаметрами 200-600 нм, которые можно использовать для создания фильтрующих мембран.

Работа выполнена в рамках государственного задания Омского научного центра СО РАН (номер госрегистрации проекта 12021600004-7). В работе было использовано оборудование Омского регионального центра коллективного пользования СО РАН.

Список литературы

1. Y. Yu, L. Gu, C. Zhu, S. Tsukimoto, P.A. Van Aken, J. Maier, Reversible Storage of Lithium in Silver-Coated Three-Dimensional Macroporous Silicon, *Adv. Mater.* 22 (2010) 2247–2250.
2. L. Yoo et al. / *Biosensors and Bioelectronics* 41 (2013) 477–483.

3. В.В. Болотов, К.Е. Ивлев, Е.В. Князев, И.В. Пономарева, В.Е. Росликов, Физика и техника полупроводников, 2020, том 54, вып. 5, С. 504-509.

Исследование процессов электрохимического осаждения Ni на массивы GaAs нитевидных нанокристаллов

Кузьмин В. А.¹, Монастыренко А. О.², Березовская Т. Н.², Мохов Д. В.², Буравлев А. Д.^{1, 3, 4, 5}

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

²СПбАУ РАН

³Университет при МПА ЕврАзЭС

⁴ФТИ им. А. Ф. Иоффе

⁵ИАП РАН

e-mail: *Vkuzmin98@yandex.ru*

В последнее время пристальное внимание уделяется исследованиям полупроводниковых нитевидных нанокристаллов (ННК), поскольку они обладают уникальными оптическими и электрофизическими свойствами. На сегодняшний день уже были продемонстрированы различные прототипы устройств как на одиночных, так и вертикально-стоящих массивах ННК. Тем не менее до сих пор одним из сдерживающих факторов для широкого распространения приборов на их основе являются технологические сложности, связанные, в том числе, с созданием электрических контактов. На сегодняшний день одним из более перспективных подходов для создания электрических контактов к вертикально-стоящим массивам ННК может быть использование метода электрохимического осаждения [1]. Более того, с помощью данного метода можно осуществлять и контролируемое осаждение металлических наночастиц (НЧ) с целью формирования гибридных структур типа металлические НЧ/полупроводниковый ННК [2]. Подобные гибридные структуры могут демонстрировать улучшенные характеристики, связанные, например, с более эффективным поглощением света и интенсивным излучением вследствие поверхностного плазмонного резонанса.

В данной работе представлены результаты исследования процессов электрохимического осаждения атомов никеля (Ni) на массивы вертикально-стоящих GaAs ННК, синтезированные при помощи метода молекулярно-пучковой эпитаксии. Было продемонстрировано, что в зависимости от технологических параметров процесса электрохимического осаждения, состава электролита, а также свойств GaAs ННК можно осуществлять как формирование сплошного равномерного слоя Ni на GaAs ННК, так и контролируемое осаждение Ni НЧ с целью создания гибридных структур Ni НЧ/GaAs ННК.

Список литературы

1. Dimaggio E., Penelli G., Reliable Fabrication of Metal Contacts on Silicon Nanowire Forests, American Chemical Society, 16, 4348-4354, 2016
2. Jin Y., Yang L., Pan C., Shi Z., Cui B., Xu P., Tong L., Strong coupling of a plasmonic nanoparticle to a semiconductor nanowire, Nanophotonics, 10, 2875-2881, 2021.

Влияние степени и типа функционализации на проводимость углеродных нанотрубок

Капустин С. Н.¹,

¹САФУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: *hare22@yandex.ru*

Углеродные нанотрубки (УНТ) являются одним из наиболее перспективных материалов для внедрения в промышленное производство. Как и графен они обладают хорошими перспективами в качестве функциональной добавки в композитные материалы – как керамические, так и полимерные. Более отдаленной - но и более интересной перспективой является возможность использования их в молекулярной электронике.

Электрофизические свойства УНТ [1] определяются в основном их хиральностью и концентрацией дефектов. Задача получения УНТ заданной хиральности довольно сложна, поэтому на практике приходится довольствоваться усредненными характеристиками перколяционной сети УНТ или сепарацией УНТ нужного типа, например методом электрофореза. Однако существует и другая возможность – модификация электрофизических свойств УНТ.

В предыдущих работах [2] мы обнаружили, что процесс функционализации УНТ (химическая пришивка функциональных групп) влияет на зонную структуру нанообъекта аналогично процессу допирования полупроводников. Факт изменения электрофизических свойств УНТ при функционализации в литературе фиксировался не однократно, но сравнивать эти данные проблематично из-за разницы в исходных материалах. Влияние концентрации функциональных групп и их типа на проводимость УНТ не было детально исследовано.

Зависимость проводимости перколяционной сети УНТ от степени функционализации имеет нелинейный характер, химическая обработка способна корректировать проводимости и значительно менять вид температурных зависимостей. Имеется пик зависимости проводимости УНТ от концентрации функциональных групп. При малой степени функционализации проводимость растет из-за изменения геометрии трубки и уменьшения ширины запрещенной зоны. При увеличении концентрации сверх оптимальной проводимость УНТ начинает убывать из-за увеличения числа дефектов

Оценен вклад различных загрязнений в проводимость перколяционной сети УНТ: очистка УНТ имеет смысл только вместе с последующим отжигом и устранением дефектов, а очистка же УНТ только от аморфного углерода не является особо востребованной процедурой, так как незначительно повышает проводимость перколяционной сети и создает дополнительные дефекты. Очистка и функционализация позволяют потенциально значительно изменить электрофизические свойства углеродной нанотрубки, изменяя ее проводимость от диэлектрика до металла.

Полученные данные особо интересны, что при функционализации меняются не только электрофизические свойства УНТ, но и теплопроводность, сорбционная емкость, адгезия к полимерам, прочность агломератов УНТ, армирующая способность наночастиц по отношению к полимерам.

В ходе выступления мы планируем представить частотные (от 1 до 10^6 Гц) и температурные (от - 150 до +100 С) зависимости электропроводности и теплопроводности УНТ при различных степенях функционализации для гидроксильных (-ОН), карбоксильных (-СООН) и амидных групп (-CONH₂). Рассчитаны энергии активации носителей перколяционной сети.

Список литературы

1. Елецкий, А. В. Углеродные нанотрубки, Успехи физических наук, том. 167, 945–972, 1997
2. Капустин, С. Н. Зависимость проводимости углеродных нанотрубок от степени их функционализации, Физический вестник ВШЕНиТ САФУ, том 17, 83-89, 2017

Управление проводимостью полимеров никель-саленового ряда в каналах электрохимических транзисторов

Смирнова Е. А.¹, Чепурная И.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: esmirnova@mail.ioffe.ru

Органический электрохимический транзистор (ОЭХТ) представляет собой уникальную комбинацию усилительного прибора, переключателя и датчика для применения в нейроинтерфейсах, аналоговых и логических схемах, биоэлектронике, сенсорных устройствах [1]. Полимерный полупроводниковый канал между электродами стока и истока ОЭХТ отделен от электрода затвора электролитным слоем. В основе функционирования ОЭХТ лежит изменение проводимости полимерного материала при подаче на затвор управляющего напряжения вследствие электрохимического легирования полимера ионами фонового электролита в объеме канала.

Перспективные материалы каналов электрохимических транзисторов должны демонстрировать быстрое и обратимое изменение электрической проводимости на несколько порядков величины при низких значениях порогового напряжения. Ранее нами было показано, что для изготовления каналов ОЭХТ принципиально могут использоваться полимеры с ионами никеля, интегрированными на молекулярном уровне в трехмерную матрицу на основе редокс-активных саленовых лигандов [2]. Поиск инструментов управления характером изменения проводимости никель-саленовых полимеров является актуальной задачей, так как позволит существенно повысить эффективность конечных устройств на их основе.

В настоящей работе исследована проводимость полимерных комплексов никеля (II) с лигандом N,N'-бис(салицилиден)этилендиамин (поли-[NiSalen]) и его метил- и метокси-замещенными аналогами (поли-[NiCH₃Salen] и поли-[NiCH₃OSalen]) в различных диапазонах изменения управляющего напряжения. Полимерные каналы шириной 5 мкм были сформированы в зазорах между платиновыми микроэлектродами со встречно-гребенчатой структурой (IDE), образующими электроды истока и стока, методом электрохимической полимеризации из раствора комплекса. В качестве электролитного слоя между каналом и затвором использовался 0.1 М Et₄NBF₄ /CH₃CN. Измерения электрической проводимости полимеров проводились в режиме *operando* параллельно с регистрацией вольт-амперных характеристик, как описано ранее [2].

Обнаружено, что при увеличении напряжения затвор-исток сопротивление полимерного канала уменьшается, что является отражением увеличения проводимости полимера при электрохимическом легировании. Величины порогового напряжения/напряжения максимума проводимости (V_T/V_M) составляют 0.13/0.39 В (vs Ag/AgCl) для поли-[NiCH₃Salen], 0.15/0.37 В для поли-[NiCH₃OSalen] и 0.40/0.90 В для поли-[NiSalen]. Увеличение проводимости при увеличении управляющего напряжения от 0 В до V_M составляет примерно 4 порядка. Наибольшие значения проводимости обнаружены для легированного поли-[NiCH₃Salen] (15 ± 2 мСм). При обратном уменьшении напряжения от V_M до 0 В проводимость полимеров уменьшается до исходных значений. В последующих циклах включения/выключения характеристические параметры изменения проводимости существенно не меняются. При увеличении напряжения затвор-исток выше V_M сопротивление канала увеличивается по мере

того, как полимер переходит в слабо проводящую сильно легированную форму. Расширение диапазона управляющего напряжения до 0 – 1.6 В приводит к увеличению значений V_T , наиболее значительно (на 0.1 В) – в случае поли-[NiCH₃Salen], а также к уменьшению максимальной проводимости полимера, наиболее выражено (в 3 раза) – для поли-[NiSalen].

Таким образом, в работе показано, что параметры кривых проводимости никель-саленовых полимеров в каналах ОЭХТ определяются природой полимерного материала и диапазоном напряжений затвор-исток. Наиболее устойчивые характеристики получены для полимера поли-[NiCH₃OSalen], что подтверждает ранее сделанный вывод [2] о перспективности данного материала для электрохимических транзисторов. Вместе с тем, возможность достижения высокой проводимости в каналах на основе поли-[NiCH₃Salen] определяет необходимость дальнейших исследований по поиску путей повышения стабильности данного материала.

Список литературы

1. Rivnay J., Inal S., Salleo A., Owens R. M., Berggren M., Malliaras G. G., Organic electrochemical transistors, Nat. Rev. Mater., V. 3., 17086, 2018
2. Смирнова Е. А., Чепурная И. А., Зависимость электрической проводимости никель-саленовых полимеров от напряжения затвор-исток в электрохимическом транзисторе, Письма в ЖТФ, том. 48., № 1., 12-15, 2022

Влияние величины давления при импульсном лазерном осаждении на состав пленок BaTiO₃

Дзюба Д. А.^{1,2}, Вакулов З.Е.², Томинов Р.В.^{1,2}, Угрюмов И.С.^{1,2}, Смирнов В.А.^{1,2}

¹ИНЭП ЮФУ

²Научно-исследовательская лаборатория \"Нейроэлектроника и мемристивные наноматериалы\", ИНЭП ЮФУ

e-mail: dmdzyuba@sfnedu.ru

Благодаря широкому спектру возможных применений сегнетоэлектрические материалы привлекают внимание научного сообщества: энергонезависимые устройства памяти [1], преобразователи и МЭМС [2], а также устройства для сбора энергии [3]. Титанат бария (BaTiO₃) может использоваться во многих приложениях благодаря сегнетоэлектрическим свойствам, высокой диэлектрической проницаемости и большим электрооптическим коэффициентам. Для изготовления тонких пленок BaTiO₃ можно использовать магнетронное распыление, молекулярно-лучевую эпитаксию, золь-гель метод и импульсное лазерное осаждение (ИЛО). Величина давления кислорода при ИЛО является одним из ключевых параметров влияющим на механизм формирования, кристаллическую ориентацию, степень дефектности и микроструктуру пленки BaTiO₃. Таким образом, в работе исследовано влияния величины давления кислорода при ИЛО на состав, морфологические и электрофизические параметры пленок BaTiO₃.

Из обзорных спектров видно, что состав поверхности до ионного травления представлен элементами O, C, Ba. Концентрация титана на поверхности образцов до травления слишком мала и для точного количественного расчета были записаны спектры высокого разрешения. Малая интенсивность спектральных линий титана может быть связана с дефектностью пленки перовскита и поверхностным загрязнением атмосферным углеродом. Атмосферный углерод может адсорбироваться на дефектах пленки перовскита и взаимодействовать с барьером образуя карбонаты, о чем свидетельствуют форма и положение фотоэлектронных линий Ba 3d. Установлено, что после двух циклов травления, на глубине ~ 40 нм, состав образцов приближается к характеристикам перовскита и соотносится как 1Ba/1Ti/ 3O. Для образца полученного при давлении кислорода 1×10^{-2} Торр наблюдается небольшое отклонение по соотношению Ba/Ti. Сопоставив интенсивности фотоэлектронных линий Ti 2p и Ba 3d образцов в динамике, можно предположить, что данный эффект связан с разной толщиной пленок, полученных при различном давлении. Полученные результаты были использованы при изготовлении энергоэффективных мемристивных структур на основе пленок BaTiO₃.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-00216, <https://rscf.ru/project/21-79-00216/>, Южный федеральный университет (в части разработки методики исследования влияния величины давления при импульсном лазерном осаждении оксидных пленок на их параметры), а также при финансовой поддержке Правительством РФ Соглашение № 075-15-2022-1123.

Список литературы

1. Razi P.M., Gangineni R.B. Compliance current and film thickness influence upon multi-level threshold resistive switching of amorphous BaTiO₃ (am-BTO) films in Ag/am-BTO/Ag cross point structures //Thin Solid Films. – 2019. – Vol. 685. – P. 59-65.

2. Kim D. et al. Magnetolectric coupling in micropatterned BaTiO₃/CoFe₂O₄ epitaxial thin film structures: Augmentation and site- dependency //Applied Physics Letters. – 2021. – Vol. 119. – N. 1. – P. 012901.
3. Su H. et al. Enhanced energy harvesting ability of polydimethylsiloxane-BaTiO₃-based flexible piezoelectric nanogenerator fortactile imitation application //Nano Energy. – 2021. – Vol. 83. – P. 105809.
4. Vijatović M., Bobić J., Stojanović B. D. History and challenges of barium titanate: Part I //Science of Sintering. – 2008. – Vol. 40. – N. 2. – P. 155-165.

Исследование механизмов формирования карбида кремния методом замещения атомов на кремнии различных фаз

Чистиков И. Е.¹, Редьков А. В.¹, Гращенко А. С.¹

¹ИПМаш РАН

e-mail: chisilia12@gmail.com

В последние годы широкое распространение в полупроводниковых технологиях получили так называемые широкозонные полупроводники: нитриды галлия и алюминия (GaN, AlN), карбид кремния (SiC), на основе которых производят светодиоды, транзисторы с высокой подвижностью электронов, элементы силовой электроники. В [1] была разработана методика синтеза этих материалов на подложках кремния (Si) с использованием оригинального подхода – предварительного нанесения на кремниевую подложку нанослоя карбида кремния методом замещения атомов [2]. Это позволяет решить проблемы, связанные с разницей в параметрах решетки и коэффициентах теплового расширения, и уже позволило вырастить работающие макеты светодиодов [3]. Особенностью подхода является то, что рост слоя SiC происходит не сверху подложки кремния, а непосредственно в ней, путем замещения части атомов кремния атомами углерода с использованием химической реакции. При этом в процессе сохраняется исходный тип кристаллической решетки алмазоподобного кремния. Вместе с тем до конца остается неизученным, как происходит твердотельная реакция [2] с кремнием иных фаз.

В настоящей работе для исследования этого вопроса используется следующий подход. Перед процессом синтеза SiC производилось наноиндентирование поверхности Si с использованием различных типов алмазных инденторов (Берковича, сферический) и различных приложенных сил, с целью контролируемого формирования различных фаз кремния на подложке и последующего роста карбида кремния методом [2] на полученных фазах. В ходе работы при помощи конфокальной рамановской микроскопии, профилометрии, атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии были исследованы поверхностные свойства и образовавшиеся локально иные фазы кремния. Как непосредственно после индентирования, так и после формирования на нем слоя SiC, что позволило изучить особенности преобразования разных фаз Si в SiC. Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 23-72-10019).

Список литературы

1. Sharofidinov, S. S., Redkov, A. V., Osipov, A. V., Kukushkin, S. A. (2017, November). GaN growth via HVPE on SiC/Si substrates: growth mechanisms. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 917, No. 3, p. 032028). IOP Publishing.
2. Kukushkin, S. A., & Osipov, A. V. (2014). Theory and practice of SiC growth on Si and its applications to wide-gap semiconductor films. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(31), 313001.
3. Cherkashin N. A., Sakharov, A. V., Nikolaev, A. E., Lundin, V. V., Usov, S. O., Ustinov, V. M., A.S. Grashchenko, A.V. Osipov, S.A. Kukushkin, Tsatsul'nikov, A. F. (2021). Peculiarities of epitaxial growth of III–N led heterostructures on SiC/Si substrates. *Technical Physics Letters*, 47(10), 753-756.

Исследования структурных и механических свойств тонких пленок AlGaN на гибридных подложках nano-SiC/Si

Гращенко А. С.¹, Кукушкин С.А.¹, Шарофидинов Ш.Ш.²

¹ИПМаш РАН, ²ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

e-mail: asgrashchenko@bk.ru

Цель данной работы – экспериментальное изучение структурных характеристик поверхности и измерение параметров твердости и модуля упругости пленок AlGaN, выращенных на гибридных подложках nano-SiC/Si, синтезированных методом согласованного замещения атомов [1]. Как правило, пленки AlGaN, имеющие переменный состав, обозначаются химической формулой вида $Al_xGa_{1-x}N$, где x – атомная доля Al в твердом растворе $Al_xGa_{1-x}N$. Эпитаксиальные пленки твердых растворов $Al_xGa_{1-x}N$ широко используются в качестве буферных слоев для дальнейшего выращивания на их поверхности пленок полупроводников ряда соединений A_3B_5 , в частности GaN. Ширина запрещенной зоны $Al_xGa_{1-x}N$, в зависимости от содержания Al в твердом растворе, т.е. от x может изменяться от 3,4 эВ при $x=0$ до 6,2 эВ при $x=1$. Подложка оказывает существенное влияние на процессы формирования слоя $Al_xGa_{1-x}N$. Так, например, в работах [2,3] было обнаружено, что в процессе осаждения пленок $Al_xGa_{1-x}N$ на подложки SiC, выращенные на Si ориентации (011) и (111) может возникнуть явление самоорганизации, которое приводит к формированию прослоек с составом AlGaN, близким к стехиометрическому. Эти прослойки расположены между слоями $Al_xGa_{1-x}N$ с низким содержанием Al, близким по составу к GaN. Границы прослоек резкие, а расположение по толщине слоя пленки аperiодическое. Таким образом, на подложках SiC/Si можно формировать нового типа полупроводниковые композитные структуры $Al_xGa_{1-x}N$.

В настоящей работе экспериментальными методами наноиндентирования и атомно-силовой микроскопии исследованы механические характеристики и морфология поверхности эпитаксиальных слоев AlGaN, сформированных на полупроводниковых структурах nano-SiC/Si, синтезированных методом замещения атомов на Si с ориентацией (001), (011) и (111). Для всех исследуемых пленок AlGaN на nano-SiC/Si определена твердость, а также модуль упругости в объеме и вблизи поверхности. Параметры твердости и модуля упругости в объеме находили с помощью метода Оливера-Фарра [4]. Модуль упругости вблизи поверхности определяли с помощью соотношения Герца для взаимодействия жесткой сферы с упругим полупространством. Показано, что ориентация исходных подложек Si существенно влияет на параметры твердости и модуля упругости вблизи поверхности слоев AlGaN. По данным наноиндентирования твердость пленок AlGaN на nano-SiC на Si с ориентацией (001), (011) и (111) равны 15 ± 4 , 12 ± 1 и 18 ± 3 ГПа соответственно. Приведенный модуль упругости в объеме для всех пленок AlGaN в среднем равен 300 ГПа. Вблизи поверхности приведенный модуль упругости равен 150 ± 50 , 190 ± 50 и 310 ± 40 ГПа для гетероструктур AlGaN/SiC на Si с ориентацией (001), (011) и (111) соответственно. Определена шероховатость поверхности слоев AlGaN выращенных на подложках nano-SiC/Si с ориентациями Si (001), (011) и (111), которая по данным атомно-силовой микроскопии равна 810, 480 и 60 нм соответственно. Показал, что структура поверхности слоев AlGaN, выращенных на гибридных структурах SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111) кардинально отличается. В случае пленок AlGaN, выращенных на подложках Si с ориентацией (001) поверхность имеет пилообразную структуру, которая состоит из кластеров в виде хребтов. Поверхность пленок AlGaN, выращенных на подложках Si с

ориентацией (011) имеет мозаичную структуру с явно выраженными ступенями. Анализ данных атомно-силовой микроскопии слоя AlGaN, выращенного на гибридной подложке SiC/Si(111) показал, что поверхность в процесс роста сформировалась в виде холмов.

Эти данные открывают новые возможности для управления технологией получения пленок AlGaN с низкой плотностью дислокаций и трещин, что важно для их применения в микро- и оптоэлектронике.

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГПУ ИПМаш РАН по контракту № FFNF-2021-0001. Исследования проводились с использованием оборудования УНУ “Физика, химия и механика кристаллов тонких пленок” ИПМаш РАН, Санкт-Петербург.

Список литературы

1. Kukushkin S. A., Osipov A. V., Nanoscale single-crystal silicon carbide on silicon and unique properties of this material, *Inorganic Materials*, том. 57(13), 1319–1329, 2021
2. Кукушкин С.А., Шарофидинов Ш.Ш., Осипов А.В., Гращенко А.С., Кандаков А.В., Осипова Е.В., Котляр К.П., Убийвовк Е.В., Самоорганизация состава пленок Al_xGa_{1-x}N, выращенных на гибридных подложках SiC/Si, *Физика твердого тела*, том. 63(3), 363-369, 2021
3. Шарофидинов Ш.Ш., Кукушкин С.А., Старицын М.В., Солнышкин А.В., Сергеева О.Н., Каптелов Е.Ю., Пронин И.П., Структура и свойства композитов на основе нитридов алюминия и галлия, выращенных на кремнии разной ориентации с буферным слоем карбида кремния *Физика твердого тела*, том. 64(5), 522-527, 2022
4. Oliver W.C., Pharr G.M., An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments, *Journal of materials research*, том. 7(6), 1564-1583, 1992.

Copper oxide whiskers for photocatalysis and lithium batteries

Dorogov M.V.¹, Chirkunova N.V.^{1,2}, Nigmatdianov M.G.¹, Slobodskoy A.N.¹, Podlesnov E.¹

¹ITMO University

²Togliatti State University

e-mail: *mvdorogov@itmo.ru*

Nanostructured materials are actively used and applied in industry, for example, as high-performance photocatalysts, sensors, new generation anodes for lithium-ion batteries, etc. [1] We have shown that a composite based on copper oxide nanowhiskers can act as a sorption material for purifying liquids [2]. CuO nanowhiskers are narrow-gap semiconductors with a band gap of 1.2 eV, which allows them to be used in photocatalysis under visible light [3]. The developed surface and high mechanical properties, due to the one-dimensional structure, make it possible to exhibit not only high reactivity, but also withstand mechanical stresses, for example, during the cycling of anodes of lithium-ion batteries [4]. At the same time, the specific capacity of copper oxide is 674 mA·h/g [5], which is much higher than the classical graphite anodes in lithium-ion batteries (372 mA·h/g) [6]. These factors make copper oxide whiskers a promising material for lithium-ion batteries.

In this work, we studied the effect of additions of copper oxide nanowhiskers not only to anode materials, but also to the electrolyte. The effect of nanowhisiker additives on ionic conductivity was studied by electrochemical impedance spectroscopy. The influence of the morphology of additives is shown - a comparative analysis of the influence of spherical nanoparticles and one-dimensional nanowhiskers of copper oxide is carried out.

The work was carried out with the support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (agreement No 075-15-2021-1349).

References

1. S. Srinivasan, A.M. Kannan, N. Kothurkar, Y. Khalil, S. Kuravi, Nanomaterials for energy and environmental applications // Journal of Nanomaterials, 2015, vol. 2015, art. no. 979026.
2. A.Y. Kozlov, M.V. Dorogov, N.V. Chirkunova, I.M. Sosnin, A.A. Vikarchuk, A.E. Romanov, CuO Nanowhiskers-based photocatalysts for wastewater treatment // Nano Hybrids and Composites, 2017, vol. 13, pp. 183-189.
3. M. Dorogov, A. Kalmykov, L. Sorokin, A. Kozlov, A. Myasoedov, D. Kirilenko, N. Chirkunova, A. Priezheva, A. Romanov, E.C. Aifantis, CuO nanowhiskers: preparation, structure features, properties, and applications // Materials Science and Technology, 2018, vol. 34, pp. 2126–2135.
4. P. Hu, M. Dorogov, Y. Xin, K.E. Aifantis, Transforming single-crystal CuO/Cu₂O nanorods into nano-polycrystalline Cu/Cu₂O through lithiation // ChemElectroChem, 2019, vol. 6, pp. 3139–3144.
5. K. Chen, D. Xue, Cu-based materials as high-performance electrodes toward electrochemical energy storage // Functional Materials Letters, 2014, vol. 07, art. no. 1430001.
6. J. Asenbauer, T. Eisenmann, M. Kuenzel, A. Kazzazi, Z. Chen, D. Bresser, The success story of graphite as a lithium-ion anode material – fundamentals, remaining challenges, and recent developments including silicon (oxide) composites // Sustainable Energy Fuels, 2020, vol. 4, pp. 5387–5416.

Особенности роста гибридных III-V наноструктур на полупроводниковых подложках

Резник Р. Р.¹

¹СПбГУ

²СПбАУ им. Ж.И. Алфёрова РАН

e-mail: *moment92@mail.ru*

В наши дни со стороны исследователей наблюдается повышенный интерес к синтезу полупроводниковых III-V наноструктур и созданию приложений на их основе благодаря их уникальным транспортным, оптоэлектронным и другим свойствам [1]. Уменьшение размеров полупроводниковых соединений приводит не только к повышению производительности приложений за счёт увеличения количества элементов на чипе, но и к проявлению квантоворазмерных свойств материала, что, в свою очередь, открывает перспективы для создания приборов нового поколения [2]. Более того, современные методы создания полупроводниковых соединений позволяют формировать наноструктуры комбинированной размерности, такие как квантовые точки (КТ) в теле нитевидных нанокристаллов (ННК) [3]. В отличие от самоорганизованных на поверхности подложки, положение и размеры таких КТ определяются положением ННК, диаметром ННК и временем роста КТ. В свою очередь, благодаря геометрии ННК становится возможным синтез таких структур на поверхностях различных материалов, в том числе, интеграция с кремниевой платформой [4]. В предыдущих работах нами было продемонстрировано, что КТ в ННК могут являться эффективными и направленными источниками одиночных фотонов [5,6]. Таким образом, наноструктуры типа ННК с КТ являются перспективными компонентами для создания приложений в области квантовой информатики и телекоммуникаций. Тем не менее, для расширения числа и эффективности приложений на основе ННК с КТ необходимо проведение исследований по контролируемому синтезу таких наноструктур.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований зависимости физических свойств выращенных методом молекулярно-пусковой эпитаксии ННК с КТ в системах материалов (In,Ga)As/(Al)GaAs, InP/InAsP от условий роста, таких как температура подложки, величины и соотношения потоков материалов из источников и других. Было продемонстрировано, что варьирование условий роста позволяет управлять длиной волны излучения из КТ в широком диапазоне длин волн от 750 до 1500 нм и направленностью излучения из КТ.

Список литературы

1. V. L. Mironov, O. L. Ermolaeva, E. V. Skorohodov et al. // Phys. Rev. B 85, 144418 (2012).
2. V. G. Dubrovskii, G. E. Cirlin, V. M. Ustinov // Semiconductors 43, 1539 (2009).
3. G. E. Cirlin, R. R. Reznik, I. V. Shtrom I.V. et al. // Journal of Physics D: Applied Physics 50, 484003 (2017).
4. G. E. Cirlin, V. G. Dubrovskii, Yu. B. Samsonenko et al. // Phys. Rev. B 82, 035302 (2010).
5. L. Leandro, C. P. Gunnarsson, R. Reznik et al. // Nano. Lett. 11, 7217 (2018).
6. R. R. Reznik, G. E. Cirlin, K. P. Kotlyar et al. // Nanomaterials 11, 2894 (2021).

Синтез пентагонально структурированных пленок палладия и их применение в мембранных приложениях

Пушанкина П. Д.¹, Андреев Г.А.¹, Муханов М.А.¹, Барышев М.Г.^{1,2,3}, Петриев И.С.^{1,2}

¹Кубанский государственный университет

²Южный научный центр РАН

³Кубанский государственный технологический университет

e-mail: *polina_pushankina@mail.ru*

Палладийсодержащие мембраны привлекают большое внимание как научных кругов, так и промышленности, поскольку обладают высокой селективностью по водороду, высокой термической стабильностью и механической стойкостью. [1] Однако, при достаточно низких температурах ($< 100^{\circ}\text{C}$) равновесие между молекулярным водородом в газовой фазе и атомарным абсорбированным в фазе палладия устанавливается очень медленно и трудно, что может быть вызвано инактивной или загрязненной поверхностью мембран. Преодолеть такое условие позволяет модификация поверхности металлических пленок наноструктурированным слоем на основе порошкообразных хемосорбирующих водород веществ [2]. Подобное покрытие позволяет интенсифицировать процесс переноса водорода через цельнометаллическую палладийсодержащую мембрану путем ускорения поверхностных лимитирующих стадий [3]. Это становится возможным благодаря увеличению площади активной поверхности, а следовательно количества центров хемосорбции.

В ходе исследовательской работы на поверхности палладийсодержащих пленок были синтезированы два типа покрытия с частицами сферической формы по методу классической палладиевой черни и пентагонально структурированными звездообразными частицами по новому авторскому методу. Оба покрытия были получены методом электрохимического осаждения, однако, необходимыми условиями получения пентагонально структурированного покрытия являлось добавление ПАВа в рабочий раствор, концентрация галогенид-ионов и пониженная, по сравнению с классическим методом, плотность тока.

Модифицированные с обеих сторон палладийсодержащие пленки были исследованы в процессах низкотемпературного ($< 100^{\circ}\text{C}$) транспорта водорода. Мембраны с пентагонально структурированным функциональным слоем продемонстрировали увеличение плотности потока до двух раз (до $0,35 \text{ ммоль/с м}^2$), по сравнению с мембранами, модифицированными палладиевой чернью. Номинально это достаточно небольшие значения, но в условиях пониженной температуры они являются весьма существенными, поскольку в данном температурном диапазоне практически отсутствует стабильная проницаемость. Такой результат, достигнутый мембранами с принципиально новой структурной организацией, может объясняться повышением адсорбционной активности поверхности, что в свою очередь сказывается на каталитической активности материала по отношению к реакциям с участием водорода [4]. Предположительно, это же является причиной снижения энергетического барьера процесса диссоциации и рекомбинации молекул водорода на поверхности мембраны, что приводит к увеличению скорости проникновения водорода через палладийсодержащую мембрану.

Разрабатываемая в ходе работы палладийсодержащая мембрана, предположительно позволяющая снизить энергетические затраты в процессе получения высокочистого водорода и способная работать при температурах окружающей среды, может стать основой не только для

создания низкотемпературных диффузионных фильтров очистки водорода, но и для других низкотемпературных применений таких как: создание водородного электрода кислородно-водородного топливного элемента, применение в электродных процессах электролитического разделения изотопов водорода и др.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда и Кубанского научного фонда № № 22-19-20068.

Список литературы

1. Филиппов С.П., Ярославцев А.Б., Водородная энергетика: перспективы развития и материалы, Успехи химии, том 90, 627-643, 2021.
2. W. Vielstich, Brennstoffelemente. Moderne Verfahren zur elektrochemischen Energiegewinnung. Weinheim: Verlag Chemie (1965).
3. Petriev I., Pushankina P., Bolotin S. et. al., The influence of modifying nanoflower and nanostar type Pd coatings on low temperature hydrogen permeability through Pd-containing membranes, Journal of Membrane Science, volume 620, № 118894, 2021.
4. Lytkina A., Orekhova N., Ermilova M. et. al., Ru-Rh based catalysts for hydrogen production via methanol steam reforming in conventional and membrane reactors, International Journal of Hydrogen Energy, volume 44, 13310-13322, 2019.

Исследование трибоэлектрического потенциала в тонких диэлектрических и полупроводниковых слоях

Дунаевский М. С.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *Mike.Dunaeffsky@mail.ioffe.ru*

Явление трибоэлектрической зарядки возникает при контакте подвижного электрода (полупроводникового или диэлектрического) с поверхностью другого полупроводникового или диэлектрического электрода. При этом на электродах накапливаются заряды противоположного знака. Это позволяет генерировать ток в движущихся электродах. Этот вид генерации тока используется в миниатюрных устройствах - трибоэлектрических наногенераторах [1,2]. Экспериментальное изучение трибоэлектрической генерации в полупроводниках началось лишь в последние годы. Особенности механизма трибоэлектрической генерации в полупроводниках до конца не ясны. Основная проблема, препятствующая развитию общепризнанной теории, связана со сложностью явлений, происходящих при трении двух электродов.

Важной экспериментальной задачей является получение так называемого «трибоэлектрического ряда», т. е. изучение способности различных материалов накапливать трибоэлектрический заряд. В трибоэлектрическом ряду материалы ранжируются по способности приобретать положительный (или отрицательный) трибоэлектрический заряд. Оптимальные материалы для трибоэлектрического наногенератора должны находиться далеко друг от друга в трибоэлектрическом ряду [3]. Этот оптимальный выбор материалов позволит максимизировать токи в таком трибоэлектрическом наногенераторе.

В данной работе исследование трибоэлектрических эффектов в тонких слоях проводилось с помощью сканирующего зондового микроскопа (СЗМ). Метод измерения поверхностной плотности трибоэлектрического заряда состоит из следующих этапов: (i) - СЗМ-зонд приводится в механический контакт с поверхностью исследуемой пленки с заданной силой давления F (в диапазоне от 10 наноНьютона до нескольких микроНьютона); (ii) - Сканирование в контактном режиме небольшой площади ($1 \times 1 - 2 \times 2$ мкм²); (iii) - Измерение (в режиме Кельвин-зонд микроскопии) потенциала трибоэлектрических зарядов в области контакта; (iv) - Расчет поверхностной плотности трибоэлектрического заряда (исходя из значения трибоэлектрического потенциала).

Основными измеряемыми трибоэлектрическими характеристиками исследованных тонких плёнок являлись величина трибоэлектрического потенциала и плотность трибоэлектрического заряда. Выполненные измерения указывают на то, что величина трибоэлектрического потенциала тонких плёнок зависит от разности уровней Ферми (и разности работ выхода) СЗМ-зонда и исследуемого слоя.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20084 (<https://rscf.ru/project/22-22-20084>), гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением от 14 апреля 2022 г. № 24/2022

Список литературы

1. C. Wu et al., Triboelectric nanogenerator: a foundation of the energy for the new era, *Advanced Energy Materials*, 9 (1), 1802906 (2019). DOI: 10.1002/aenm.201802906

2. V.A. Sharov et al., InP/Si Heterostructure for High-Current Hybrid Triboelectric/Photovoltaic Generation, ACS Applied Energy Materials, 2 (6), 4395 (2019). DOI: 10.1021/acsaem.9b00576
3. Y. Liu, et al., Recent Progress in 2D-Nanomaterial-Based Triboelectric Nanogenerators, Adv. Funct. Mater., 31, 2009994 (2021). DOI: 10.1002/adfm.202009994

Формирование симметричных нанougлублений методом локального капельного травления для позиционирования квантовых точек с низкой поверхностной плотностью

Лахина Е. А.¹, Черненко Н.Е.¹, Кириченко Д.В.¹, Шандыба Н.А.¹, Балакирев С.В.¹, Солодовник М.С.¹

¹Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета

e-mail: *lakhina@sfnedu.ru*

Квантовые точки (КТ) InAs, получаемые методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs, имеют широкие перспективы применения в устройствах квантовой фотоники в связи с их уникальными оптическими свойствами. Однако для полноценной реализации таких устройств КТ должны быть одиночными, т. е. обладать низкой поверхностной плотностью, а также обладать высокой симметрией, что возможно достичь с помощью предварительного формирования нанougлублений методом локального капельного травления.

Целью данной работы является исследование технологических режимов капельного травления Ga/GaAs(001), позволяющих получить симметричные нанougлубления с высоким аспектным соотношением и плотностью порядка $1 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$, что, как показал анализ литературных данных, ранее не было достигнуто другими научными коллективами. Для достижения поставленной цели необходимо учитывать ряд параметров, влияющих на механизмы формирования капель и последующего травления поверхности: толщина осаждения материала, температура подложки, температура и время отжига образца, давление паров мышьяка и др.

В результате проведенных экспериментальных исследований обнаружено, что при уменьшении толщины осаждения Ga с 5 до 2 монослоев (МС) поверхностная плотность углублений уменьшается с $2 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$ до $6 \times 10^7 \text{ см}^{-2}$, что связано с уменьшением общего количества осажденного материала и снижением вероятности зарождения новых островков.

Увеличение времени отжига образца с 15 до 30 минут приводит к снижению анизотропии формы углублений, что предположительно позволит обеспечить формирование в них более симметричных КТ.

Увеличение температуры отжига с 730°C до 750°C приводит к снижению глубины углублений с 3.5 до 2.1 нм и увеличению их среднего диаметра с 80 до 140 нм (по данным атомно-силовой микроскопии). Несмотря на удаление характерного ободка, образующегося в результате кристаллизации капли в потоке мышьяка на границе тройной точки, снижение глубины и увеличение диаметра углублений снижают привлекательность использования сформированных при $T = 750^\circ\text{C}$ углублений из-за снижения вероятности зарождения в них островков либо потенциальной инициации полицентрического зарождения, наблюдаемого в углублениях с большим диаметром.

При снижении температуры осаждения капель с 650°C до 600°C и снижении температуры отжига до 700°C на поверхности формировались углубления с достаточно широкими ободками шириной 47.4 нм и высотой 1.9 нм, однако сами углубления обладают наиболее высокой степенью симметрии - пирамидальной формой с гранями ориентации (111). При этом углубления на данном образце имеют наиболее высокое аспектное соотношение, что положительно сказывается на последующей локализации в них наноструктур.

Таким образом, в результате анализа проведенных исследований можно сделать вывод, что оптимальными режимами формирования наноглублений для последующей локализации в них симметричных КТ является толщина осаждения Ga 5 МС, температура осаждения 600°С, температура отжига 700°С и время отжига 15 минут.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10251, <https://rscf.ru/project/22-79-10251/> в Южном федеральном университете.

Фазовый переход окислов ряда магнели: VO, V₂O₃, VO₂, V₂O₅

Шадрин Е. Б.¹, Ильинский А.В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *shadr.solid@mail.ioffe.ru*

В ряду всевозможных окислов металлов окислы ванадия занимают особое место [1]. Необычность заключается в том, что они образуют ряд Магнели: VO_x, где x меняется от 0.2 (V₅O) до 2.5 (V₂O₅). Этот ряд характеризуется большим количеством разнообразных окислов [2]. Физические и химические свойства окислов ряда Магнели меняются с температурой, причем почти все окислы обладают температурным фазовым переходом (ФП), который имеет сложную комплексную природу [3]. В настоящем докладе мы сосредоточим внимание на четырех окислах ванадия (VO – монооксид ванадия, V₂O₃ – полутораоксид ванадия, VO₂ – диоксид ванадия и V₂O₅ – пятиокись ванадия).

В работе выявлена связь гибридизации атомных орбиталей ионов ванадия и кислорода со строением кристаллической решетки VO_x, что позволило установить наличие орбиталей, содержащих электроны, которые не участвуют в построении кристаллического каркаса, но отвечают как за проводимость металлической фазы, так и за образование димеров полупроводниковой фазы, возникающих после совершения структурного ФП.

Окислы ванадия наследуют корреляционные свойства окисляемого химического элемента - ванадия, а именно то, что энергетическое положение электронных зон кристаллов радикальным образом зависит от степени заполнения этих зон электронами. Данная зависимость выражается не только в наличии сверхбыстрого безгистерезисного перехода Мотта, который является чисто электронным ФП, но и в том, что данный переход инициирует совершение более инерционного перехода Пайерлса, который является структурным ФП и обладает термическим гистерезисом.

По мере увеличения степени окисления ванадия в соединениях VO_x (роста показателя x от 1 до 2.5) происходит ослабление металлических свойств окислов, сопровождаемое увеличением ширины запрещенной зоны и ростом температуры ФП полупроводник-металл.

В VO и V₂O₃ при переходе в полупроводниковую фазу имеет место образование π-димеров, прочность которых приблизительно на порядок ниже прочности σ-димеров в VO₂, возникающих здесь при переходе в полупроводниковую фазу. Поэтому температуры ФП в VO и V₂O₃ (120 К и 140 К) ниже, чем в VO₂ (340 К).

Список литературы

1. P.K. Sekhar, D.d Graf, O. Ojelere, T.K. Saha, M. A. Riheen, S. Mathur. Journal of The Electrochemical Society, **167**, 027548-1 (2020)
2. Л.А. Носикова, А.Е. Баранчиков, А.Д. Япрынцев, О.С. Иванова, М.А. Теплоногова, В.К. Иванов.. Журнал неорганической химии, **65**, 4, 467 (2020)
3. А.В. Ильинский, Е.Б. Шадрин, ФТТ, **62**, 8, 1284 (2020). DOI: <https://doi.org/10.21883 /FTT.2020.08.49616.081>

Мультичастотный источник изучения на азотно-никелевых центрах окраски в алмазной матрице с различной конфигурацией атомов азота

Калия И. Е.¹, Богданов К.В.¹, Осипов В.Ю.², Шахов Ф.М.², Баранов А.В.¹

¹Университет ИТМО, ²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *kaliyailya2802@gmail.com*

Люминесцирующие точечные дефекты в алмазной матрице – перспективная технология, обладающая рядом свойств, применяемых в таких областях науки, как квантовая информатика, биомедицина и магнитометрия. Уникальные свойства алмаза: твердость, химическая устойчивость и биосовместимость – также помогают данным инновационным материалам занять свое место в различных областях современных технологий. В двадцатом веке исследования были сфокусированы на алмазных матрицах с центрами окраски, состоящими из атома азота, замещающего один из атомов углерода в алмазной решетке, и соседней с ним вакансии. Ряд недостатков данного типа центров, таких как низкая интенсивность бесфононной линии люминесценции и широкая полоса фононных повторений, затрудняют его будущую технологическую утилизацию. В поисках новых решений, удовлетворяющих запросам современных технологий, были открыты и описаны десятки центров окраски в алмазах. Так, существует и исследуется ряд центров на основе металлов четвертой группы: SiV, GeV, PbV и SnV, возобновлена работа над люминесцирующими комплексами вольфрама в алмазных матрицах [1]. Сильное внимание уделено центрам окраски, состоящим из атома никеля и соседствующих с ним атомов азота, так называемым, NE_x центрам. Именно о таком типе центров идет речь в данной работе.

Алмазные частицы с рядом азотно-никелевых центров окраски были синтезированы методом высокого давления высокой температуры высокого давления из смеси графита, никеля и алюминия [2]. Спектры люминесценции полученного образца свидетельствуют о разнообразии NE центров в алмазных частицах – полосы люминесценции присутствуют во всем видимом и ближнем инфракрасном диапазонах. Также примечательно то, что некоторые группы центров обладают разной энергией возбуждения, что позволяет получать различный люминесцентный отклик от одной и той же частицы. Таким образом, в данной работе представлен мультичастотный источник излучения на основе азотно-никелевых центров окраски в алмазных матрицах.

Для определения конфигурации и строения исследуемых центров были проведены измерения люминесцентного отклика в широком диапазоне температур при различной энергии возбуждения. После деконволюции спектров флуоресценции были построены температурные зависимости интенсивности, положения и полуширины бесфононных линий люминесценции, характер которых помогает определить конфигурацию люминесцентных комплексов.

В рамках работы создан мультичастотный источник излучения на основе алмазных матриц с рядом центров окраски на основе азотно-никелевых комплексов. Проведены исследования оптического отклика источника излучения в диапазоне температур от 77 до 300К, включающие деконволюцию спектров люминесценции.

Эта работа была поддержана Российским научным фондом (соглашение 21-12-00264).

Список литературы

1. Bogdanov K. V. и др. Multi-Frequency Light Sources Based on CVD Diamond Matrices with a Mix of SiV– and GeV– Color Centers and Tungsten Complexes // *Materials*. 2022. Т. 15. № 23. С. 8510.
2. Shakhov F. M. и др. Diamond powders synthesized at high pressure and high temperature from graphite with nickel in the presence of aluminum. Applicability of methods for analyzing nitrogen concentration in diamonds // *Journal of Solid State Chemistry*. 2022. Т. 307. С. 122804.

Исследование режимов формирования структур для создания метаповерхностей и конфокальных оптических систем на их основе

Гусев Е. Ю.¹, Авдеев С.П.¹, Поляков В.В.¹, Агеев О.А.^{1,2}

¹ЮФУ, ²НОЦ "Нанотехнологии" ЮФУ

e-mail: eyugusev@sfedu.ru

Использование метаматериалов является одним из перспективных способов решения проблем управления светом, присущих рефракционным и дифракционным элементам оптических приборов [1,2]. Метаповерхности, которые являются двумерными метаматериалами, лишены недостатков, присущих объемным материалам. Рационально конструируя элементы метаповерхности (метаатомы) и ячейки с ними, можно контролировать амплитуду, фазу и поляризацию отраженного, прошедшего или дифрагированного излучения. Это позволяет эффективно управлять излучением, например, собирая плоскую волну в точку на фокусном расстоянии, что дает возможность изготавливать металлинзы с толщиной меньше длины волны излучения [1].

Однако главной проблемой остается отсутствие серийных технологий, позволяющих воспроизводимо создавать метаповерхности необходимого функционального назначения, параметров и размера, что ограничивает возможности их использования для решения практических задач. В качестве наиболее подходящего материала для формирования подобных метаповерхностей являются структуры «кремний на изоляторе» (подложки КНИ), а также близкие к ним структуры, в которых приборный слой кремния замещен слоем поликристаллического кремния [1-4].

Цель настоящей работы заключается в исследовании режимов формирования структуры «поликристаллический кремния на изоляторе» и исследовании ее физико-механических и оптических свойств для разработки технологии изготовления метаповерхностей для создания конфокальных металлинз.

В работе проведены исследования по получению структур для изготовления метаповерхностей, состоящих из слоев диоксида кремния (толщиной до 2 мкм) и поликристаллического(аморфного) кремния (толщиной 1,2 и 6,8 мкм). Слои осаждали на подложку кремния (100) методами плазмостимулированного осаждения из газовой фазы (PECVD, PlasmaLab 100) [5]. За счет изменения режимов осаждения и последующей быстрой термической обработки (STE RTA79 и ИТО18МВ) выполнена модификация физикомеханических и оптических параметров материалов слоев, определяющих возможность корректировки параметров элементов метаповерхностей.

Свойства слоев исследовали методами атомно-силовой микроскопии (СЗМ Solver P47 Pro), стилусной профилометрии (AlphaStep D-100), эллипсометрии (ЛЭФ-3М).

В результате изготовлены структуры $\text{Si}^*/\text{SiO}_x/\text{Si}(100)$ с контролируемой шероховатостью и внутренними напряжениями. При этом показатель преломления поликристаллического кремния составил 2,8-4,0. Установлено, что последующая высокотемпературная обработка позволяет корректировать значения параметров материала на 7-18%.

Результаты исследования будут использованы при разработке технологических процессов изготовления металинз для конфокальных оптических систем.

Исследование выполнено с использованием оборудования Научно-образовательного центра «Нанотехнологии» Южного федерального университета.

Список литературы

1. Ремнев М. А., Климов В. В., Метаповерхности: новый взгляд на уравнения Максвелла и новые методы управления светом, УФН, 188, 169-205, 2018
2. Shaltout A. M., Kildishev A. V., Shalaev V. M., Evolution of photonic metasurfaces: from static to dynamic, J. Opt. Soc. Am, B 33. 501-510, 2016
3. Jinyi Yang, Sudip Gurung, Subhajit Bej, Peinan Ni, Ho Wai Howard Lee, Active optical metasurfaces: comprehensive review on physics, mechanisms, and prospective applications, Rep. Prog. Phys., 85. 036101, 2022
4. Сойфер В. А., Дифракционная нанофотоника, Москва, Физматлит, 680, 2011
5. Gusev E. Y., Jityaeva J. Y., Ageev O. A., Effect of PECVD conditions on mechanical stress of silicon films, Materials Physics and Mechanics, 37, №1, 67-72, 2018

Влияние кислорода на процесс формирования наноструктурированных пленок оксида индия-олова

Аксенова В. В.¹, Смирнова И.П.¹, Марков Л.К.¹, Павлюченко А.С.¹, Яговкина М.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *valeriya11-12@mail.ru*

В большинстве современных опто- и фотоэлектронных приборов в качестве прозрачных проводящих контактов и токопроводящих покрытий используются пленки оксида индия-олова (ИТО). Структура таких пленок может меняться в зависимости от назначения и условий использования. Как правило, применяются плотные пленки, получаемые методами вакуумного нанесения, с показателем преломления 1.9-2.1 в видимом диапазоне длин волн. Тем не менее, в ряде случаев для снижения коэффициента отражения пленок могут применяться наноструктурированные пленки ИТО, обладающие более низким эффективным показателем преломления [1]. В таких пленках показатель преломления может градиентно изменяться вдоль направления нанесения пленки, что позволяет создавать просветляющие покрытия на их основе. Кроме того, такие пленки обладают высокой удельной поверхностью, что позволяет применять их в качестве каталитических покрытий в электро- и фотохимических процессах, а также в качестве чувствительных и быстродействующих сенсоров различных газообразных и жидких веществ. Одним из наиболее распространенных методов нанесения таких пленок является метод магнетронного распыления.

Ранее было показано [2], что на процесс формирования того или иного вида поверхности пленки ИТО при магнетронном распылении влияет состав рабочей атмосферы и температура осаждения. При температуре подложки выше 150 °С в бескислородной атмосфере может начаться рост нанонитей по механизму ПЖК. При распылении мишени ИТО происходит разложение оксида, в результате чего на подложке осаждаются капли металла, если температура плавления металла ниже температуры подложки [3]. По мере насыщения капель расплавленного металла кислородом из окружающей среды на границе между твердой фазой и каплями формируются слои оксида индия-олова, температура плавления которого выше температуры подложки. Так происходит непрерывное образование нитевидных нанокристаллов, диаметр которых определяется размером капель металла. Соответственно, количество нитевидных кристаллов на единицу поверхности пленки, а следовательно, удельная поверхность пленки, будет зависеть от вероятности формирования капель расплавленного металла.

В работе исследовалось влияние наличия кислорода в атмосфере рабочей камеры на процесс формирования пленок оксида индия-олова при высоких температурах. Пленки ИТО наносились на специализированной установке комбинированного электронно-лучевого и магнетронного напыления, производства фирмы Torr Int., США. Было показано, что в случае добавления кислорода в рабочую атмосферу механизм роста пленок оксида индия-олова меняется, в результате пленки, выращенные в бескислородной атмосфере, представляют собой массив нитевидных нанокристаллов, а пленки, выращенные в кислородосодержащей среде, имеют слабо структурированную гладкую поверхность. Изменение механизма роста пленок объясняется особенностями фазовой диаграммы индий-кислород в области малых концентраций кислорода. В работе также сравниваются оптические характеристики исследуемых видов пленок, а также приводятся результаты их рентгеноструктурного анализа.

Список литературы

1. Markina D. I. et al., Perovskite Nanowire Lasers on Low-Refractive-Index Conductive Substrate for High-Q and Low-Threshold Operation, 9, 3977, 2020.
2. Yamamoto, N., & Morisawa, K.. Indium Tin Oxide Conductive Nanowires Formed by Magnetron Sputtering. MRS Proceedings, 1747, 2015.
3. Chuang, R. W., & Lee, C. C. . High-temperature non-eutectic indium-tin joints fabricated by a fluxless process. Thin Solid Films, 414(2), 175-179, 2002.

Влияние оптического излучения различной длины волны на транспортные характеристики тонких SiN/Si мембран с интегрированными единичными нанопорами

Афоничева П. К.¹, Н.В. Ваулин^{1,2}, Лебедев Д.В.^{1,2,3}, Букатин А.С.^{1,2}, Мухин И.С.², Евстапов А.А.¹
¹ИАП РАН, ²СПбАУ, ³СПбГУ

e-mail: polina.afonicheva@gmail.com

Твердотельные нанопоры представляют большой интерес для безметочного обнаружения биомолекул и проведения одномолекулярных исследований [1]. Проходя через небольшое отверстие в тонкой мембране, молекулы блокируют нанопору, вызывая тем самым изменение ионного тока. Таким образом при изменении этого сигнала молекулы могут быть электрически задетектированы. Твердотельные нанопоры могут быть использованы для распознавания размеров молекул [2], исследования биомолекулярных взаимодействий на уровне одной молекулы [3], создании биодатчиков и приборов для секвенирования ДНК/РНК на основе нанопор [4]. Перспективным является комбинация таких нанопоровых сенсоров с оптическими методами детектирования [5], так как воздействие на нанопору светом может приводить к модуляции поверхностной плотности заряда нанопоры, тем самым обеспечивая оптический контроль электроосмотического потока через пору. Совмещение оптического и электрического подходов также позволяет создавать локальный нагрев, индуцируемый светом, изменяя значения проводимости, повышая тем самым сигнал и точность детектирования [6].

В данной работе было исследовано влияние оптического излучения различной длины волны на транспортные характеристики тонких SiN/Si мембран с интегрированными единичными нанопорами.

Для получения образцов была использована методика создания нанопор в свободноподвешенной полупроводниковой мембране. На первом этапе необходимо сформировать полупроводниковую мембрану в кремниевой подложке. Для этого слой SiN_x наносится на двухстороннюю полированную пластину Si (100) методом химического осаждения из паровой фазы под низким давлением (LPCVD). Затем, с помощью фотолитографии в слое SiN_x формируются окна для дальнейшего анизотропного травления Si-подложки, таким образом получается свободно подвешенная мембрана SiN_x, толщиной 40 нм. Затем, сфокусированным электронным пучком просвечивающего электронного микроскопа формируются единичные нанопоры диаметром ~5 нм.

С помощью специально изготовленной измерительной ячейки с оптическим доступом было исследовано влияние оптического излучения разной длины волны на транспортные свойства нанопор. Ячейка состоит из двух объемов, разделенный непроницаемой мембраной SiN_x с единичной нанопорой. Резервуары ячейки заполняли раствором KCl с концентрацией 1М, смешанным с изопропанолом (IPA) 1:1, а ионную проводимость нанопоры изучали путем измерения вольтамперных характеристик. В процессе измерения ячейка облучалась в широком спектральном диапазоне (галогеновой лампой) и с использованием оптических фильтров, которые пропускают в УФ и ИК диапазоне и в видимой части спектра.

Наблюдалось, что облучение в широком спектральной диапазоне повышает значения тока на 24%, тем самым увеличивая проводимость поры. Это можно объяснить повышением локальной температуры вблизи нанопоры, что обеспечивает увеличение переноса ионов. Для того, чтобы

понять, какой именно участок спектра галогеновой лампы влияет на проводимость были использованы оптические фильтры. С использованием фильтров, пропускающих в УФ (240-400 нм) и ИК (800-2900 нм) диапазоне не было зарегистрировано изменения ионного тока, но ожидалось, что излучение на этих длинах волн будет иметь наибольший вклад в изменение проводимости за счет нагрева. В видимой части спектра (350-750 нм) наблюдалось увеличение тока на 11%, тем самым можно сделать вывод, что фотоиндуцированное изменение поверхностных состояний поры оказывает большее воздействие на транспорт, чем просто нагрев. Полученные результаты могут найти широкое применение в области создания биосенсоров нового поколения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 075-15-2021-1057).

Список литературы

1. Wanunu M. Nanopores: A journey towards DNA sequencing //Physics of life reviews. 2012. V. 9. №. 2. P. 125-158.
2. Soni G. V., Dekker C. Detection of nucleosomal substructures using solid-state nanopores //Nano letters. 2012. V. 12. №. 6. P. 3180-3186.
3. Wei R. et al. Stochastic sensing of proteins with receptor-modified solid-state nanopores //Nature nanotechnology. 2012. V. 7. №. 4. P. 257-263.
4. Xue L. et al. Solid-state nanopore sensors //Nature Reviews Materials. 2020. V. 5. №. 12. P. 931-951.
5. Gilboa T., Meller A. Optical sensing and analyte manipulation in solid-state nanopores //Analyst. 2015. V. 140. №. 14. P. 4733-4747.
6. Nicoli F. et al. DNA translocations through solid-state plasmonic nanopores //Nano letters. 2014. V. 14. №. 12. P. 6917-6925.

Исследование рельефа напряжений и распределения деформаций в пленках графена биосенсоров вирусных инфекций

Елисеев И. А.¹, Усиков А. С.^{2,3,4}, Лебедев С. П.¹, Роенков А. Д.², Петров В. Н.¹, Пузык М. В.⁵, Лебедев А. А.¹,
Гущина Е. В.¹, Танклевская Е. М.¹, Шабунина Е. И.¹, Смирнов А. Н.¹, Шмидт Н. М.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²ГК “Нитридные кристаллы”, Санкт-Петербург, Россия

³Университет ИТМО

⁴Nitride Crystals Inc., USA

⁵РГПУ им. А. И. Герцена

e-mail: ilya.eliseyev@mail.ioffe.ru

Биосенсоры на основе графена способны диагностировать предельно низкие концентрации биомолекул, связанных с различными социально значимыми заболеваниями на их ранней стадии, в том числе онкологии, гриппа и COVID-19 [1,2]. Предельная чувствительность такого биосенсора определяется свойствами графена и физико-химическими процессами, протекающими на поверхности графена на всех этапах производства биосенсора. Для однородности протекания этих процессов по всей площади графенового чипа важнейшую роль играет также степень однородности параметров графеновой пленки [3].

Практическое применение биосенсоров вирусных инфекций на основе графена во многом сдерживается невоспроизводимостью их параметров, в том числе адсорбционных свойств графена в биосенсорах [3,4]. В настоящий момент определены некоторые источники невоспроизводимости параметров графена, выявляющиеся на начальной стадии получения биосенсоров – этапе нанесения электрических контактов с помощью фотолитографии (ФЛГ). Результаты исследований других научных групп [4,5] показали, что в процессе ФЛГ происходит взаимодействие фоторезиста с графеном, с образованием локальных областей с остатками резиста (ЛОР). В результате шероховатость поверхности графена возрастает. Усугубляет проблему то, что традиционный метод контроля удаления фоторезиста в оптическом микроскопе не позволяет обнаружить ЛОР. Наиболее полную информацию о присутствии ЛОР дает атомно-силовая микроскопия (АСМ) и спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) [2, 6]. Ранее проведенные нами исследования показали, что присутствие ЛОР на графене биосенсора приводит к ухудшению воспроизводимости значений сопротивления чипов биосенсоров, полученных из одной пластины, и эффективности обнаружения вирусов, вплоть до отсутствия зависимости сигнала биосенсора от концентрации вирусов [6].

В данной работе исследованы чипы биосенсоров с поверхностью, практически свободной от ЛОР, что подтверждено данными АСМ и КРС. Конструкция и основные этапы создания биосенсоров описаны в [2,6]. Пленки графена сформированы методом сублимации на подложках 4H-SiC [2]. Экспериментально обнаружен новый источник невоспроизводимости параметров биосенсоров, вызванный формированием рельефа напряжений на поверхности графена. Образование рельефа выявляется в профилях шероховатости поверхности графена. Период чередования горбов рельефа составляет 2-10 мкм, а глубина - 1-2 нм. Параметр среднеквадратичного отклонения (RMS), характеризующий шероховатость поверхности, при этом составляет 0.4 нм.

С использованием анализа линий 2D и G в спектре КРС графена проанализирована корреляция между рельефом поверхности и деформацией кристаллической решетки графена. Для

большинства изученных нами образцов графена, выращенного на SiC, характерно наличие деформации сжатия ε величиной порядка 0.3 %, разброс которой составляет в среднем $\pm 0.05\%$. Однако, в образцах с рельефом напряжений присутствуют области с деформацией растяжения, соответствующие впадинам рельефа. Величина ε в областях впадин составляет до 0.4 %. Распределение величины деформации в данных областях существенно неоднородно – диапазон значений ε составляет от 0 до 0.4 %. при этом в областях горбов рельефа сохраняется характерная для графена на SiC деформация сжатия с величиной $\sim 0.3\%$.

Контроль топографии поверхности графена методом АСМ совместно с анализом структурных характеристик, в частности деформации графена, методом спектроскопии КРС позволяет отбраковать пластины с рельефом напряжений и значительно повысить воспроизводимость параметров биосенсоров, полученных из разных пластин. В настоящий момент проводится сравнительное исследование характеристик биосенсоров с рельефом напряжений и без него.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00134.

Список литературы

1. Torrente-Rodriguez, R.M.; Lukas, H.; Tu, J. *et al.* SARS-CoV-2 RapidPlex: A Graphene-Based Multiplexed Telemedicine Platform for Rapid and Low-Cost COVID-19 Diagnosis and Monitoring, *Matter*, vol. 3(6) 1981, 2020.
2. Schmidt, N.M.; Usikov, A.S.; Shabunina, E.I. *et al.* Investigation of the Morphology and Electrical Properties of Graphene Used in the Development of Biosensors for Detection of Influenza Viruses, *Biosensors*, vol. 12(1), 8, 2021.
3. Mackenzie, D.M.A.; Buron, J.D.; Whelan, P.R. *et al.* Quality assessment of graphene: Continuity, uniformity, and accuracy of mobility measurements, *Nano Res.*, vol. 10, 3596, 2017.
4. Shteplyuk, I.; Giannazzo, F.; Yakimova, R. Epitaxial Graphene on 4H-SiC (0001) as a Versatile Platform for Materials Growth: Mini-Review, *Appl. Sci.*, vol. 11, 5784, 2021.
5. Choi A.; Hoang, A.T.; Ngoc Van T.T., *et al.* Residue-free photolithographic patterning of graphene, *Chem. Eng. J.*, vol. 429, 132504, 2022.
6. Елисеев, И.А.; Гущина, Е.В.; Клотченко, С.А. *и др.* Изменение адсорбционных свойств графена в процессе получения биосенсоров вирусных инфекций, *Физика и техника полупроводников*, т. 56(12), 1137, 2022.

Investigating the features and degradation of rGO/PLA laser-induced composites for potential use in implantable electronic devices

Abyzova E. G¹, Dogadina E. M., Petrov I. S., Bolbasov E. N., Vorobyev A. O., Plotnikov E. V., Sheremet E. S., Rodriguez R. D.

¹National Research Tomsk Polytechnic University

e-mail: *abyzovaeg@gmail.com*

The demand for implants to support, monitor, and stimulate bodily tissues and organs has been steadily increasing. In cases where traditional diagnostic methods such as X-rays and MRI are insufficient, implantation becomes necessary. However, it is challenging to evaluate the condition of the implant and surrounding tissues to diagnose inflammation or implant failure. By embedding sensors on the implant's surface, remote monitoring becomes possible, thus streamlining doctors' work and providing patients with peace of mind [1]. The use of biodegradable materials in implants offers additional benefits as it eliminates the need for extraction and disposal. However, finding materials that meet both functional and safety requirements is a critical issue when developing such devices.

Nanomaterials have the potential to significantly enhance biocompatibility, foster tissue regeneration and promote drug delivery directly to the implant site. Carbon nanomaterials like graphene, graphene oxide (GO), reduced graphene oxide (rGO), and carbon nanotubes are leading biomedical materials with versatile applications in drug delivery systems, tissue scaffolds, cancer therapies, and cellular sensors [2]. Graphene oxide is a highly promising material due to its low cost, ease of preparation, and ability to create flexible structures that are stable in aqueous media. GO also offers a high density of functional groups that allow for precise control over surface properties and immobilization of enzymes. Reduction can transform GO into an electrically conductive graphene-like material, rGO.

To monitor implant conditions, rGO can be combined with a biodegradable polymer to create an electronic component for wireless monitoring using laser reduction of graphene oxide. This technology has the potential to improve patient care and reduce environmental impact. However, developing materials that meet functional and safety requirements is still a crucial challenge.

We chose the biodegradable polymer substrate polylactic acid (PLA) to achieve optimal integration with reduced graphene oxide. This involved applying a GO solution to 3D PLA polymer scaffolds, which were then reduced with a 405 nm laser [3]. The resulting rGO/PLA composite remained stable even after exposure to mechanical action, water, alkaline, and acidic environments.

Toxicity and biocompatibility of samples was tested by subjecting rGO/PLA samples sterilized and placed in buffer solution and culture medium for 0, 1, 7, 15, 30, 60, and 120 days at 37°C. The tests revealed that cell growth occurred on the surface of all samples, the cells remained viable, no toxic components were released from the films, and there was no bacterial growth. This work shows that these newly developed biodegradable electronic components could enable the monitoring of "smart" biodegradable implants within the human body.

The work was supported by Russian Science Foundation grant № 22-12-20027, <https://rscf.ru/project/22-12-20027/> and the funding from Tomsk region administration.

References

1. Artico, J., Zecchin, M., Zorzin Fantasia, A., Skerl, G., Ortis, B., Franco, S., Albani, S., Barbati, G., Cristallini, J., Cannata', A., & Sinagra, G.// *Journal of Cardiovascular Medicine*. 2019. 20(8). 542–550.
2. Rajakumar, G., Zhang, X.-H., Gomathi, T., Wang, S.-F., Ansari, M. A., Mydhili, G., Nirmala, G., Alzohairy, M. A., & Chung, I.-M.// *In Processes*. 2020. Vol. 8. Issue 3. 355.
3. Murastov, G., Bogatova, E., Brazovskiy, K., Amin, I., Lipovka, A., Dogadina, E., Cherepnyov, A., Ananyeva, A., Plotnikov, E., Ryabov, V., Rodriguez, R. D., & Sheremet, E. // *Biosensors & Bioelectronics*. 2020. 112426. 166

Синтез, атомная структура и проводящие характеристики композитного материала на основе оксида графена и полианилина, полученного бескислотным методом

Яловега Г. Э.¹, Мясоедова Т.Н., Недоедкова О.В., Раджатсинг Калусулингам

¹ЮФУ

e-mail: yalovega@sfedu.ru

Особую роль в процессе создания нанокompозитных электродных материалов для суперконденсаторов играет понимание природы корреляционных зависимостей в рамках фундаментального треугольника «состав-структура-свойство». Для синтеза новых материалов с электронной и ионной проводимостью требуется фундаментальное понимание принципов работы электродных материалов, обеспеченное как экспериментальными, так и теоретическими исследованиями. Следовательно, исследования закономерностей формирования проводящей структуры в композитах такого типа являются востребованными и актуальными.

Одними из перспективных и активно синтезируемых в последнее время материалов для суперконденсаторов являются композитные системы на основе полимеров и наноструктурированного углерода, обладающие высокой электронной проводимостью. Объединение в одном композите этих материалов, с одной стороны приводит к суммированию их преимуществ, с другой - взаимно компенсирует их недостатки, а в целом является важным подходом для создания перспективных электродных материалов с целью повышения производительности суперконденсаторов.

Графен и его оксид (ОГ) считаются одними из самых перспективных материалов для гибких тонкопленочных суперконденсаторов следующего поколения, благодаря своим уникальным особенностям структура-свойство. Проводящий полимер - полианилин (ПАНИ) обладает уникальным комплексом свойств: высокой электронной и ионной проводимостью, окислительно-восстановительной активностью, стабильностью на воздухе и термостабильностью.

В данной работе был проведен синтез и исследованы морфология, атомная и электронная структура порошковых и пленочных образцов композитов ОГ-ПАНИ. Оксид графена (ОГ) получали модифицированным методом Хамерра путем окисления графита. На начальном этапе графит смешивали с NaNO_3 , далее в полученную смесь добавляли KMnO_4 в течение четырех часов. На следующем этапе последовательно вводили дистиллированную воду и 30% раствор перекиси водорода. Функционализацию оксида графена аминогруппами (ОГ- NH_2) проводили сольвотермальным методом при нагревании порошка оксида графена в этиленгликоле при температуре 180 °С в течение 10 часов. Формирование композитов на основе оксида графена и полианилина (ОГ- NH_2 -ПАНИ) производили при добавлении порошка ОГ- NH_2 в раствор анилина и персульфата аммония, так чтобы соотношение ОГ: анилин было 2:1. Т.е. полимеризация анилина осуществлялась в присутствии ОГ- NH_2 без добавления какой-либо кислоты, как было описано в работах ранее [1,2]. Для исследования электрофизических свойств синтезированных порошковых материалов производили их электроосаждение на подложки из никелевой пены. Для осаждения оксида графена в качестве электролита использовали электролит на основе борной кислоты и персульфата аммония при нагревании. Полианилин осаждали из раствора на основе муравьиной кислоты и ацетонитрила.

Методом сканирующей электронной микроскопии определена морфология поверхности осажденных пленок. На основе полученных методом УФ-видимой спектроскопии данных была определена ширина оптической запрещенной зоны (E_g) полученных материалов по графикам Тауца. Исследования, проведенные методом спектроскопии комбинационного рассеяния подтвердили многослойную структуру ОГ (2-3 слоя), увеличение кристалличности образца ОГ на электроде, по сравнению с порошком оксида графена. Определено их удельное сопротивление, проведен расчет проводимости, концентрации носителей заряда и их подвижности.

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

Список литературы

1. Шматко В.А., Мясоедова Т.Н., Михайлова Т.А., Яловега Г.Э. Особенности электронной структуры и химических связей в композитах на основе полианилина, полученных бескислотным синтезом Конденсированные среды и межфазные границы. 2019. Т. 21. № 4. С. 569-578.
2. Myasoedova T.N., Gadgieva V.A., Miroshnichenko Yu.S. Properties of mesoporous paní nanorods obtained by facil acid-free synthesis as a sorbent for methylene blue and indigo carmine removal J Polym Res 29, 350 (2022).

Зависимость механических характеристик пористого никелида титана от морфологии пор при одноосном растяжении

Никифоров Г. А.¹, Галимзянов Б.Н.¹, Мокшин А.В.¹

¹КФУ

e-mail: nikiforov121998@mail.ru

Пористые материалы активно применяются для облегчения конструкционных материалов в авиационной и космической промышленности, для хранения топлива и в качестве демпферов [1]. Известно, что механические свойства пористых материалов уступают их сплошным аналогам. В связи с этим актуальной задачей является улучшение прочностных свойств с сохранением пористости системы. Возможными способами могут являться изготовление аморфных систем [2] и легирование материалов, однако их использование может быть сильно ограничено в случае функциональных материалов, таких как никелид титана. Никелид титана – это интерметаллид никеля и титана в атомарном соотношении 1:1. Он обладает эффектом памяти формы и сверхупругостью, которые основаны на мартенситном превращении [3], являющимся фазовым переходом 1 рода. Изменение структуры, состава компонент и привнесение примеси может негативно сказаться на функциональных свойствах данного материала. В настоящей работе рассматриваются особенности влияния морфологии пор на механические свойства пористого никелида титана.

Исследование зависимости механических свойств от морфологии проводилось с помощью метода моделирования молекулярной динамики, так как он позволяет получить максимально полную информацию об исследуемых системах. Для получения модели пористого никелида титана был разработан оригинальный алгоритм генерации пористой структуры с заданными параметрами пористости и размеров пор. С помощью этого алгоритма были получены образцы с равномерным распределением пор вдоль оси Ox и случайным распределением. Пористость образцов составила 55%. Средний линейный размер образцов 12 нм, в то время как средний линейный размер пор порядка 4.5 нм. Образцы были подвергнуты растяжению вдоль оси Ox со скоростью 10^{10} с^{-1} до момента разрушения. На основе данных моделирования были рассчитаны модуль Юнга, предел упругости и предел прочности. Было обнаружено, что у образцов с равномерным распределением пор предел прочности в 1.5 выше, а предельная деформация больше на 7%, чем у образцов с той же пористостью, но случайным распределением пор.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 19-12-00022). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис».

Список литературы

1. Liu P.S., Chen G.F. Porous Materials. Processing and Applications. Butterworth-Heinemann: Elsevier, 560 p., 2014.
2. Galimzyanov B. N., Mokshin A. V., Mechanical response of mesoporous amorphous NiTi alloy to external deformations, International Journal of Solids and Structures, V. 224, 111047, 2021.
3. Hartl D.J, Lagoudas D.C., Aerospace applications of shape memory alloys, Proc. IMechE Part G: J. Aerospace Engineering, V. 221, P. 540-548, 2007.

Применение методов машинного обучения для анализа процесса синтеза кристаллов и тонких пленок

Роженцев Д. В.¹, Редьков А. В.¹, Гращенко А.С.¹

¹ИПМаш РАН

e-mail: *roz.danil.vit@gmail.com*

Кристаллы и тонкие пленки играют большую роль в современных технологиях. В число наиболее востребованных материалов для устройств опто- и силовой электроники входят такие материалы, как нитрид галлия и карбид кремния [1]. Сложность их синтеза связана с отсутствием или дороговизной подложек для гомоэпитаксии. В цикле работ [2-3] был предложен перспективный метод синтеза подложек карбида кремния (SiC) на кремнии (Si), который позволяет решить эту проблему и получить качественные приборные гетероструктуры III-нитридов на кремнии [4]. Ключевыми особенностями этого метода, основанного на твердотельной химической реакции, является то, что пленка SiC формируется непосредственно в приповерхностной области кремния, а не сверху подложки, а также то, что под пленкой формируется система пор и полых каналов [5], которая способна демпфировать упругие напряжения, возникающие в процессе роста последующих слоев. Для контроля процесса синтеза SiC в реакторе [2] используется большое число параметров: давление, потоки газов, их соотношения, времена начала и окончания различных стадий синтеза, температура, тип исходной подложки кремния, уровень её легирования и т.д. Все эти параметры крайне нелинейно влияют на процесс роста, и пока нет полного понимания, как от того или иного параметра зависят конечные свойства выращенного в результате синтеза слоя SiC: толщина пленки и пористого подслоя, шероховатость, дефектность и многое другое. Вместе с тем, к настоящему времени проведено большое количество экспериментов по синтезу пленок SiC/Si при совершенно различных сочетаниях ростовых параметров. Для каждого из экспериментов были измерены свойства получившихся слоев, таким образом был получен большой набор данных, в котором входным ростовым параметрам сопоставлены итоговые свойства выращенной пленки. Отметим, что совокупность этих экспериментальных точек представляет собой гиперповерхность в многомерном пространстве ростовых параметров (давлений, температур и т.д.). Для анализа подобных экспериментальных зависимостей хорошо подходят методы машинного обучения. В настоящей работе для аппроксимации и обобщения всех экспериментальных результатов использованы различные подходы машинного обучения, в том числе – регрессия с применением алгоритма градиентного бустинга, основной идеей которого является комбинирование слабых предсказывающих моделей, получаемых в ходе итеративного процесса, где на каждой итерации новая модель обучается с учетом ошибок предыдущих. Помимо этого, использовалась символьная регрессия для получения аналитических выражений, описывающих зависимость того или иного свойства растущей пленки от совокупности ростовых параметров. Полученные результаты свидетельствуют о том, что предлагаемые подходы машинного обучения к анализу экспериментальных результатов и разработанные модели позволяют предсказывать конечные свойства пленки по входным параметрам в столь сложном нелинейном процессе с большой точностью. Показано, что применение подобных методов в перспективе может существенно сократить число необходимых экспериментов для полного построения карты ростовых режимов в том или ином ростовом процессе.

Список литературы

1. Krost, A., Dadgar, A. (2002). GaN-based optoelectronics on silicon substrates. *Materials Science and Engineering: B*, 93(1-3), 77-84.
2. Kukushkin, S. A., & Osipov, A. V. (2014). Theory and practice of SiC growth on Si and its applications to wide-gap semiconductor films. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(31), 313001.
3. Kukushkin, S. A., Osipov, A. V. (2008). New method for growing silicon carbide on silicon by solid-phase epitaxy: Model and experiment. *Physics of the Solid State*, 50, 1238-1245.
4. Cherkashin N. A., Sakharov, A. V., Nikolaev, A. E, Lundin, V. V., Usov, S. O., Ustinov, V. M., A.S. Grashchenko, A.V. Osipov, S.A. Kukushkin, Tsatsul'nikov, A. F. (2021). Peculiarities of epitaxial growth of III–N led heterostructures on SiC/Si substrates. *Technical Physics Letters*, 47(10), 753-756.
5. Redkov, A. V., Grashchenko, A. S., Kukushkin, S. A. et al (2019). Studying evolution of the ensemble of micropores in a SiC/Si structure during its growth by the method of atom substitution. *Physics of the Solid State*, 61, 299-306.

Исследование фотолюминесцентных свойств структур с квантовыми точками InAs, зарощенными низкотемпературным слоем GaAs при различных давлениях мышьяка

Балакирев С. В.¹, Кириченко Д.В.¹, Комаров С.Д.², Драгунова А.С.², Черненко Н.Е.¹, Шандыба Н.А.¹, Крыжановская Н.В.², Жуков А.Е.², Солодовник М.С.¹

¹ Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения, Южный федеральный университет, 347922 Таганрог, Россия

² Международная лаборатория квантовой оптоэлектроники, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 190008 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: sbalakirev@sfedu.ru

Для достижения высокой эффективности полупроводниковых устройств оптоэлектроники и нанофотоники на основе квантовых точек (КТ) необходимо обеспечение высокой степени контроля их состава, а также геометрических и структурных параметров. Однако оптические свойства КТ могут значительно изменяться в процессе зарощивания слоем широкозонного материала в связи с влиянием процессов сегрегации и поверхностной диффузии на форму, размер и состав КТ. Несмотря на большое количество работ, посвященных изучению влияния режимов зарощивания на процессы массопереноса и изменения формы и свойств КТ, вопрос влияния величины давления мышьяка на этапе зарощивания остается малоизученным. Между тем, поток мышьяка может оказывать значительное влияние на спектры фотолюминесценции (ФЛ) структуры с КТ, что обусловлено возрастающей чувствительностью эпитаксиальной системы к величине потока мышьяка при снижении температуры роста, когда снижается мобильность адатомов и возрастает вероятность захвата избыточных атомов As и формирования дефектов стехиометрического характера [1].

В данной работе представлены результаты исследований влияния давления паров мышьяка во время зарощивания КТ InAs низкотемпературным слоем GaAs различной толщины на их фотолюминесцентные свойства.

Согласно проведенным исследованиям образца с незарощенными КТ методом растровой электронной микроскопии, поверхностная плотность КТ составляет $4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ при среднем диаметре 22 нм. При этом на поверхности также формируются коалесцированные КТ большего размера (~40 нм), плотность которых составляет $3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$.

Исследования ФЛ образцов с зарощенными КТ демонстрируют существенную зависимость их спектральных характеристик от давления мышьяка, используемого при зарощивании низкотемпературным слоем GaAs. Для спектров КТ, зарощенных при более высоком давлении, наблюдается линия с явным одиночным максимумом на длине волны 1049 нм для слоя с толщиной 5 нм и 1038 нм для слоя 10 нм.

В то же время, для КТ, зарощенных при $P_{\text{As}} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ Па}$ для обеих толщин в спектрах ФЛ проявляется два пика: коротковолновый (КВ) – на уровне 1080 нм и длинноволновый (ДВ) – на уровне 1140 (слой 10 нм) и 1160 нм (слой 5 нм). Длинноволновое смещение КВ пика, так же как и появление дополнительного ДВ пика, для образцов с более низким P_{As} может быть связано с эффектами сегрегации In и перераспределением материала КТ во время зарощивания. При более высоком P_{As} поверхностная диффузия атомов III группы подавляется, в результате чего КТ в

меньшей степени подвержены изменениям в размерах. При понижении P_{As} происходит интенсификация массопереноса, приводящая к коалесценции КТ, расположенных близко друг к другу и формирующих новую фракцию, дающую вклад в длинноволновую часть спектра.

Интегральная интенсивность ФЛ КТ, зарощенных при пониженном P_{As} , при 300 К превышает интенсивность ФЛ КТ, зарощенных при повышенном P_{As} . Однако эта разница не так значительна при 77 К. Это обусловлено тем, что при более высоком P_{As} в заращивающем слое накапливается избыточный мышьяк, который выступает в качестве дополнительных центров безызлучательной рекомбинации носителей заряда, имеющих большую диффузионную длину при повышенных температурах.

Разница в интенсивностях ФЛ для КТ, зарощенных низкотемпературным слоем GaAs разной толщины, вероятно, связана с более высокой дефектностью тонких заращивающих слоев [2], объяснение которой хотя и требует дополнительных исследований, но, судя по тенденции к росту с увеличением потока мышьяка, также связано с его влиянием.

Таким образом, в работе экспериментально продемонстрировано значительное влияние давления мышьяка при заращивании КТ InAs низкотемпературным слоем GaAs различной толщины на спектральные характеристики полученных структур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке проекта № FENW-2022-0034 Министерства науки и высшего образования РФ и проекта "Зеркальные лаборатории" НИУ ВШЭ. Оптические измерения выполнялись на УНУ «Комплексный оптоэлектронный стенд».

Список литературы

1. M. Missous, *Microelectronics J.* Vol. 27, p. 393 (1996).
2. S. Okumura, K. Fujisawa, T. Naruke, K. Nishi, Y. Onishi, K. Takemasa, M. Sugawara, and M. Sugiyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 61, p. 085503 (2022).

Investigation of vibrational properties of graphene. The classical approach

Иванченко Г. С.¹, Тен А.В.¹

¹ВолГУ

e-mail: genaivanchenko@volsu.ru

Графен является материалом, хорошо изученным как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. С момента открытия в 2005 году ему посвящены многочисленные теоретические работы, в частности и колебательным свойствам тоже.

В данной работе мы не претендуем на получение совершенно новых результатов, скорее наоборот: демонстрируем возможность использования классического подхода для получения хорошо известных результатов квантово-химических расчетов (например, методом функционала плотности) [1-3]. При этом наглядно можно проследить, какие виды взаимодействий будут учтены в модели, так как это напрямую следует из вида гамильтониана. Теоретические результаты классического формализма можно сравнить с экспериментальными данными.

Особенностью представленного здесь расчета фононного спектра является совмещение классического и квантового подходов. В основе рассмотрения лежит Гамильтонов подход, рассмотрены классические уравнения движения. Отдельные параметры модельного гамильтониана были получены с помощью квантово-химических расчетов.

Предыдущие аналитические исследования фононного спектра графена и родственных ему материалов сводились к учету энергии упругих деформаций длин связей между атомами, что приводило к вырождению дисперсионных зависимостей, и полученные результаты демонстрировали только часть колебательных мод. В этом исследовании мы провели учет деформаций углов между связями и упругость графена при изгибе листа.

Анализ влияния изменений связей между атомом и двумя его соседями показал, что в квадратичном приближении деформация угла между связями зависит от следующих компонент:

$$\tilde{\alpha}_{ab} \approx -\frac{\tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{a} + 2\mathbf{b}) + \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{b} + 2\mathbf{a})}{\sqrt{3}a} + \frac{(\tilde{\mathbf{a}}\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{b}}\mathbf{b})^2}{2\sqrt{3}a^2} - \frac{\tilde{\mathbf{a}}^2 + 4\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{b}} + \tilde{\mathbf{b}}^2}{2\sqrt{3}a},$$

где \mathbf{a}, \mathbf{b} – вектора недеформированных связей центрального атома с его двумя соседями; $a = |\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| = 0.14$ нм – длина связей; $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}}$ – деформации связей ($|\tilde{\mathbf{a}}| \ll a, |\tilde{\mathbf{b}}| \ll a$). В этом выражении:

$$\begin{aligned} & \frac{(\tilde{\mathbf{a}}\mathbf{a} - \tilde{\mathbf{b}}\mathbf{b})^2}{2\sqrt{3}a^2} \text{ – влияние сдвига атомов вдоль связей;} \\ & -\frac{\tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{a} + 2\mathbf{b}) + \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{b} + 2\mathbf{a})}{\sqrt{3}a} - \left(\frac{\tilde{\mathbf{a}}^2 + 4\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{b}} + \tilde{\mathbf{b}}^2}{2\sqrt{3}a} \right)_{\parallel} \approx -\frac{\tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{a} + 2\mathbf{b}) + \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{b} + 2\mathbf{a})}{\sqrt{3}a} \text{ – влияние поворота} \\ & \text{связей в плоскости графена;} \end{aligned}$$

$$3. \quad - \left(\frac{\tilde{\mathbf{a}}^2 + 4\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{b}} + \tilde{\mathbf{b}}^2}{2\sqrt{3}a} \right)_{\perp} = - \frac{\tilde{a}_z^2 + 4\tilde{a}_z\tilde{b}_z + \tilde{b}_z^2}{2\sqrt{3}a} \quad - \text{влияние отклонения связей от плоскости графена.}$$

Проведенный анализ показывает, что изменение угла между связями зависит линейно от поворота связей в плоскости графена, а смещение атомов в направлении перпендикулярном плоскости графена при таком подходе дает поправку второго порядка малости, и оказывает пренебрежимо малое влияние по сравнению с деформациями вдоль плоскости:

$$\tilde{\alpha}_{ab} \approx - \frac{\tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{a} + 2\mathbf{b}) + \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{b} + 2\mathbf{a})}{\sqrt{3}a}$$

Однако графен обладает жесткостью по отношению к деформациям сворачивания. Это объясняется наличием π -орбиталей, ориентированных перпендикулярно плоскости графена. Для учета их влияния необходимо ввести жесткость углов β между плоскостью и π -орбиталями. Приращение угла β в линейном приближении имеет вид:

$$\tilde{\beta} \approx - \frac{a_z}{a}$$

Элементарная ячейка графена содержит два атома углерода A_{ij}, B_{ij} , где i, j – номер элементарной ячейки. Запишем Гамильтониан системы в гармоническом приближении, при этом будем учитывать взаимодействие каждого из атомов только с ближайшими соседями:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left\{ (\mathbf{p}_{i,j}^A)^2 + (\mathbf{p}_{i,j}^B)^2 \right\} + \frac{k_1}{2} \sum_{i,j} \left\{ (\tilde{\mathbf{a}}_{i,j})^2 + (\tilde{\mathbf{b}}_{i,j})^2 + (\tilde{\mathbf{c}}_{i,j})^2 \right\} + \frac{k_2}{2} \sum_{i,j} \sum_{\xi=\{A_{i,j}, B_{i,j}\}} \left\{ (\tilde{\alpha}_{ab}^{\xi})^2 + (\tilde{\alpha}_{bc}^{\xi})^2 + (\tilde{\alpha}_{ca}^{\xi})^2 \right\} + \frac{k_3}{2} \sum_{i,j} \sum_{\xi=\{A_{i,j}, B_{i,j}\}} \left\{ (\tilde{\beta}_a^{\xi})^2 + (\tilde{\beta}_b^{\xi})^2 + (\tilde{\beta}_c^{\xi})^2 \right\}$$

Здесь m – масса атомов углерода; k_1, k_2, k_3 – жесткости связей и углов; $\tilde{\mathbf{a}}_{i,j}, \tilde{\mathbf{b}}_{i,j}, \tilde{\mathbf{c}}_{i,j}$ – деформации связей между атомом A_{ij} , и тремя соседними атомами В; $\tilde{\mathbf{p}}_{i,j}$ – импульсы атомов; $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$ – деформации углов при указанных атомах и связях.

Используя Гамильтониан системы, записываем уравнения движения атомов. Получаем систему двух векторных трех мерных уравнений относительно смещений атомов $\tilde{\mathbf{r}}_{i,j}^A, \tilde{\mathbf{r}}_{i,j}^B$. Подставляя решение в виде гармонических волн, распространяющиеся вдоль листа графена, получаем однородную систему линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд колебаний атомов. Определитель основной матрицы системы имеет размер 6×6 и симметричный блочный вид. Эта система будет иметь нетривиальные решения в случае, если определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} P_{xx} & P_{xy} & 0 \\ P_{yx} & P_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & P_{zz} \end{vmatrix} = 0,$$

где P – блоки матрицы размером 2×2 .

Согласно [4] определитель блочной матрицы может быть представлен в виде произведения соответствующих блоков:

$$|P_{zz}| \cdot |P_{xx}| \cdot |P_{yy} - P_{yx}P_{xx}^{-1}P_{xy}| = 0$$

В результате были получены три независимых неполных квадратных уравнения относительно квадрата циклической частоты, которые позволили не только получить аналитическое выражение дисперсионной зависимости для каждой колебательной моды, но и проанализировать влияние различных параметров гамильтониана на фононный спектр в целом и на каждую моду в отдельности.

Список литературы

1. Nika D L et al. Phys. Rev. B 79 155413 (2009)
2. Yan J-A, Ruan W Y, Chou M Y Phys. Rev. B 77 125401 (2008)
3. Mounet N, Marzari N Phys. Rev. B 71 205214 (2005)
4. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. 5-е изд. — М.: Физматлит, 2004. — 560 с.

Особенности спонтанного формирования структуры «ядро-оболочка» в нитевидных нанокристаллах InGaN методом молекулярно-пучковой эпитаксии

Гриджин В. О.¹, Резник Р.Р.¹⁻³, Котляр К.П.¹⁻³, Драгунова А.С.⁴, Кириленко Д.А.⁵, Крыжановская Н.В.⁴, Цырлин Г.Э.^{1-3,5}

¹СПбГУ

²СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова

³ИАП РАН

⁴НИУ ВШЭ

⁵ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: gridchinvo@gmail.com

На протяжении последних десятилетий активное внимание исследователей уделяется полупроводниковым материалам InGaN в связи с тем, что они обладают прямозонной электронной структурой с шириной запрещенной зоны, варьируемой от ~0.7 (InN) до ~3.4 эВ (GaN) в зависимости от содержания In. По причине огромного рассогласования постоянных решеток между InN и GaN (10 и 15% для *a* и *c*, соответственно) тройные соединения InGaN с содержанием In 20-80% подвержены фазовому распаду, приводящему к образованию кластеров различного химического состава и низкому кристаллическому качеству выращиваемых эпитаксиальных слоев [1]. Как было показано ранее [2,3], полупроводниковые соединения InGaN в структуре нитевидных нанокристаллов (ННК) в определенных условиях спонтанно формируются в структуре «ядро-оболочка». Однако, остаётся открытым вопрос о граничных условиях спонтанного формирования структуры «ядро-оболочка». В том числе, неизвестно о возможностях контролируемо выращивать ННК InGaN с такой структурой.

В настоящей работе ННК InGaN выращивались на подложках Si(111) методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота на установке Riber Compact 12. Эксперименты по росту проходили в азот-обогащенных условиях в ростовых температурах 650-665 °С и равных между собой потоках Ga и In. Было исследовано влияние ростовой температуры и времени роста на формирование ННК. Обнаружено, что ННК со спонтанно-сформированной структурой «ядро-оболочка» имеют содержание In в «ядрах» порядка 40±5%, а в оболочке порядка 2-4%. Исследования влияния времени роста на формирование ННК показали, что в начальный момент времени на подложке формируются нитевидные нанокристаллы GaN, поверх которых на высоте порядка 300 нм образуются островки существенно меньшего диаметра. Дальнейшее увеличение времени роста показало, что сформированные островки служат катализаторами роста InGaN со структурой «ядро-оболочка». Предложен механизм образования такой структуры. Методами растровой электронной спектроскопии и спектроскопии фотолюминесценции предложены способы выявления структуры «ядро-оболочка» в ННК InGaN. В том числе, образцы показали фотолюминесценцию в диапазоне 550-650 нм в зависимости от ростовых параметров при измерениях в комнатной температуре и накачке He-Cd лазером.

Таким образом, полученные результаты могут представлять интерес как для фундаментальных исследований механизмов роста ННК на основе тройных соединений в области метастабильной устойчивости, так и для прикладных исследований, в частности создания микросветоизлучающих диодов на кремнии.

Эксперименты по росту проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования в части государственного задания № 0791-2020-0003. Исследования свойств образцов проведены при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета в рамках исследовательского гранта № 94031047.

Список литературы

1. Morkoç H. Handbook of nitride semiconductors and devices, Materials Properties, Physics and Growth. – John Wiley & Sons, 2009.
2. Tabata T. et al. Growth of InGaN nanowires on a (111) Si substrate by RF-MBE //physica status solidi c. – 2012. – Т. 9. – №. 3-4. – С. 646-649.
3. Gridchin V. O. et al. Multi-colour light emission from InGaN nanowires monolithically grown on Si substrate by MBE //Nanotechnology. – 2021. – Т. 32. – №. 33. – С. 335604.

Моделирование методом Монте-Карло фотоэлектрического эффекта в черном фосфоре

Конченков В. И.¹, Завьялов Д.В.¹, Сивашова Е.С.¹

¹ВолГТУ

e-mail: *kontchenkov@yandex.ru*

Черный фосфорен, экспериментально полученный в 2014 году, имеет анизотропный энергетический спектр [1]:

$$\varepsilon = \sqrt{v_f^2 p_x^2 + (\Delta + u p_y^2)^2} \quad (1)$$

Черный фосфорен представляет собой полупроводник с прямой зоной и относится к так называемым диракоподобным материалам: вдоль одного направления (ось ОХ) движение носителей заряда подобно движению в графене, зависимость энергии от соответствующей компоненты квазиимпульса линейна, а зависимость энергии от перпендикулярной компоненты квазиимпульса (в направлении оси ОУ) параболична. Представляет интерес исследование проявлений анизотропии энергетического спектра рассматриваемого материала в кинетических эффектах, одним из которых является эффект увлечения носителей тока фотонами [2, 3]. Данный эффект, обусловленный передачей импульса фотона электронной подсистеме, в рамках квазиклассического подхода объясняется как результат действия силы Лоренца, возникающей при движении электрона в переменных электрическом и магнитном полях волны.

Рассмотрим ситуацию, когда вдоль поверхности черного фосфорена распространяется электромагнитная волна, так что вектор напряженности магнитного поля перпендикулярен плоскости образца (вдоль оси ОZ), а вектор напряженности электрического поля направлен произвольным образом в плоскости ХОУ. Классические уравнения движения электрона принимают вид:

$$\begin{cases} \frac{d\pi_x}{d\tau} = \varepsilon_{0x} \cos \tau + h_0 \frac{2\pi_y(1+\pi_y^2)}{\sqrt{\pi_x^2+(1+\pi_y^2)^2}} \cos \tau, \\ \frac{d\pi_y}{d\tau} = \varepsilon_{0y} \cos \tau - h_0 \frac{\pi_x}{\sqrt{\pi_x^2+(1+\pi_y^2)^2}} \cos \tau. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь введены обозначения: $\pi_x = v_f p_x / \Delta$, $\pi_y = \sqrt{\frac{u}{\Delta}} p_y$ – безразмерные компоненты квазиимпульса электрона, $\tau = \omega t$, $\varepsilon_{0x} = \frac{e E_0 v_f}{\Delta \omega} \sin \alpha$, $\varepsilon_{0y} = \frac{e E_0}{\omega} \sqrt{\frac{u}{\Delta}} \cos \alpha$, $h_0 = \frac{e v_f H_0}{\omega} \sqrt{\frac{u}{\Delta}} \sin \alpha$, α – угол между положительным направлением оси ОУ и вектором напряженности электрического поля.

Ввиду нелинейности уравнений движения решение кинетического уравнения осуществляется методом Монте-Карло. Считаем, что в промежутках между столкновениями электрон движется согласно уравнениям движения (2), а момент столкновения определяется на основе вероятностей рассеяния носителей заряда на акустических и оптических фононах, заряженных и незаряженных примесях [4, 5]. В работе исследуется зависимость фототока увлечения от положения плоскости поляризации волны по отношению к осям симметрии фосфорена, от интенсивности падающей волны.

Список литературы

1. Ezawa, M., Highly anisotropic physics in phosphorene, J. Phys.: Conf. Ser., V. 603, 012006, 2015.
2. Завьялов Д.В., Крючков С.В., Кухарь Е.И., Воздействие сильного электрического поля на радиоелектрический эффект в полупроводниковой сверхрешетке, ФТП, Т. 41(7), 726-729, 2007.
3. Shi L., Zhang D, Chang K., Song J.C.W., Geometric Photon-Drag Effect and Nonlinear Shift Current in Centrosymmetric Crystals, Phys. Rev. Lett. V. 126, 197402, 2021.
4. Борздов В.М., Борздов А.В., Василевский Ю.Г., Разыгрывание полярного угла рассеяния электронов на ионах примеси при моделировании процессов переноса заряда в полупроводниках методом Монте-Карло, ФТП, Т. 57(1), 14-20, 2023.
5. Завьялов Д.В., Крючков С.В., Тюлькина Т.А., Численное моделирование эффекта выпрямления тока, индуцированного электромагнитной волной в графене, ФТП, Т. 44(7), 910-914, 2010.

Оптическая диагностика гетероструктур на основе InGaAsP/InP(001)

Гордеева А. Б.¹, Власов А.С., Гагис Г.С., Маричев А.Е., Пушный Б.В., Шмидт Н.М., Щеглов М.П.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *anastasiya.gordeeva@mail.ioffe.ru*

Современная оптоэлектроника базируется на использовании тонких пленок различных соединений как основы для создания приборных структур. Особую актуальность приобретает развитие методик их диагностики. Особенно важным является развитие способов характеризации структур на этапе их формирования. Такие способы, прежде всего, должны быть неразрушающими, т.е. процесс диагностики не должен влиять на свойства формируемых структур. С этой точки зрения наиболее подходящими являются оптические методики. В работе мы использовали методику анизотропного отражения света (АО), разработанную для исследования поверхностей кубических полупроводников, симметрия которых понижена по сравнению с объемом. Целью настоящей работы являлась разработка способа оптической диагностики с использованием методики спектроскопии АО пленок твердых растворов InGaAsP/InP(001), выращенных методом МОС-гидридной эпитаксии на подложках InP(001). Такие материалы являются перспективными для создания фотоприемников в ближнем ИК диапазоне.

В общем случае спектры АО представляют собой суперпозицию вкладов обусловленных перестройкой структуры поверхности или интерфейсе, анизотропии напряжения и рельефа, приповерхностного электрического поля. Разделение этих вкладов является непростой задачей. Поэтому для практической диагностики определенного типа объектов необходимо проведение предварительных исследований, в рамках которых результаты должны сопоставляться с данными других методик. В настоящей работе образцы также исследовались методами фотолюминесценции и рентгеновской дифракции, АСМ.

В работе были получены и проанализированы спектры АО пленок твердых растворов InGaAsP различного состава толщиной 1000 нм в диапазоне 1,5-5.5 эВ, Исследования проводились на воздухе при комнатной температуре. Было показано, что в образцах, обладающих кристаллическим совершенством, в спектре АО присутствуют достаточно узкие линии, соответствующие энергиям оптических переходов подложки и пленки. В спектрах пленок, выращенных вблизи границы области спинодального распада, появляется одноосное напряжение, которое приводит к возрастанию амплитуды особенностей вблизи энергий оптических переходов $E_1-E_1+D_1$. Также в некоторых таких пленках происходит разрушение структуры на поверхности пленок, что видно по топографии АСМ. В спектрах АО это приводит к уширению и размытию спектральных особенностей в УФ области, когда глубина проникновения света много меньше толщины пленки. В тоже время, оптический отклик ИК диапазона позволяет получить информацию о состоянии интерфейса. В работе уделяется особое внимание исследованию области 1.6-2 эВ. В эту область не попадают энергии оптических переходов пленок заданного состава и подложки InP. Однако в спектрах АО некоторых образцов в данной области наблюдаются спектральные особенности. Мы полагаем, что обнаруженные линии могут быть связаны с переходом E_0+D_0 в GaAs, кристаллическая фаза которого начинает формироваться в результате спинодального распада в области интерфейса пленки и подложки. Образцы, в которых были обнаружены такие спектральные особенности, либо не обладали

кристаллическим совершенством, либо разрушались со временем. Можно сделать вывод о том, что данные особенности свидетельствуют о некачественном интерфейсе, на котором начинается процесс распада. Таким образом, методика АО позволяет выявить признаки будущей деградации твердого раствора на начальной стадии, когда другие методики еще не обнаруживают его. Данный способ является оптическим, неразрушающим и может быть использован в процессе роста in-situ.

Список литературы

1. Маричев А.Е., Левин Р.В., Гордеева А.Б., Гагис Г.С., Кучинский В.И., Пушный Б.В., Прасолов Н.Д., Шмидт Н.М., Письма ЖТФ т.43, 2, стр.3-9, 2017

Обнаружение клиновидных нанокластеров золота на поверхности GaAs и их изучение с помощью поляризационной спектроскопии плазмонов

Берковиц В. Л.¹, Кособукин В. А.¹, Улин В.П.¹, Солдатенков, Ф.Ю.¹, Алексеев П.А.¹, Хахулин С.А.², Комков О.С.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: vladimir.berkovits@mail.ioffe.ru

Для нанофотоники и ее приложений особое значение имеет сочетание оптических свойств полупроводника и плазмонных нанокластеров металла. Это делает актуальным развитие технологий для создания структур с необычными оптическими свойствами и их исследование. Так, для "традиционной" пары Au/GaAs была разработана технология создания нанокластеров золота на поверхности GaAs [1]. В ней использовался высокотемпературный отжиг пленки Au, напыленной на химически модифицированную поверхность кристалла GaAs. Было показано, что размер, кластеров Au, анизотропия их формы и ориентация зависят от состояния поверхности подложки GaAs(001). В случае поверхности GaAs, пассивированной монослоями азота или серы перед нанесением пленки золота, при отжиге формируются массивы кластеров Au вытянутой формы с ориентацией, в среднем, в направлении [1-10] кристалла GaAs [1].

В данной работе обсуждаются 1) создание нового типа кластеров золота путем отжига тонких пленок Au на поверхности GaAs *p*-типа, 2) их диагностика и 3) спектроскопическое исследование плазмонов. Особенностью новых кластеров являются их кристаллографически детерминированная вытянутая форма и строгая ориентация в направлении [110] кристалла, а также появление плазмонных спектров в ближней инфракрасной области. Для экспериментов пленки золота толщиной 5-20 нм наносились на естественно окисленную поверхность (001) подложек *p*-GaAs и далее отжигались при температуре 350°C. В структурах Au/*p*-GaAs участки пленки Au находятся в прямом контакте с поверхностью GaAs. В местах контакта золото химически взаимодействует с GaAs. Методами атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии установлено, что в результате отжига структуры Au/*p*-GaAs у поверхности GaAs формируются металлические кластеры состава Au₂Ga [2]. Каждый кластер представляет собой клин, имеющий прямоугольное основание на поверхности кристалла и полностью проникающий в кристалл. Длинная сторона прямоугольного основания и противоположащее ему ребро параллельны направлению [110], в котором вытянут клин. Боковые грани клина образованы плоскостями семейства {111} кристаллической решетки GaAs, заполненными атомами галлия и мышьяка. Вытянутость клиновидных кластеров Au₂Ga в направлении [110] объясняется тем, что золото сильно взаимодействует с атомами Ga, лежащими в плоскостях (111) и (-1-11), но не с атомами As, заполняющими плоскости (-111) и (1-10), параллельные направлению [110]. Обнаруженный тип анизотропии кластеров принципиально иной, чем удлинение кластеров Au в направлении [1-10] на пассивированной поверхности GaAs, которое связывается с анизотропией скорости диффузии атомов Au по поверхности [1]

Анизотропия плазмонов, локализованных на клиновидных кластерах Au₂Ga, исследовалась методами поляризационной оптической спектроскопии. Наличие анизотропии плазмонов однозначно доказано обнаружением спектра анизотропного отражения с отрицательной особенностью при энергии 0.7-1.1 эВ, которой нет в спектрах структур Au/GaAs, образующихся на пассивированных поверхностях GaAs. Этой низкоэнергетической особенностью в спектрах

нормального отражения света с поляризацией $E \parallel [110]$ соответствует интенсивная полоса. Она представляет собой неоднородно уширенный спектр локализованных плазмонов, поляризованных в направлении $[110]$ вытянутости клиновидных кластеров. Для таких кластеров, имеющих группу симметрии C_{2v} , положение и уширение спектральной особенности при 0.7-1.1 эВ объяснены в модели поляризуемости трехосных Au эллипсоидов разной длины, находящихся в среде с большой диэлектрической проницаемостью. Для структур Au/*p*-GaAs в спектрах отражения с ортогональной поляризацией $E \parallel [1-10]$ наблюдается полоса 1.3-2.2 эВ, которой спектре анизотропного отражения соответствует положительная особенность; интерпретация спектров такая же, как в [1]. Этот факт означает, что при отжиге на поверхности GaAs(001) возможно также образование некоторого количества кластеров Au, вытянутых в направлении $[1-10]$, как в случае структур Au/GaAs с пассивирующим слоем [1].

Список литературы

1. V.L. Berkovits, V.A. Kosobukin, V.P. Ulin, et. al., Phys. Stat. Sol. B **259** (1), 2100394 (2022)
2. T. Yoshie, C.L. Bayer, and A.G. Milnes, Thin Solid Films **111**, 149-166 (1984)

Синтез наноразмерных плёнок дисульфида вольфрама методом импульсного лазерного осаждения

Лобанова Е. Ю.^{1,2}, Коровин А.М.¹, Иванов И.А.¹, Дорогов М.В.², Дворцова П.А.¹, Сутурин С.М.¹, Давыдов В.Ю.¹, Елисеев И.А.¹, Смирнов А.Н.¹, Соколов Н.С.¹,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Университет ИТМО

e-mail: *elobanova@itmo.ru*

Двумерные материалы привлекательны для применений в электронике [1] и сенсорике [2]. Важной проблемой, лимитирующей производительность устройств двумерной электроники, является недостаток диэлектриков: тонкие слои традиционных диэлектриков аморфны и дают высокую концентрацию ловушек на интерфейсах с двумерными материалами. Перспективной заменой оксиду кремния в качестве изолятора является фторид кальция CaF_2 [3]. Ранее была продемонстрирована возможность создания полевого транзистора на основе структуры $\text{MoS}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}$ (111) [4]. Пленка MoS_2 толщиной 2 монослоя (менее 2 нм) была синтезирована методом химического осаждения из газовой фазы и перенесена на поверхность гетероструктуры CaF_2/Si (111). Было показано, что ряд важных характеристик приборов на основе таких структур делает их привлекательными для практических применений. Существенным ограничением данной технологии является необходимость переноса полупроводниковой пленки на подложку. Перспективным путем устранения этого недостатка является синтез полупроводниковой пленки двумерного кристалла непосредственно на поверхности фторида кальция. Целью настоящей работы была отработка методики синтеза планарных пленок дисульфида вольфрама на поверхности фторида кальция. Решение этой задачи позволит приблизиться к созданию приборов нанoeлектроники: полевых транзисторов нового поколения, основанных на применении двумерных кристаллов в качестве материала канала в сочетании с диэлектрическим слоем фторида кальция, обладающего превосходными изолирующими характеристиками, а также высокочувствительных био- и газовых сенсоров.

Синтез наноразмерных пленок двумерного кристалла WS_2 производился методом импульсного лазерного осаждения на установке производства SURFACE, Германия. Для абляции использован KrF эксимерный лазер CompexPro 201 (Coherent, США). В качестве источника WS_2 использована поликристаллическая мишень из этого материала. Для характеристики морфологии и состава пленок использован комплекс взаимно-дополняющих диагностических методов: атомно-силовая и сканирующая электронная микроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния света, а также дифракция быстрых электронов на отражение, измеряемая непосредственно в процессе синтеза пленок WS_2 . На первой стадии были отработаны режимы выращивания WS_2 на подложке Al_2O_3 (0001). Выбор подложки обусловлен ее доступностью. По результатам этого этапа были подобраны оптимальные условия синтеза тонких однородных слоёв WS_2 : давление буферного газа (Ar), температура подложки, плотность энергии лазера на мишени, частота импульсов лазера. Основное влияние уделялось взаимосвязи морфологии пленок и условий роста. Так, было показано, что увеличение давления буферного газа до 0.1 мбар приводит к росту вертикально-ориентированных наностенок, а повышение температуры роста до 700 °C - к образованию нанонитей на поверхности Al_2O_3 , причем картины дифракции быстрых электронов и спектры комбинационного рассеяния таких структур имеют характерные особенности WS_2 . Поэтому важно совместное использование различных

диагностических методов. Наиболее гладкие пленки удалось получить при температуре роста 500 °С с последующим прогревом до 700 °С и давлении буферного газа 0.05 мбар.

На втором этапе синтез WS_2 производился непосредственно на подложках $CaF_2/Si(111)$, предварительно выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Оптимальные условия роста пленок, полученные на предыдущем этапе, были использованы в качестве исходной точки для ростовых экспериментов на подложке фторида кальция. На данном этапе основное внимание было уделено выращиванию одно- и двухмонослойных пленок WS_2 и характеристике их морфологии, состава и кристаллической структуры. В целом условия, подобранные для роста на Al_2O_3 , оказались адекватными для получения пленок с привлекательными для практического применения свойствами на поверхности CaF_2 .

Список литературы

1. Tianyao W., Zichao H., Xinyi Z., Qingyu X., Tao L., Du X., Two dimensional semiconducting materials for ultimately scaled transistors, *iScience*, vol. 25, 105160, 2022
2. Bolotsky A., Butler D., Dong C., Gerace K., Glavin N.R., Muratore C., Robinson J.A., Ebrahimi A., Two-Dimensional Materials in Biosensing and Healthcare: From *In Vitro* Diagnostics to Optogenetics and Beyond, *ACS Nano*, vol. 13, 9781–9810, 2019
3. С.М. Сутурин, А.Г. Банщиков, Н.С. Соколов, С.Э. Тягинов, М.И. Векслер, Статические вольт-амперные характеристики туннельных МДП структур $Au/CaF_2/n-Si(111)$, *Физика и Техника Полупроводников*, том. 42, 1333–1338, 2008
4. Illarionov, Y.Y., Banshchikov, A.G., Polyushkin, D.K., Wachter, S., Knobloch, T., Thesberg, M., Vexler, M.I., Waltl, M., Lanza, M., Sokolov, N.S., Mueller, T., Reliability of scalable MoS_2 FETs with 2 nm crystalline CaF_2 insulators, *2D Materials*, vol. 6, 045004, 2019
5. Sedki, M., Chen, Y., Mulchandani, A., Non-carbon 2D materials-based field-effect transistor biosensors: recent advances, challenges, and future perspectives, *Sensors*, vol. 20 (17), 4811, 2020

Исследование сферолитовой микроструктуры тонких пленок цирконата-титаната свинца, полученных методом высокочастотного магнетронного распыления

Валеева А.Р.¹, Старицын М.В.², Каптелов Е.Ю.¹, Пронин И.П.¹, Сенкевич С.В.^{1, 3}, Елшин А.С.⁴, Мишина Е.Д.⁴

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей»

³РГПУ им. А. И. Герцена

⁴МИРЭА-Российский технологический университет

e-mail: *ravilka834@gmail.com*

В последнее время заметно вырос интерес к изучению природы образования сферолитовых кристаллических структур. Хорошо известно, что эти структуры образуются при определенных условиях в большинстве известных материалов (то есть, вне зависимости от их состава) [1-2]. Нынешнее внимание к сферолитам связано, в основном, с разработкой миниатюрных пьезоэлектрических кварцевых осцилляторов, для изготовления которых необходимо использовать тонкопленочные технологии [2-3]. Одной из наиболее распространенных форм сферолитов являются лучистые сферолиты, у которых наблюдается вращение ростовой оси в процессе радиального роста. Это приводит к структурным нарушениям и, по всей видимости, негативным образом сказывается на осцилляторных свойствах выращенных кварцевых пленок.

Работы последних лет показывают, что сферолитовые структуры характерны также для тонких сегнетоэлектрических пленок различного состава, в частности, цирконата-титаната свинца (ЦТС), которые являются основными материалами для создания на их основе разнообразных устройств микроэлектромеханики [4-5]. Однако особенности кристаллизации сферолитовой микроструктуры в тонких пленках ЦТС до настоящего времени практически не исследованы, как не исследована взаимосвязь микроструктуры с их физическими свойствами. Целью настоящей работы является изучение микроструктуры тонких пленок ЦТС, состав которых соответствует области морфотропной фазовой границы, при варьировании размеров сферолитовых блоков и изменения их диэлектрических свойств

Тонкопленочные структуры ЦТС были изготовлены двухстадийным методом высокочастотного магнетронного распыления. Пленки осаждались на платинированные подложки кремния (Pt/TiO₂/SiO₂/Si). Состав распыляемой керамической мишени отвечал элементному соотношению атомов циркония и титана $Zr/Ti = 54/46$ и соответствовал области морфотропной фазовой границы. Изготавливались два типа пленок, отличающихся: а) 100% кристаллизацией фазы перовскита, состоящих из сферолитовых блоков и б) сферолитовыми островками перовскитовой фазы в пироклорной матрице. Для вариации размера сферолитов изменялось расстояние между мишенью и подложкой в диапазоне от 30 до 70 мм. Для исследования диэлектрических характеристик на поверхности приготовленных пленок изготавливался массив контактных платиновых площадок.

Кристаллическая структура и фазовое состояние пленок контролировались методом рентгеноструктурного анализа (θ -2 θ), Rigaku Ultima IV. Микроизображения перовскитовых пленок изучали с помощью растрового электронного микроскопа Tescan Lyra 3, оснащенного детектором регистрации картин дифракции отраженных электронов. Нелинейно-оптические изображения поверхности образцов были получены с помощью модифицированного

конфокального микроскопа WITec alpha 300S. Вторая оптическая гармоника возбуждалась излучением фемтосекундного лазера с длиной волны 800 нм, частотой повторения 80 МГц и длительностью 100 фс. Изображения фиксировались в геометрии «на отражение».

В работе было исследовано изменение кристаллической структуры, характера микроструктуры, сигнала нелинейно-оптического отклика, диэлектрических свойств образцов в зависимости от линейного размера сферолитов. Было обнаружено, что образование сферолитовой структуры реализуется через промежуточную перовскитовую фазу, характеризующуюся меньшей плотностью. С увеличением размера сферолитов наблюдался немонотонный характер изменения сигнала второй оптической гармоники, достигая, при определенных размерах сферолитов, аномально высоких значений. Аналогичным образом вели себя структурные и диэлектрические параметры сформированных пленок. В работе обсуждаются причины и механизмы, ответственные за поведение наблюдаемых изменений.

Список литературы

1. Shtukenberg A.G., Punin Yu.O., Gunn E., Kahr B. Spherulites // *Chemical Review*. 2012. 112. 1805-1838. <https://doi.org/10.1021/cr200297f>
2. Lutjes N.R., Zhou S., Antoja-Lleonart J., Noheda B., Ocelík V. Spherulitic and rotational crystal growth of Quartz thin films. // *Scientific Reports*. 2021, 11(1). 14888. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-94147-y>
3. Musterman E.J., Dierolf V., Jain H. Curved lattices of crystals formed in glass. // *International Journal of Applied Glass Science*. 2022. 13(3). 402-419. <https://doi.org/10.1111/ijag.16574>
4. Song L., Glinsek S., Defay E. Toward low-temperature processing of lead zirconate titanate thin films: Advances, strategies, and applications. // *Appl. Phys. Rev.* 2021. V.8. 041315
5. Бухараев А.А., Звездин А.К., Пятаков А.П., Фетисов Ю.К. Стрейнтроника — новое направление микро- и нанoeлектроники и науки о материалах. // *Успехи физических наук*. 2018. Т. 188, С.1288–1330. DOI: 10.3367/UFNr.2018.01.038279

Структура и светоизлучающие свойства нанокристаллов оксида галлия, ионно-синтезированных в диэлектрических матрицах

Королев Д. С.¹, Матюнина К.С., Никольская А.А., Михайлов А.Н., Белов А.И., Крюков Р.Н., Ревин А.А., Сушков А.А., Павлов Д.А., Тетельбаум Д.И.

¹ННГУ им. Н.И. Лобачевского

e-mail: dmkorolev@phys.unn.ru

Изучение свойств материалов на основе оксида галлия привлекает внимание благодаря таким его уникальным свойствам как большая ширина запрещенной зоны, существование различных полиморфных модификаций с отличающимися физическими свойствами, а также возможностью получения монокристаллических подложек большого диаметра. Эти свойства позволяют рассматривать оксид галлия как материал для создания силовых приборов, газовых сенсоров, а также «солнечно-слепых» фотодетекторов нового поколения. Однако, несмотря на все преимущества данного материала, монокристаллические подложки остаются слишком дорогими для широкого практического использования, а технологии получения тонких пленок (как эпитаксиальных, так и аморфных) пока недостаточно отработаны. Возможным вариантом может являться ионно-лучевой синтез нанокристаллических включений оксида галлия в диэлектрических матрицах. Этот метод является совместимым с традиционной микроэлектронной технологией, а уникальные особенности ионной имплантации позволяют получать структуры с широким диапазоном физических свойств. В данной работе изучены процессы формирования, структура и светоизлучающие свойства нанокристаллов оксида галлия, синтезированных в матрицах SiO_2 и Al_2O_3 на кремнии.

Экспериментальные образцы были получены путем имплантации в пленки SiO_2/Si и $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$ ионов галлия и кислорода с энергиями 80 и 23 кэВ, соответственно, обеспечивающими совпадение расчетных максимумов профиля распределения имплантированных атомов. Дозы ионов подбирались таким образом, чтобы обеспечить в максимуме концентрацию ~ 15 ат.%. Постимплантационный отжиг проводился при температурах 300-900 °С при различных условиях – последовательный и однократный отжиг, а также отжиг в различных атмосферах – кислорода и азота. Продолжительность каждого отжига составляла 30 минут.

Исследование химического состава образцов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показало, что даже в отсутствие постимплантационного отжига происходит формирование связей Ga-O, служащих зародышами для формирования нанокристаллических включений. При этом соотношение галлия в элементном и окисленном состоянии существенно зависит от типа матрицы и порядка имплантации. После отжига при температуре 900 °С в атмосфере азота происходит увеличение концентрации связей Ga-O, а отжиг в атмосфере кислорода приводит к практически полному окислению галлия. Исследование методом просвечивающей электронной микроскопии выявило формирование нанокристаллических включений в пленке SiO_2 . Расшифровка данных микроскопии позволила установить, что при использованных условиях ионного синтеза происходит формирование нанокристаллов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. По данным фотолюминесцентной спектроскопии обнаружено появление полосы в области 400-550 нм в образцах после отжига, предположительно связанных с дефектным излучением в нанокристаллах оксида галлия. Интенсивность и состав этих полос существенно зависят от условий ионно-лучевого синтеза.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10233,
<https://rscf.ru/project/21-79-10233/>.

Синтез наночастиц халькогенидов металлов методом фемтосекундной лазерной абляции и фрагментации в жидкости

Хорьков К. С., Кочуев Д.А., Черников А.С., Чкалов Р.В., Абрамов Д.В.
ВлГУ

e-mail: khorkov@vlsu.ru

В настоящее время активно развивается направление синтеза различных наночастиц на основе соединений металлов для биомедицинских приложений [1]. Одним из примеров таких групп наночастиц, которые могут быть успешно использованы в биомедицине, являются наночастицы на основе халькогенидов металлов. Такие наночастицы применяются в биовизуализации, биозондировании, доставке лекарств, фототермической терапии [2]. Особенности фемтосекундной лазерной абляции и фрагментации в жидкой среде заключаются в возможности синтеза многокомпонентных наночастиц, включающих как исходный материал, так новые соединения, образующиеся в процессе воздействия и зависящие от среды [3].

В экспериментах по лазерной абляции использовались объемные образцы MoS₂, WS₂ и ZnS. В качестве среды использовалась дистиллированная вода. Эксперименты проводились на Yb:KGW фемтосекундной лазерной системе (Avesta Ltd.), генерирующей на длине волны 1030 нм импульсы длительностью 280 фс с частотой повторения 10 кГц и максимальной энергией в импульсе 150 мкДж. В процессе лазерной абляции осуществлялось сканирование лазерным пучком по поверхности мишени в объеме жидкости, при лазерной фрагментации для равномерного воздействия на частицы производилось перемешивание раствора с помощью магнитной мешалки.

Варьируя параметрами воздействия возможно осуществить контролируемое изменение размеров наночастиц и их состава. Полученные наночастицы имеют сферическую форму и размеры от 50 до 150 нм. В результате исследований синтезируемых наночастиц получены спектры комбинационного рассеяния света, гистограммы распределения частиц по размерам, оптические спектры поглощения коллоидных растворов, дифрактограммы синтезированных частиц, а также изображения с электронного микроскопа.

В процессе лазерной фрагментации халькогенидов металлов наблюдается выделение сероводорода. Образование сероводорода свидетельствует о диссоциации воды и обрабатываемых халькогенидов. Условия воздействия при лазерной фрагментации способствуют образованию новых химических связей, наблюдается частичное замещение серы на кислород.

При обработке результатов экспериментов выявлено, что дефекты существенно влияют на физические свойства и химическую активность наноструктурированных материалов, в том числе на кристаллическую структуру в целом, изменяя ее. Присутствие значительного количества различных дефектов значительно изменяет ориентацию атомов в структуре кристаллической решетки, приводя к нарушению последовательности укладки, а также ее повторяемости.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10348 и государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема FZUN-2020-0013

Список литературы

1. Chernikov A. S. et al., Tunable optical properties of transition metal dichalcogenide nanoparticles synthesized by femtosecond laser ablation and fragmentation, *J. Mater. Chem. C*, 11, 3493-3503, 2023
2. Ensoylu, M., Atmaca, H. and Deliormanlı, A. M., Fabrication and in vitro characterization of macroporous WS₂/bioactive glass scaffolds for biomedical applications, *J. Aust. Ceram. Soc.*, 58(2), 397–409, 2022
3. Chernikov A. S. et al., Ga₂O₃ and GaN nanoparticles synthesis by femtosecond laser ablation in ammonia environment, 2022 International Conference Laser Optics (ICLO), IEEE, 2022

Выращивание кристаллов Ga₂O₃ раствор-расплавным методом

Носов Ю. Г.¹, Кицай А.А., Чикиряка А.В., Николаев В.И.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *Yu.Nosov@mail.ioffe.ru*

В настоящее время оксид галлия – ультра широкозонный полупроводник интенсивно исследуется для применения в приборах высоковольтной и силовой электроники, в химических датчиках, катализаторах и солнечно-слепых фотоприемниках. Объемные кристаллы β-Ga₂O₃ больших размеров успешно получают из собственного расплава. Однако стоимость их остается крайне высокой из-за технологических проблем самого роста кристаллов при T~1800°C и дорогой оснастки, что обусловлено диссоциацией оксида галлия при высоких температурах. Не прекращаются попытки получения этого материала более экономичным способом. В данной работе исследован процесс кристаллизации оксида галлия раствор-расплавным методом при температурах ниже 1100°C, где оксид галлия при атмосферном давлении химически устойчив.

В раствор – расплавном методе для получения Ga₂O₃, могут применяться различные растворители: PbO-B₂O₃ - Li₂CO₃, PbF₂, MoO₃, и др. В нашей работе в качестве растворителя использовался оксид молибдена, температура плавления которого 802°C и температура кипения 1155°C. Исходная загрузка была смесью порошков MoO₃ и Ga₂O₃ с 6 масс.% Ga₂O₃. Плавление осуществлялось в платиновом тигле. Опыты проводились на испарение, и их температурный режим включал: нагрев со скоростью 500 град/час до температуры 1050°C, выдержку при этой температуре 12 часов и охлаждение расплава при выключенном нагревателе. При температуре 1050°C оксид галлия в виде твердой кристаллической фазы находится в равновесии с расплавом оксида молибдена. Твердый слиток, находившийся в тигле после опыта, составлял по массе примерно 30% исходной загрузки. Оксид молибдена удалялся из слитка раствором аммиака в воде. Окончательно в тигле оставалось 1,5-2 г мелких кристаллов. Габитус этих кристаллов изучался при помощи оптического микроскопа Carl Zeiss Jena Amplival и сканирующего электронного микроскопа Phenom PROX. Полученные кристаллы имели вид тонких пластинок размерами до 1,5мм. По форме кристаллы могли быть разделены на две группы: 1- вытянутые монокристаллические пластинки, содержащие прямые углы и 2- кристаллы - двойники. Элементный анализ на микроскопе Phenom PROX показал, что выращенные кристаллы близки к стехиометрии Ga₂O₃ и не имеют каких-либо иных включений.

Насколько мы знаем это первая успешная попытка получить кристаллы оксида галлия по указанной технологии. В работе предполагается подробная характеристика выращенных кристаллов, изучение их морфологии и дефектной структуры.

Влияние способов обработки ВАХ на значение эффективных параметров полевых катодов

Филиппов С. В.¹, Колосько А.Г.¹, Смолькин К.В.², Гришин В.В.², Чуркин С.В.¹, Попов Е.О.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

²СПбГУТ

e-mail: *s.filippov@mail.ioffe.ru*

Сравнение эмиссионных характеристик разнородных полевых катодов является ключевым элементом процесса оптимизации технологии их изготовления, включая подбор материалов и вариацию методов их обработки. Характеризация катодов обычно осуществляется путём регистрации их вольт-амперных характеристик (ВАХ) и получения из этих ВАХ ряда эффективных параметров, которые позволяют сравнить катоды друг с другом. Особенно важна регистрация таких параметров для многоострийных полевых катодов, в том числе наноструктурированных, которые состоят из большого количества наноразмерных эмиссионных центров. Эффективные параметры являются, в сущности, средней оценкой микроскопических эмиссионных параметров катода: коэффициента усиления поля ($\Upsilon_{эфф}$), площади эмиссии ($A_{эфф}$) и работы выхода электронов с поверхности ($\varphi_{эфф}$) [1].

Определение эффективных параметров осложнено рядом эффектов, которые приводят к неоднозначности их численных значений.

Первым является нестабильность эмиссионных свойств во времени. Даже при условии стабильности общего уровня тока в регистрируемом сигнале наблюдаются шумы, связанные в основном с адсорбционными процессами на поверхности катода в вакуумной камере [2].

Вторым эффектом является отклонение формы ВАХ от теоретической зависимости. Оно может быть связано как с адсорбционными процессами, так и с тем, что катод состоит из множества эмиссионных центров разных форм.

Третьим эффектом является зависимость результата анализа экспериментальной ВАХ от выбранных координат, в которых производится аппроксимация. Такими координатами могут быть: классические координаты (I vs U), полулогарифмические координаты Миликена-Лоритсена ($\ln I$ vs $1/U$) или же полулогарифмические координаты Фаулера-Нордгейма ($\ln I/U^2$ vs $1/U$). К новым возможностям аппроксимации ВАХ необходимо отнести модифицированные координаты – т.н. координаты Мерфи-Гуда, а также КР-координаты, учитывающие зависимость площади эмиссии от приложенного напряжения, связанную с трёхмерной формой эмиттера [3]. Возможности аппроксимации ВАХ в стандартных координатах $I(U)$ расширяются применением ряда теоретических приближений: Елинсона-Шредника (ES), Форбса-Дина (FD), а также Мерфи-Гуда (HP) [4]. К последним также можно причислить формулу, учитывающую функциональную зависимость от напряжения площади эмиссии (КР).

Настоящая работа направлена на сравнение оценок эффективных параметров, полученных различными способами и выделение наиболее адекватного метода анализа ВАХ. Сравнение проводится на примере экспериментальных данных, полученных для многоострийного полевого катода из углеродных нанотрубок в полимерной матрице. Представленные подходы включают в себя разные варианты усреднения данных с целью минимизации влияния шумов, разные варианты выбора участка ВАХ для анализа в полулогарифмических координатах, разные

варианты координат, в которых строится аппроксимация ВАХ, и разные варианты функциональных зависимостей, некоторые из которых позволяют, кроме коэффициента усиления и площади эмиссии, оценить также эффективную работу выхода.

Список литературы

1. Allaham M. M., Forbes R. G., Knápek A., Sobola D., Burda D., Sedlak P., Mousa M.S. "Interpretation of field emission current–voltage data: Background theory and detailed simulation testing of a user-friendly webtool", *Materials Today Communications*, 31, 103654-1-16, 2022.
2. Giubileo F., Di Bartolomeo A., et al. Local probing of the field emission stability of vertically aligned multi-walled carbon nanotubes, *Carbon*, 47(4), 1074 – 1080, 2009.
3. Popov E.O., Filippov S.V., Kolosko A.G. Processing of experimental current-voltage characteristics of single tip emitters taking into account the functional dependence of the emission area on the applied voltage, *JVST B*, 41(1), 012801-1–7, 2023.
4. Forbes R.G., Popov E.O., Kolosko A.G., Filippov S.V. The pre-exponential voltage-exponent as a sensitive test parameter for field emission theories. *Royal Society Open Science*, 8(3), 201986-1 – 19, 2021.

Влияние рельефа поверхности SiC на однородность толщины выращиваемого графена

Приображенский С. Ю.¹, Лебедев С. П.¹, Гущина Е. В.¹, Елисеев И. А.¹, Лебедев А. А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *sereyozha@yandex.ru*

Для успешного развития графеновой электроники и перехода к промышленному производству требуется разработка технологии получения однородного материала большой площади с высоким структурным совершенством и заданными электрофизическими характеристиками. Одним из наиболее перспективных методов формирования пленок графена является метод сублимационного роста на карбиде кремния (SiC) [1, 2]. Размеры современных коммерческих подложек SiC, а также объемы промышленного производства данного материала позволяют наладить серийное производство графеновых приборов и структур в случае успешной разработки контролируемой технологии получения однородного графена методом сублимации поверхности SiC.

Одной из ключевых проблем в существующей технологии получения структур графен/SiC является однородность характеристик графеновой пленки по поверхности подложки SiC. В первую очередь это касается толщины графеновой пленки. Как известно, в процессе нагрева подложки SiC до температуры роста графена на ее поверхности формируется террасно-ступенчатый нанорельеф, который впоследствии покрывается пленкой графена [3,4]. Данный рельеф оказывает непосредственное влияние на процесс диссоциации структуры SiC в поверхностной области и на образование структуры графена. Другим важным фактором, вносящим вклад в процесс формирования пленки, является состояние окружающей газовой среды над поверхностью подложки. Контроль данных факторов и подбор оптимальных условий роста позволяет сформировать однородное монослойное графеновое покрытие подложки SiC.

Для роста графена использовались высококомные подложки 4H-SiC с рабочей Si-гранью, углом разориентации поверхности $\sim 0.25^\circ$ и обработкой поверхности методом химико-механической полировки. Рост выполнялся в среде аргона при давлении 730 ± 10 Торр. Температура роста графена составляла 1720 ± 10 °C, продолжительность роста – от 2 до 5 минут, а скорость нагрева образца от 1 до 5 °C/с.

В результате проведения ростовых процессов в различных технологических условиях было обнаружено несколько механизмов формирования графена на поверхности SiC. Характеризация образцов методами атомно-силовой (АСМ), Кельвин-зондовой микроскопии (КЗМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) продемонстрировала взаимосвязь геометрических параметров террасно-ступенчатого нанорельефа и формы двухслойных графеновых включений в монослойной графеновой пленке. Кроме того, было обнаружено влияние обогащенной газообразными компонентами SiC газовой среды над подложкой на скорость термодеструкции поверхности SiC и образования графеновой пленки. Анализ полученных данных позволяет сделать вывод, что для формирования однородного монослойного графенового покрытия необходимо формирование рельефа поверхности с минимальной величиной высоты террас (менее 1 нм). Также необходима проектировка ростовой ячейки, позволяющей осуществлять вентиляцию ростовой зоны с целью удаления избыточных газообразных компонентов SiC от поверхности подложки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №22-12-00134.

Список литературы

1. de Heer W. A., Berger C., Ruan M., Sprinkle M., Li X., Hu Y., Zhang B., Hankinson J., and Conrad E. Large area and structured epitaxial graphene produced by confinement controlled sublimation of silicon carbide // *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108(41) 16900 (2011).
2. Lebedev A. A., Davydov V. Yu, Usachov D. Yu., Lebedev S. P., Smirnov A. N., Eliseyev I. A., Dunaevskiy M. S., Gushchina E. V., Bokai K. A., Pezold J. High Quality Graphene Grown by Sublimation on 4H-SiC (0001) // *Semiconductors* 52(14), 1882 (2018).
3. Bolen M. L., Harrison S. E., Biedermann L. B. and Capano M. A. Graphene formation mechanisms on 4H-SiC(0001) // *Physical Review B* 80 (11), 115433 (2009).
4. Ming F. and Zangwill A. Model for the epitaxial growth of graphene on 6H-SiC(0001) // *Physical Review B* 84 (11), 115459 (2011).

Влияние пористости на степень окисления мультислоев пористого кремния

Пешков Я. А.¹, Леньшин А.С., Барков К.А., Минаков Д.А., Черноусова О.В.

¹ВГУ

e-mail: tangar77@mail.ru

Пористый кремний представляет собой сложный многофазовый материал, морфология и функциональные свойства которого сильно зависят от его пористости [1]. Главным преимуществом пористого кремния перед кристаллическим объемным кремнием является его фотолюминесценция (ФЛ) в видимом диапазоне. Основным механизмом ФЛ считается квантово-размерный эффект, который обычно проявляется в виде яркой люминесценции с пиком в области 600-700 nm. Кроме того, возможно проявление слабоинтенсивной ФЛ области 500-600 nm, обусловленных центрами излучательной рекомбинации, которые образуются в дефектном оксиде, покрывающем поверхность пористого кремния. Поэтому изучение зависимости фазового и электронного строения поверхности пористого кремния от его пористости является актуальной задачей.

В данной работе мы провели исследование распределения электронных состояний в валентной зоне кремния образцов пористого кремния с различными показателями пористости. Образцы были получены электрохимическим травлением (ЭХТ) пластин монокристаллического кремния. Варьирование пористости образцов производилось изменением величины плотности тока электрохимического анодирования в процессе ЭХТ и выбором исходной пластины монокристаллического кремния. Для измерения значений пористости была проведена рентгеновская рефлектометрия образцов пористого кремния [2]. Ультратонкие рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ спектры образцов были получены на рентгеновском спектрометре-монокроматоре РСМ-500. Данная методика чувствительна к локальной парциальной плотности состояний атомов определенного сорта, благодаря чему возможна качественная оценка атомного строения пористого кремния, и полуколичественная оценка относительного содержания фаз в данном материале.

Положение критического угла на кривых рентгеновской рефлектометрии демонстрирует, что управление плотностью тока ЭХТ позволило получить образцы с пористостью в диапазоне от 5 до 80 %. Моделирование Si $L_{2,3}$ спектров показало, что в образцах с пористостью до 14 % кремний находится в кристаллическом состоянии. Однако при пористости более 32% на поверхности образуется нестехиометрический оксид кремния SiO_x . Дальнейшее увеличение пористости до 80% приводит к увеличению относительного содержания оксида кремния на поверхности до 62%. Более того, начинает преобладать диоксид кремния SiO_2 . Полученные результаты демонстрируют сильное влияние показателя пористости на фазовый состав и электронное строение поверхности пористого кремния.

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

Список литературы

1. L. Canham, *Handbook of Porous Silicon* (Springer, CH., 2014), p. 733.
2. A.S. Lenshin et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **1984** 012018 (2021).

Эпитаксиальные гетероструктуры активной области светодиодов ближнего ИК-диапазона

Салий Р. А.¹, Минтаиров С.А.¹, Надточий А.М.¹, Калужный Н.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *r.saliy@mail.ioffe.ru*

Светодиоды ближнего инфракрасного (ИК) диапазона широко применяются в таких областях, как в системы охраны и дистанционного управления в связке с инфракрасным приемником, для оптической беспроводной связи, для систем ночного видения и медицинского приборостроения. Совсем недавно их применение было распространено на оптические датчики в беспроводных устройствах, в компактных транспортных средствах, датчиках времени полета и воздушных дронах [1]. Эти новые приложения требуют небольших светодиодов, которые обеспечивают высокую выходную мощность при большой плотности тока.

Квантовые ямы (КЯ) широко применяются в качестве активной области светодиодов вследствие ряда преимуществ по сравнению с традиционными «двойными» гетероструктурами. Изменения толщины и состава КЯ дает высокую степень управления длиной волны излучения. За счет КЯ обеспечивается гибкость в выборе материалов и конструировании активной области. Кроме того, КЯ обеспечивает увеличение концентрации носителей и усиление электронно-дырочного перекрытия, что приводит к увеличению скорости излучательной рекомбинации и к значительному увеличению внутреннего квантового выхода [2].

Внутренний квантовый выход светодиода напрямую зависит от кристаллического качества активной области и поддержания высокой концентрации носителей в ней. В данной работе гетероструктуры для активной области ИК-светодиодов изготавливались с помощью эпитаксии из металлорганических соединений и гидридов. Для формирования активной области светодиодов излучающих на длинах волн ближнего ИК-диапазона $\lambda=850$ и 940 нм были выращены экспериментальные гетероструктуры с множественными КЯ InGaAs/AlGaAs. Активная область тестовой структуры включала от четырех до шести КЯ InGaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As, а толщина и состав InGaAs подбирались параметрически для соответствующей длины волны. Также исследованы реперные гетероструктуры с множественными GaAs/AlGaAs КЯ для $\lambda=850$ нм. Во всех экспериментальных гетероструктурах формировались барьерные слои Al_{0.4}Ga_{0.6}As, которые предотвращали выброс носителей за пределы активной области. Полученные экспериментальные структуры исследовались путем анализа спектров фотолюминесценции (ФЛ), которые записывались при двух плотностях оптического возбуждения YAG : Nd-лазером с длиной волны излучения 532 нм.

В работе были исследованы такие параметры гетероструктур с множественными КЯ, как концентрация In в составе КЯ, ее толщина, а также толщина промежуточного слоя (спейсера), разделяющего отдельные КЯ. В рамках данного исследования была найдена такая комбинация параметров множественных КЯ, при которых интенсивность фотолюминесценции в полтора раза превышает результат, полученный на гетероструктуре, активная область которой состоит из того же числа GaAs/AlGaAs КЯ. При этом, анализ спектров ФЛ показывает, что полученная гетероструктура обладает лучшим оптическим качеством, по сравнению с реперной.

Список литературы

1. H.-J. Lee, G.-H. Park, J.-S. So, C.-H. Lee, J.-H. Kim, L.-K. Kwac, Heat-resistant reflectors for enhanced 850-nm near infrared light-emitting diode efficiency, *Infrared Physics & Technology*, 118, 2021.
2. A.V. Malevskaya, N.A. Kalyuzhnyy, D.A. Malevskii, S.A. Mintairov, A.M. Nadtochiy, M.V. Nakhimovich, F.Y. Soldatenkov, M.Z. Shvarts, V.M. Andreev, Infrared (850 nm) light-emitting diodes with multiple InGaAs quantum wells and "back" reflector, *Semiconductors*, 55(8), pp. 686-690, 2021.

Управляемость диэлектрическими свойствами тонких сегнетоэлектрических пленок титаната свинца-стронция в параэлектрической фазе

Широков В. Б.^{1,2}, Михайкин А.С.²

¹ЮНЦ РАН

²ЮФУ

e-mail: *shirokov-vb@rambler.ru*

Создание и разработка дизайна материалов с управляемой диэлектрической проницаемостью для компонентной базы перестраиваемых устройств микро- и наноэлектроники, предназначенных для работы в миллиметровом и субмиллиметровом диапазоне волн является актуальной задачей современной науки и техники. Для поиска подходящих кандидатов предлагаются материалы в виде твердых растворов систем "квантовый параэлектрик - сегнетоэлектрик". В электродинамическом спектральном отклике сегнетоэлектриков в параэлектрическом состоянии существуют так называемые мягкие моды резонансной природы, определяющие их диэлектрические свойства. На их поведение влияют температура и внешнее электрическое поле, что позволяет настраивать диэлектрическую проницаемость и взаимодействие таких материалов с излучением. Концентрацией твердого раствора можно привести температурный диапазон наибольшей перестраиваемости диэлектрической проницаемости к комнатным температурам, а подбором различных представителей сегнетоэлектриков и квантовых параэлектриков добиться конкуренции нестабильностей различного типа для увеличения нелинейности свойств получаемых материалов.

В данной работе рассмотрена система твердых растворов титанатов свинца и стронция со структурой перовскита $Pb_xSr_{1-x}TiO_3$ (PST) в дизайне тонкой пленки. Для этого построен термодинамический потенциал Гиббса для тонких пленок на монокристаллической подложке с кубической кристаллической структурой при решении упругой задачи с граничными условиями так, как показано в работе [1]. Крайние члены ряда твердых растворов данной системы испытывают структурные фазовые переходы с различными параметрами порядка: для титаната свинца параметром порядка является поляризация, для титаната стронция – антифазное вращение кислородных октаэдров. Поэтому для построения термодинамического потенциала системы были использованы потенциалы шестой степени по поляризации и четвертой по вращению октаэдров, вид которых и численные значения коэффициентов для рассматриваемого твердого раствора можно найти в работе [2]. С помощью полученного результирующего потенциала была построена фазовая диаграмма «вынужденная деформация – концентрация» для температуры 300 К, на которой обнаруживается шесть фаз с различной структурой. Кроме высокосимметричной параэлектрической фазы с нулевыми значениями параметров порядка имеются четыре полярные фазы с различным направлением или величиной поляризации и одна неполярная с ненулевым значением параметра порядка по вращению кислородных октаэдров.

С точки зрения перестраиваемости наибольший интерес представляет управляемость свойств параэлектрической фазы вблизи фазовых границ с полярными фазами, так как в ней отсутствует спонтанная поляризация, не образуются сегнетоэлектрические домены, что означает наименьшие диэлектрические потери в таких материалах, при этом наблюдаются наибольшие изменения материальных констант [3]. Расчёт значений вынужденной поляризации и диэлектрической проницаемости для параэлектрической фазы системы твердых растворов PST

вблизи фазовых границ на диаграмме «вынужденная деформация – концентрация» под действием внешнего поля с вектором напряженности вдоль нормали к поверхности подложки показал, что их наибольшие значения достигаются вдоль фазовой границы с полярной фазой, где имеется «мягкое» направление поляризации вдоль нормали к поверхности. При этом диэлектрическая проницаемость вдоль этой границы на фазовой диаграмме в параэлектрической фазе может меняться на порядок при приложении поля с напряженностью 10^7 В/м. Такие существенные изменения свойств под действием электрического поля могут найти практическое применение при создании компонент перестраиваемых устройств. Полученные результаты позволяют определить условия концентрации компонентов твердого раствора системы и вынужденную деформацию, при которых достигается наибольшая управляемость значениями материальных констант данной системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-12-00314.

Список литературы

1. Pertsev N. A., Zembiglotov A. G., Tagantsev A. K., Effect of mechanical boundary conditions on phase diagrams of epitaxial ferroelectric thin films Phys. Rev. Lett., V. 80, p. 1988, 1998
2. Shirokov V.B., Razumnaya A.G., Mikheykin A.S. Thermodynamic theory of $Pb_xSr_{1-x}TiO_3$ solid solutions, Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol. 161, 110395-110402, 2022
3. Shirokov V. B., Yuzyuk Yu. I., Kalinchuk V. V., Lemanov V. V., Material Constants of $(Ba,Sr)TiO_3$ Solid Solutions, Physics of the Solid State, Vol. 55, pp. 773–779, 2013

Формирование острия апертурных кантилеверов для сканирующей ближнепольной оптической микроскопии методом локального ионно-стимулированного осаждения

Коломийцев А. С.¹, Котосонова А.В.¹

¹Южный федеральный университет

e-mail: askolomiytsev@sfedu.ru

В настоящее время для создания элементов и структур микро- и наномеханики применяются методы и подходы традиционной микроэлектроники, которые позволяют добиться высокой экономической эффективности при массовом производстве. Однако существенным недостатком такого подхода является ограниченность номенклатуры параметров структур, которые могут быть сформированы. Перспективным подходом для решения данной проблемы является интеграция микроэлектронных технологий и методов локального формирования микро- и наноразмерных структур. Одним из таких методов является метод локального ионно-стимулированного осаждения материалов из газовой фазы [1]. Метод позволяет формировать наноразмерные структуры путём разложения газа-носителя осаждаемого материала пучком ионов, ускоренных до энергии 30 кэВ.

В данной работе показано применение метода ионно-стимулированного осаждения углерода пучком ионов Ga⁺ для формирования острия апертурных кантилеверов для сканирующей ближнепольной оптической микроскопии (СБОМ) [2]. Апертурные кантилеверы представляют собой микромеханическую консоль, на конце которой расположено полое острие, через которое может пропускаться оптический сигнал, при этом диаметр выходного отверстия для излучения составляет 100-200 нм.

Предложенная в работе технология формирования острия зондов является аналогом трёхмерной печати в наномасштабе, когда структура создаётся слой за слоем путём растрового перемещения фокусированного ионного пучка (ФИП) по заданной траектории. Взаимодействуя с локально подаваемым в вакуумную камеру газом-носителем осаждаемого материала, наноразмерный ионный пучок приводит к локальному разложению газа, в результате чего твёрдый компонент (в нашем случае углерод с примесью галлия и остатков органических соединений) осаждается на поверхность подложки. В настоящей работе формировались апертурные кантилеверы для СБОМ с острием в форме полого конуса, диаметром входной апертуры 10 мкм, углом острия зонда 30°, 70° и 100° и диаметром выходного отверстия от 80 до 150 нм. В качестве основы для изготовления СБОМ зондов использовались стандартные безострийные кремниевые кантилеверы типа FMG 01. На начальном этапе работы методом ФИП при значении тока пучка 7 нА формировалось входное отверстие диаметром 10 мкм в балке безострийного кантилевера. После этого, при подаче в зону воздействия ФИП газа C₁₀H₈, производилось сканирование ионным пучком при значении тока 0,3 нА, при этом траектория сканирования, задаваемая в управляющем программном обеспечении, представляла собой движение по спирали, окружность за окружностью. В результате на конце консоли кантилевера было сформировано полое коническое острие, в основании которого расположено отверстие входной апертуры. Выходная апертура также формировалась методом локального травления ФИП при токе от 1 до 10 пА.

Таким образом, был сформирован набор из 9 апертурных СБОМ-зондов с различными углами острия и диаметрами выходной апертуры. Тестирование зондов производилось в двух режимах:

сначала путём сканирования тестовой калибровочной решетки TGZ03 в режиме полуконтактной АСМ, а затем в режиме пропускания излучения лазера и измерения мощности проходящего излучения. Результаты тестирования показали, что в режиме АСМ каждый из зондов даёт приемлемое для дальнейшего анализа изображение, которое по качеству лишь незначительно уступает стандартным коммерческим кантилеверам. Было установлено, что с увеличением угла зонда качество изображения ухудшается. Тестирование кантилеверов на пропускание оптического излучения показало пропускание на каждом из лазеров только для зондов с углом 100° , в остальных же случаях периодически наблюдалось отсутствие пропускания или паразитная засветка от острия или балки кантилевера, которая может быть устранена нанесением дополнительного тонкого металлического покрытия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-29-01239 в Южном федеральном университете.

Список литературы

1. Kolomiytsev A.S., Gromov A.L., Il'in O.I. et al. Controlling the parameters of focused ion beam for ultra-precise fabrication of nanostructures// Ultramicroscopy Volume 234, April 2022, 113481.
2. Kolomiytsev A.S. et al. Fabrication of probes for scanning near-field optical microscopy using focused ion beam // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. Institute of Physics Publishing, 2018. Vol. 443, N 1. P. 012015.

Температурно-частотные зависимости проводимости и импеданса разупорядоченного углерода шунгитов

Голубев Е. А.¹, Антонец И.В.², Королев Р.И.²,
¹ИГ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, ²СыктГУ, Сыктывкар

e-mail: yevgenyGolubev74@mail.ru

Углеродные материалы со строением, подобным стеклоуглероду, в которых присутствуют разнообразные наноразмерные структурные элементы (например, фуллерены, графен), успешно применяются в разных технологических процессах [1]. Из физико-химических свойств разупорядоченного графитоподобного углерода особое внимание уделяется электрофизическим свойствам, управление которыми за счет модификации структуры, термического или физико-химического воздействия позволяет успешно использовать их при создании экранирующих микроволновое излучение материалов, аккумуляторных батарей [2]. Наибольшее внимание сейчас уделяется синтетическому углероду, хотя в природе его аналог – разупорядоченный графитоподобный углерод – находится в больших количествах и легко извлекаем. Эталонным материалом природного происхождения на сегодня является углерод шунгитовых пород из Карелии. Шунгитовые породы это природный углерод-минеральный композит с содержанием углерода от 2 до 97 ат %. [3-8]. Помимо углерода шунгитов, многочисленные проявления имеются по всему миру, что делает актуальным изучение свойств таких веществ на примере разных образцов, учитывая вариабельность условий формирования в природной лаборатории. Электрофизические свойства помогают понять структуру природного разупорядоченного углерода, так и к предложению новых технологических применений, при этом, имеющаяся информация по влиянию высоких и низких температур на проводящие свойства противоречива [2], а по частотным зависимостям этих свойств очень мало результатов. В данной работе мы определяем температурные (в диапазоне от –150 до 150 °С) зависимости импеданса и удельной проводимости их и температурно-частотные зависимости в диапазоне частот 50 кГц — 15 МГц для природного разупорядоченного графитоподобного углерода на примере шунгитов.

Образцы были изготовлены из кусков шунгитовой породы в форме прямоугольного параллелепипеда путем выпиливания пластинки с размерами 6.0 × 6.0 × 1.5 мм и дальнейшей полировки граней. Противоположные грани пластин покрывались тонким слоем золота методом магнетронного распыления в вакууме с применением рабочего газа аргона. Исследование импеданса в диапазоне частот 50 кГц – 15 МГц осуществлялось на измерителе иммитанса E7-29 по четырехпроводной схеме. Постепенное регулирование и управление температурой образцов производилось в термостате в атмосфере азота. Измерение температуры осуществлялось с помощью тонкопленочного платинового термосопротивления и универсального вольтметра В7-23. Образец нагревался за счет увеличения температуры атмосферы азота электрическим нагревателем через испаритель с ПИД регулированием. Охлаждение образца осуществлялась подачей в термостат жидкого азота.

В работе приводятся результаты экспериментальных исследований температурно-частотных зависимостей импеданса и удельной проводимости высокоуглеродистых шунгитов (с содержанием углерода 93-97 %) в диапазоне частот от 50 кГц до 15 МГц при изменении температуры образцов от –150 °С до 150 °С. По результатам измерений подтвержден незначительный (менее чем в два раза) рост проводимости образцов шунгитов с увеличением температуры, показано, что основной рост проводимости происходит при отрицательных температурах. При этом, не было обнаружено скачков проводимости, о которых указывалось в

работе [9]. Показано последовательное уменьшение проводимости с ростом частоты практически у всех образцов. Выявленные температурно-частотные свойства сопоставлены с различными структурными моделями строения разупорядоченного графитоподобного углерода.

Исследование поддержано грантом РФФ 21-47-00019

Список литературы

1. L.S. Vieira, Carbon **186**, 282–302, (2022),
2. Ye.A. Golubev, I.V. Antonets, Nanomaterials. **12(21)**, 3797, (2022).
3. Ye. A. Golubev, N. N. Rozhkova, Ye. N. Kabachkov, Yu. M. Shulga, K. Natkaniec-Holderna, I. Natkaniec, I. V. Antonets, B. A. Makeev, N. A. Popova, V. A. Popova and E. F. Sheka, J. Non-Cryst. Solids **524** (2019).
4. V. V. Kovalevski, P. R. Buseck and J. M. Cowley, Carbon **39**, 243–256 (2001)
5. L. M. Lyn'kov, T. V. Borbot'ko and E. A. Krishtopova, Tech. Phys. Lett. **35**, 410–411 (2009).
6. I. A. Moshnikov and V. V. Kovalevski, Nanosyst. Phys. Chem. Math. **1**, 214–219 (2016).
7. M. A. Augustyniak-Jabłokow, Y. V. Yablokov, B. Andrzejewski, W. Kempin'ski, S. Łos', K. Tadyszak, M. Y. Yablokov and V. A. Zhikharev, Phys. Chem. Miner. **37**, 237–247 (2010)
8. Ye. A. Golubev, I. V. Antonets and V. I. Shcheglov, Mater. Chem. Phys. **226**, 195–203 (2019)
9. L.S. Parfen'eva, I.A. Smirnova, A.Z. Zaidenberg, N.N. Rozhkova, G.B. Stefanovich, Phys. Solid State, **36**, 129, (1994).

Структура и оптические свойства тонкопленочного оксида вольфрама, синтезированного в условиях дефицита кислорода

Маликов И.^{1,2}, Чугунов В.³, Ермаков М.³, Мещеряков В.³, Лядов Н.², Нуртдинова Л.¹, Салахов М.¹, Тагиров Л.²

¹Казанский федеральный университет, Казань, Россия

²Казанский физико-технический институт ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

³Comberry AR&D, Улланотех, Ульяновск, Россия

e-mail: ltagirov@mail.ru

Электрохромизм – это явление, при котором цвет или прозрачность материала изменяются при приложении напряжения. Оксид вольфрама WO_3 – известный катодный электрохромный материал, оптическая плотность которого изменяется при интеркалировании ионами щелочных и щелочноземельных элементов, входящими в состав электролита электрохромной ячейки [1]. Широкому применению технологии тонкопленочных электрохромных покрытий и устройств на их основе препятствует необходимость выполнения ряда условий, таких как широкий динамический диапазон, порядка 10-90% между просветленным и затемненным состояниями, высокая скорость переключения, сохранение этих свойств для большого числа переключения в течение длительного времени при работе в широком диапазоне температур [1,2].

Предварительные исследования показали, что скорость переключения электрохромной ячейки и ее динамический диапазон возрастают, если оксид вольфрама недоокислен. В настоящей работе проведено систематическое исследование влияния парциального давления кислорода при синтезе тонких пленок оксида вольфрама на их морфологию, структуру, элементный состав и валентное состояние вольфрама, а также оптические свойства полученных пленок в диапазоне длин волн 0.25-2.5 мкм [3,4].

Тонкие пленки оксида вольфрама на подложке из натриевого стекла (предметное стекло для микроскопии) были синтезированы методом реактивного магнетронного распыления в атмосфере реактивного плазмообразующего газа высокой чистоты, состоящего из аргона (плазмообразующий газ, расход 50 см³/мин, см. табл. 1) и кислорода (реактивный газ, расход 4,5,6,8,10 см³/мин) при подаваемой на магнетрон мощности 150 Вт и постоянном давлении в камере 30 мТорр. Толщина полученных пленок уменьшалась от 700 до 455 мкм при росте подаваемого потока кислорода. Оптическая плотность (интегральная в видимом диапазоне) менялась от непрозрачной для минимального потока кислорода (4 см³/мин) до прозрачной для максимального потока кислорода (10 см³/мин) через оттенки серого в промежутке. После эвакуации образцов из вакуумной камеры их разрезали на несколько частей для дальнейших исследований.

Морфология полученных пленок исследовалась с помощью сканирующего электронного микроскопа Carl Zeiss Merlin и показала мезопористую структуру поверхности синтезированных образцов. Элементный анализ проводился с использованием приставки энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС \equiv EDX) Oxford Inca Energy 350 на сканирующем электронном микроскопе Carl Zeiss EVO50 XVP и дал изменение стехиометрии оксида в ряду из 5 синтезированных образцов. Рентгеноструктурный анализ (РСА \equiv XRD) был выполнен на дифрактометре BRUKER D8 Advance с $Cu K_{\alpha}$ -излучением ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) в геометрии Брэгга-Брентано; скорость сканирования 0.18°/мин; диапазон углов 2θ от 3° до 100° и показал

аморфную+нанокристаллическую структуру полученных пленок оксида вольфрама. Валентный анализ выполнялся методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС \equiv XPS, SPECS) с разложением спектра ионов вольфрама на валентные составляющие и анализом тонкой структуры спектров кислорода для выявления доли стехиометрического и нестехиометрического кислорода в полученном материале как следствии изменения парциального давления кислорода при синтезе. Установлена корреляция набора валентных состояний вольфрама в пленке и соотношения стехиометрического и нестехиометрического кислорода со скоростью переключения и стабильностью операционных свойств полученного электрохромного материала.

Работа И.М., Н.Л. и Л.Т. была поддержана грантом РФФ , проект № 22-22-00980.

Список литературы

1. Granqvist C.G. Handbook of Inorganic Electrochromic Materials, Amsterdam: Elsevier, 2002 г., 650 с.
2. Zeb S. Sun G., Nie Y., Xu H., Cui Y., Jiang X., Advanced developments in nonstoichiometric tungsten oxides for electrochromic applications, Materials Advances, том 2, 6839-6884, 2021 г.
3. I.F. Malikov, N.M. Lyadov, M.Kh. Salakhov and L.R. Tagirov, Reactive magnetron synthesis and investigation of morphology, valence composition, and optical properties of tungsten oxynitride thin films, Micro (MDPI), submitted 2022 г.
4. И.Ф. Маликов, Н.М. Лядов, М.Х. Салахов, Л.Р. Тагиров, Реактивный магнетронный синтез и исследование структуры и оптических свойств тонкопленочного оксида вольфрама, легированного молибденом, Журнал Технической Физики, 2023 г.

Магнитные свойства и микромагнитное моделирование процессов перемагничивания тонкой эпитаксиальной плёнки $L1_0$ -фазы FePd и искусственного антиферромагнетика FePd /W/ FePd

Пасынков М. В.¹, Юсупов Р.В.¹, Гумаров А.И.¹, Янилкин И.В.¹, Тагиров Л.Р.¹

¹Казанский федеральный университет

e-mail: *mike_p95@mail.ru*

Интерметаллические соединения на основе платины и палладия со структурой $L1_0$ представляют собой ферромагнитные (ФМ) материалы, предпочтительные для энергонезависимой магнитной памяти сверхвысокой плотности. Тонкие пленки FePt и CoPt с высокой перпендикулярной магнитной анизотропией (ПМА) используются в жестких дисках нового поколения с технологиями тепловой (HAMR) и магнитной записи с использованием микроволн (MAMR). Дальнейшие улучшения в плотности хранения, скорости записи и считывания данных ожидаются от полностью оптической обработки данных, которая была продемонстрирована на ферромагнитных сплавах GdFeCo [1]. Дополнением к подходу на основе сплавов является разработка искусственных ферромагнитных структур, подходящих для полностью оптического переключения намагниченности. В работе мы рассматриваем ферромагнитную тонкопленочную трехслойную структуру с ПМА, состоящую из двух ФМ слоев, разделенных немагнитным слоем, в качестве кандидата на такой материал, и анализируем ее перемагничивание с использованием микромагнитного моделирования. Регулируя толщину промежуточного слоя в трехслойных системах F/N/F (F – ферромагнетик, N – нормальный металл), можно получить структуры как с ферромагнитной, так и с антиферромагнитной связью. В работе представлены результаты моделирования кривых перемагничивания и доменных структур в тонких пленках сплава $L1_0$ -PdFe и искусственного антиферромагнетика на его основе.

Методом молекулярно-лучевой эпитаксии в сверхвысоковакуумной установке выращены однослойные эпитаксиальные пленки $L1_0$ -PdFe и трехслойные гетероструктуры PdFe/W/PdFe с ПМА. Квазистатическая кривая перемагничивания однослойной пленки имеет условную прямоугольную форму. Кривая намагничивания искусственного антиферромагнетика кардинально отличается и имеет форму бабочки. Для пленок миллиметрового масштаба процесс намагничивания определяется динамикой магнитных доменов. Поэтому экспериментальные данные были смоделированы в рамках микромагнитного макроскопического подхода.

Расчеты проводились с использованием программы микромагнитного моделирования Mumax 3 [2]. Для тонкой пленки сплава PdFe ПМА размером 256×256 нм² и толщиной 7 нм использовались следующие параметры: обменная жесткость $A = 5 \times 10^{-13}$ Дж/м, константа одноосной анизотропии $K_u = 8 \times 10^5$ Дж/м³, намагниченность насыщения $M_s = 8 \cdot 10^5$ А/м. Шаг сетки как в плоскости пленки, так и по толщине составлял 0,5 нм; большие значения шага приводят к другому результату. Кривая намагничивания, полученная моделированием, качественно воспроизводит форму петли гистерезиса при комнатной температуре. Различие в величине коэрцитивной силы, на наш взгляд, связано с модельным приближением $T = 0$ К.

На полученной равновесной доменной структуре при нулевом магнитном поле хорошо различимы тёмные и светлые области, которые соответствуют намагниченным вверх и вниз доменам. Детальный осмотр доменной структуры выявляет области серого цвета на границах доменов, которые, вероятно, являются визуализацией доменных стенок. Масштаб и характер моделируемой доменной структуры хорошо согласуются с результатами магнитно-силовой микроскопии [3] тонких пленок сплава $L1_0$ -PdFe. В частности, характерная ширина доменов составляет 50–70 нм.

Список литературы

1. T. A. Ostler et al. *Nature Commun.* **3**, 1–6 (2012).
2. A. Vansteenkiste et al., *AIP Adv.* **4**, 107133 (2014).
3. V. Gehanno et al. *Phys. Rev. B* **55**, 12552-12555 (1997).

Влияние механических деформаций растяжения/сжатия на электронное строение и электрофизические характеристики ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO

Слепченков М. М.¹, Колосов Д.А.¹, Глухова О.Е.¹

¹СГУ им. Н. Г. Чернышевского

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Укладка 2D материалов атомарной толщины с различными физическими свойствами в виде вертикальной слоистой гетероструктуры, в которой слои связаны силами Ван-дер-Ваальса, открывает широкие возможности для получения новых материалов с уникальными свойствами [1]. Большие надежды на получение новых многообещающих результатов в области дизайна ван-дер-ваальсовых гетероструктур с заданными свойствами связывают с борофеном – новым 2D материалом, целиком состоящим из атомов бора и уже синтезируемым на практике [2]. Атомная структура борофена состоит из треугольных и гексагональных элементов. Наличие у борофена различных аллотропных форм, отличающихся конфигурациями связей между атомами бора, существенно снижают требования к согласованию кристаллической решетки 2D кристаллов в составе вертикальной гетероструктуры. В рамках данной работы внимание обращено на новые атомные конфигурации борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур – борофен/2D GaN и борофен/2D ZnO. В состав этих конфигураций входит искривленный борофен с треугольной кристаллической решеткой, обладающий наиболее высокой энергетической стабильностью среди других аллотропных форм [3]. Цель работы – рассмотреть различные способы управления электронным строением гетероструктур борофен/2D GaN и борофен/2D ZnO и определить среди них наиболее эффективные для управления типом проводимости гетероструктур. Исследование проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном пакете Siesta 4.1.5 [4].

Были построены термодинамически устойчивые суперъчейки ван-дер-ваальсовых 2D гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO. Вектора трансляции суперъчейки гетероструктуры борофен/GaN составили $L_x=3.35 \text{ \AA}$ и $L_y=6.10 \text{ \AA}$, для гетероструктуры борофен/ZnO – $L_x=3.28 \text{ \AA}$ и $L_y=5.83 \text{ \AA}$. Расстояния между слоями борофена и GaN по оси Z составило 2.91 \AA , между слоями борофена и ZnO составило 2.51 \AA . Проводилось изучение влияния механических деформаций на электронное строение и электрофизические характеристики гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO с целью выявления способов управления электронными свойствами данных гетероструктур. В качестве механических деформаций были рассмотрены деформации одноосного (вдоль оси Y) и двухосного (вдоль осей X и Y) растяжения, одноосного (вдоль оси Y) и двухосного (вдоль осей X и Y) сжатия. Были рассмотрены случаи деформации одноосного сжатия и растяжения на 1-14%, деформации двухосного сжатия и растяжения на 1-10%. Выбранные интервалы деформации обусловлены вычислительной сложностью проводимых квантовых расчетов и предельно допустимыми значениями длин связей ковалентных связей между атомами в составе монослоев исследуемых гетероструктур. Показано, в электронной структуре гетероструктуры борофен/ZnO появляется энергетическая щель величиной $0,063 \text{ эВ}$ что при одноосном растяжении на 10%. При одноосном сжатии на 14 % в зонной структуре гетероструктуры борофен/GaN открывается энергетическая щель величиной 0.028 эВ . Установлено, что из двух видов двухосной деформации наиболее эффективной с точки зрения управления электронной структурой исследуемых гетероструктур является деформация двухосного сжатия. Показано, что в

электронной структуре гетероструктуры борофен/GaN при сжатии на 4% открывается энергетическая щель в 0.018 эВ, а в электронной структуре борофен/ZnO при сжатии в 6% открывается щель в 0.012 эВ. При двухосном растяжении таких изменений электронной структуры не происходит. Можно предположить, что предложенные конфигурации гетероструктур борофен/GaN и борофен/GaN с электронными свойствами, управляемыми деформацией растяжения/сжатия, могут иметь перспективы для использования в качестве материала для nano- и оптоэлектроники, в том числе для устройств с барьером Шоттки.

Список литературы

1. Novoselov K. S., Mishchenko A., Carvalho A., Castro Neto A. H., 2D materials and van der Waals heterostructures, *Science*, 353, aac9439–6298, 2016
2. Cuxart M. G., Seufert K., Chesnyak V., Waqas W. A., Robert A., Bocquet M. L., Duesberg G. S., Sachdev H., Auwärter W., Borophenes made easy, *Science Advances*, 7, eabk1490, 2021
3. Zhang Z., Penev E. S., Yakobson B. I., Two-dimensional boron: structures, properties and applications, *Chemical Society Reviews*, 46, 6746–6763, 2017
4. Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D., The SIESTA method for ab-initio order-N materials simulation, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14, 2745-2779, 2002

Влияние катионного и анионного легирования на структуру и оптические свойства оксида вольфрама

Маликов И. Ф.^{1,2}, Лядов Н.М.², Салахов М.Х.¹, Тагиров Л.Р.²

¹КФУ

²КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН

e-mail: insaf_malikov@mail.ru

Электрохромизм – это явление, при котором цвет или прозрачность материала изменяется при приложении напряжения. Оксид вольфрама WO_3 (WO_x) – известный катодный электрохромный материал, оптическая плотность которого изменяется при интеркалировании ионами щелочных и щелочноземельных элементов, входящими в состав электролита электрохромной ячейки. Это явление широко известно и имеет перспективу использования в архитектурном остеклении, дизайне интерьеров, автомобилестроении, однако не нашло массового применения, так как важна долговременная стабильность многих параметров электрохромных изделий в жестких условиях эксплуатации: высоких и низких температурах с большими градиентами, интенсивном воздействии прямых солнечных лучей в течение длительного времени и т.д.

Легирование позволяет улучшать потребительские свойства электрохромных тонких пленок WO_{3-x} . Из-за составной природы материала WO_{3-x} , он может подвергаться легированию как катионами, так и анионами. Методом реактивного магнетронного ко-распыления металлических мишеней вольфрама и молибдена в смеси газов аргона, кислорода и азота были синтезированы серии тонкопленочных образцов. Их морфология, структура, элементный состав и валентные состояния составляющих элементов охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Оптические свойства измерены с использованием спектрофотометрии пропускания и спектроскопической эллипсометрии.

Легирование азотом дает возможность влиять на проводимость, позволяя перераспределить падения напряжения в стеке анод/электролит/катод в пользу электролита. Известно, что несовершенство материала увеличивает коэффициент диффузии, что способствует процессу интеркаляции/деинтеркаляции ионов. Следовательно, оксидно-вольфрамовый материал, легированный азотом, может окрашиваться/обесцвечиваться быстрее и в более широком диапазоне, открывая направления улучшения потребительских качеств электрохимических материалов и устройств на основе оксида вольфрама.

Для получения электрохромного катодного материала, спектральное пропускание которого можно регулировать уровнем легирования, применено катионное легирование оксида вольфрама молибденом. С повышением степени легирования полученные пленки приобретают серую окраску и становятся малопрозрачными. Эллипсометрические исследования показали, что при этом усиливается поглощение как в коротковолновой, так и в длинноволновой части видимого и прилежащих к нему частей спектра. В результате происходит взаимная компенсация цветового окрашивания, которая приводит к почти ахроматическому изменению оптического пропускания, улучшая, таким образом, потребительские качества электрохимического материала и устройств на основе оксида вольфрама.

Список литературы

1. *Granqvist C.G.* Handbook of Inorganic Electrochromic Materials / C.G. Granqvist. – Amsterdam: Elsevier, 2002. – 650 c.
2. *Zeb S.* Advanced developments in nonstoichiometric tungsten oxides for electrochromic applications / S. Zeb, G. Sun, Y. Nie, H. Xu, Y. Cui, X. Jiang // *Materials Advances*. – 2021. – T. 2. – №. 21. – C. 6839-6884.

Эффекты механического размягчения и упрочнения пористых полимерных пленок в растворителях

Максимов А. В.¹, Максимова О. Г.¹, Никоноров А.А.¹,

¹Череповецкий государственный университет

e-mail: a_v_maximov@mail.ru

Механическая прочность, стабильность и другие свойства неактивных полимерных компонентов играют важную роль в обеспечении долговременной работы различных устройств, где возможны деформации этих компонент, например, в полимерных покрытиях на твердых подложках [1], полимерных матрицах с внедренными включениями (малыми частицами или волокнами) или в пористых пленках-сепараторах в литий-ионных аккумуляторах (ЛИА). Однако до сих пор отсутствуют теоретические подходы для изучения механических и других свойств таких сложных систем [2, 3].

В данной работе теории объемных взаимодействий Флори и Гросберга-Хохлова [3], использованы для изучения деформации пористых полимерных пленок в различных растворителях. Для описания их механических свойств проводится учет изменения их объема при деформации, для этого предлагается ввести коэффициент Пуассона μ , учитывающий анизотропию относительных деформаций в различных направлениях пленки.

Показано, что при значениях коэффициента набухания $\alpha > \alpha_{m1}$ в обеих теориях значение модуля Юнга монотонно уменьшается до нуля с увеличением α по одному и тому же асимптотическому закону, что качественно подтверждает результаты моделирования методом молекулярной динамики [4] и экспериментальные измерения механических свойств пористых полипропиленовых пленок в различных растворителях [5]. В теории Гросберга-Хохлова модуль Юнга набухшей пленки ($\alpha > 1$) всегда меньше модуля Юнга сухой пленки ($\alpha = 1$), таким образом, пленка всегда размягчается, и эффект упрочнения пористых полимерных пленок (пороэластический эффект) невозможен в никаких хороших растворителях. Однако в теории Флори имеются две области, в которых поведение пористой пленки в хороших растворителях качественно различно. В области $1 < \alpha < \alpha_{m1}$, т.е. для растворителей, близких к θ -растворителям, модуль Юнга даже увеличивается, т.е. имеет место пороэластический эффект, обнаруженный экспериментально [4]. Это значит, что для данной полимерной пленки всегда можно подобрать такой растворитель, в котором, наоборот, может реализоваться эффект ее упрочнения по сравнению с сухой.

Для количественного объяснения экспериментальных значений модуля Юнга как для сухих, так и мокрых пленок, в обеих теориях были выведены комбинированные формулы, учитывающие существенное изменение структуры пленок при их помещении в растворитель: от поликристаллической ($\mu = 0.3$) до сеточной ($\mu = 0.3$) за счет заметного вовлечения растворителя в саму пленку. На примере полипропиленовой пленки были рассчитаны полуэмпирические зависимости доли γ вовлеченного в пленку растворителя от параметра взаимодействия Флори-Хаггинса χ полимера с растворителем. Показано, что эта доля монотонно увеличивается от значения $\gamma = 0$ для сухой пленки до значения $\gamma = 1$ для пленки в идеальном (θ -) растворителе (χ_c). При $\chi > \chi_c$ также происходит ее упрочнение за счет сжатия полимерных цепей и их перехода в компактное состояние, близкое к глобулярному.

Список литературы

1. Gerasimov R.A., Eremeyev V.A., Petrova T.O., Maksimova O.G., Maksimov A.V. Wave dynamics and mechanics of composites for microstructured materials and metamaterials. Berlin: Springer. V.59. P. 35.
2. Peabody C., Arnold C.B. The role of mechanically induced separator creep in lithium-ion battery capacity fade, J. Power Sources. V. 196. 8147-8153. 2011
3. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука. 1989, 342 с.
4. Love C.T. Thermomechanical analysis and durability of commercial micro-porous polymer Li-ion battery separators, Journal of Power Sources. V. 196:2905-2912, 20115.
5. Gor G.Y., Cannarella J., Prevost J.H., Arnold C.B. A Model for the Behavior of Battery Separators in Compression at Different Strain, J. Electrochem. Soc. V.161. F3065-F3071, 2014.

Анализ механических напряжений в гетероструктурах на основе GaN на кремниевых подложках

Артеев Д. С.¹, Сахаров А. В.¹, Заварин Е. Е.¹, Николаев А. Е.¹, Яговкина М. А.¹, Цацульников А.Ф.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²НТЦ микроэлектроники РАН

e-mail: arteevds@mail.ioffe.ru

Рост GaN слоёв и гетероструктур на основе системы материалов III-N чаще всего происходит на подложках карбида кремния или сапфира из-за отсутствия недорогих подложек GaN большого диаметра. Рост также возможен на подложках кремния, которые обладают рядом преимуществ перед другими подложками, такими как значительно более низкая цена, относительно хорошая теплопроводность, и коммерческая доступность подложек диаметром до 450 мм [1]. Однако серьёзным недостатком кремниевых подложек является большая разница в коэффициентах теплового расширения и параметрах кристаллической решётки, что приводит к большой плотности дислокаций и растрескиванию выращенных слоёв при охлаждении с температуры эпитаксиального роста до комнатной температуры и ограничивает максимально возможную толщину слоя GaN. Преодолеть это ограничение возможно используя переходные слои AlGaIn различного состава [2].

В работе представлены результаты систематического анализа механических напряжений по данным in-situ оптической рефлектометрии, возникающих в подложках кремния Si (111) и выращиваемых на них структурах на основе AlGaIn во время роста методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений.

Список литературы

1. <https://www.fuledalink.com/products/18inch-silicon-wafer-dsp-cz01>
2. Tripathy, Sudhiranjan, et al. "AlGaIn/GaN two-dimensional-electron gas heterostructures on 200 mm diameter Si (111)." *Applied Physics Letters* 101.8 (2012): 082110.

О распространении поверхностных акустических волн в тонких пленках титаната бария стронция при воздействии одноосной нагрузки

Тимошенко П. Е.¹, Широков В.Б.^{1,2}, Калинин В.В.²

¹Южный федеральный университет, физический факультет

²Южный научный центр РАН,

e-mail: p.e.timoshenko@gmail.com

Уникальные нелинейные свойства сегнетоэлектрических материалов применяются в широком спектре промышленно важных устройств, разрабатываемых и изготавливаемых с учетом требований к их техническим характеристикам, включающим требования к минимизации массогабаритных параметров и сокращению энергопотребления. Это приводит к тому, что сегнетоэлектрические материалы все больше и больше применяются в тонкопленочном исполнении.

Нанесение тонкой пленки нелинейного сегнетоэлектрического материала на подложку приводит к изменению физических свойств пленки из-за разных величин термоупругих деформаций пленки и подложки. Поскольку пленка находится в зажатом состоянии, она испытывает вынужденную деформацию (u_m). Оптимизируя концентрацию компонент сегнетоэлектрического твердого раствора и условия нанесения пленки на подложку таким образом, чтобы ее материальные параметры соответствовали требуемой фазе и были вблизи фазовой границы, можно значительно повысить чувствительность измерительного элемента. Тонкую подстройку материальных параметров пленки можно осуществлять внешним электрическим полем и воздействием внешней нагрузки.

Благодаря своим уникальным свойствам, в последнее время увеличивается интерес к применению тонких пленок твердых растворов титаната бария стронция $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ (BST). В работе [1] рассмотрено изменение физических свойств (полный набор материальных постоянных) при изменении одноосной нагрузки. На фазовой диаграмме [1] в плоскости (u_m, u_x) для концентрации бария 80 % (BST80) имеется точка, в которой сходятся фазы. Для сечения, проходящего через $u_m=0$, существует c -фаза с поляризацией, направленной по нормали к плоскости пленки и ab -фаза, с поляризацией, направленной по диагонали прямоугольника в плоскости пленки.

Материальные постоянные пленок BST получены на основе термодинамической теории Ландау [1] для твердого раствора, использующей конечные потенциалы. Для BST это титанат бария и титанат стронция. Для титаната бария электроупругие коэффициенты термодинамического потенциала неоднозначны. При вычислении физических свойств использованы значения $Q_{11}=0.11$ [м⁴/Кл²], $Q_{12}=-0.045$ [м⁴/Кл²]. В [2] показывают, что предпочтительнее использовать значения $Q_{11}=0.1$ [м⁴/Кл²], $Q_{12}=-0.034$ [м⁴/Кл²]. Эти значения немного меняют фазовую диаграмму. Точка схождения фаз находится при концентрации бария 72.7 % (BST72.7). Для представленного в настоящей работе сечения, проходящего через эту точку ($u_m=0$) [1], набор фаз не изменился. Поведение материальных постоянных лишь немного изменилось количественно, без изменения качественного поведения. Поэтому, представленные в [1] качественные результаты остаются справедливыми.

В настоящей работе в рамках уточненной термодинамической модели для BST72.7 представлены результаты конечно-элементного моделирования в COMSOL Multiphysics [3] процессов возбуждения и распространения поверхностных акустических волн в слоистой структуре, состоящей из монокристаллической подложки кремния Si среза (001) и пленки титаната бария стронция (BST72.7). Исследована возможность управления поверхностной акустической волной, возбуждаемой пленкой на ограниченной кремниевой подложке, при помощи одноосной деформации (u_x), приложенной вдоль поверхности пленки.

Список литературы

1. V.B. Shirokov, P.E. Timoshenko, A.V. Pan'kin, A.G. Razumnaya "Tunable electromechanical properties of a barium strontium titanate ferroelectric film under a uniaxial stress" // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. – 2020. – Vol. 67. –No. 12. – P. 2704-2709, DOI: 10.1109/TUFFC.2020.3011591
2. T. Yamada "Electromechanical Properties of Oxygen-Octahedra Ferroelectric Crystals" // Journal of Applied Physics 43, 328 (1972), DOI: 10.1063/1.1661117
3. P.E. Timoshenko, V.V. Kalinchuk, V.B. Shirokov "Finite-Element Analysis of Scattering Parameters of Surface Acoustic Wave Bandpass Filter Formed on Barium Titanate Thin Film" // International Journal of Smart and Nano Materials 2018, Vol. 9, No. 2, PP. 88-98, DOI: 10.1080/19475411.2018.1447045

Оптика и спектроскопия

Возможность регистрации квантовых вихрей по полю излучения

Ларионов Н. В.^{1,2}, Молчановский В. М.¹

¹СПбГМТУ, ²СПбПУ

e-mail: *larionov.nickolay@gmail.com*

При ионизации одиночных атомов короткими лазерными импульсами могут возникать вихревые структуры [1-6]. Последние проявляют себя как запрещенные области для фотоэлектрона вокруг которых наблюдается закручивание тока вероятности – квантовые вихри.

В предыдущих наших работах [3-6] квантовые вихри исследовались как с помощью численного решения уравнения Шрёдингера, так и с помощью аналитического подхода, основанного на теории возмущений. Были выбраны определенные характеристики лазерного импульса (длительность, амплитуда, мгновенность включения/выключения) для которых наблюдалось хорошее согласие численного расчёта с аналитическими решениями, полученными в рамках второго порядка теории возмущений. Аналитические формулы позволили ясно увидеть механизмы появления вихрей – интерференцию определенных квантовых состояний фотоэлектрона [5].

Регистрация квантовых вихрей в эксперименте представляет собой сложную техническую задачу. В связи с этим, целью данной работы является показать возможность обнаружения квантовых вихрей по полю излучения, генерируемого ими. Наши расчёты основаны на полуклассическом подходе, в котором поле излучения \vec{E} описывается формулами классической электродинамики, а дипольный момент \vec{d} рассчитывается с помощью волновой функции ψ фотоэлектрона:

$$\vec{E} = \frac{1}{rc^2} \left[\dot{\vec{d}} \times \vec{n} \right] \times \vec{n}, \quad \dot{\vec{d}} = \left\langle \psi \left| \dot{\vec{d}} \right| \psi \right\rangle.$$

Полученное поле излучения и его угловое распределение сравнивается с полями, генерируемыми простыми квантовыми и классическими системами. Исследуется зависимость поля излучения от параметров ионизирующего лазерного импульса.

Список литературы

1. Lei Geng, F. Cajiao, Vélez, J. Z. Kaminski, Liang-You Peng and K. Krajewska, "Structured photoelectron distributions in photodetachment induced by trains of laser pulses: Vortices versus spirals", *Physical Review A*, vol. 104, 033111, 2021.
2. M. M. Majczak, F. Cajiao Vélez, J. Z. Kamiński, and K. Krajewska, "Carrier-envelope-phase and helicity control of electron vortices and spirals in photodetachment," *Opt. Express* 30, 43330-43341, 2022.
3. N. V. Larionov, A. A. Smirnovsky, D. N. Makarov and S. Y. Ovchinnikov, "Formation of Quantum Vortices at the Ionization of an Atom by an Ultrashort Laser Pulse: Two- and Three-Dimensional Cases", *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 129, pp. 949-955, 2019. doi: 10.1134/S1063776119110062.
4. N. V. Larionov, "Probability Flux for a Photoelectron Formed During the Ionization of a Hydrogen-Like Atom by an Ultrashort Laser Pulse," 2022 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), St. Petersburg, Russian Federation, 2022, pp. 221-222, doi: 10.1109/EExPolytech56308.2022.9950915.
5. N. V. Larionov, A. A. Smirnovsky, S. Y. Ovchinnikov and A. A. Schmidt, "Perturbation Theory in the Analysis of Quantum Vortices Formed by Impact of Ultrashort Electromagnetic Pulse on Atom", *Technical Physics*, vol. 63, pp. 1569-1575, 2018. doi: 10.1134/S1063784218110166.
6. S.Yu. Ovchinnikov, N. V. Larionov, A. A. Smirnovsky and A. A. Schmidt, "Formation of quantum vortices upon atom ionization by a pulse of electromagnetic waves" in *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and*

Исследование шума относительной интенсивности в микродисковых лазерных структурах

Комаров С. Д.¹, Крыжановская Н. В.¹, Блохин С. А.², Махов И. С.¹, Фоминых Н. А.^{1,3}, Иванов К.А.¹, Минтаиров С. А.², Калюжный Н. А.², Хабибуллин Р. А.⁴, Галиев Р. Р.⁴, Павлов А. Ю.⁴, Томош К. Н.⁴, Жуков А. Е.¹

¹НИУ ВШЭ – Санкт-Петербург

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова

⁴ИСВЧПЭ им. В.Г. Мокерова РАН

e-mail: serega.komarow@mail.ru

Выходная оптическая мощность полупроводниковых микролазеров, работающих в непрерывном режиме, не является постоянной во времени, а колеблется, создавая шум интенсивности [1,2]. Для оценки шумовых характеристик выходного излучения используют шум относительной интенсивности (relative intensity noise, RIN), который определяется как отношение спектральной плотности флуктуаций оптической мощности к квадрату средней мощности.

Величина RIN лазерных устройств служит индикатором качества для их применения во многих сферах, в том числе для создания сверхчувствительных сенсоров и передачи данных. Перспективными источниками излучения для передачи данных на плате являются микролазеры, поддерживающие моды шепчущей галереи (МШГ) и обладающие латеральным выводом излучения [3, 4]. В МШГ микролазерах с активной областью на основе квантовых яма-точек (КЯТ) InGaAs/GaAs продемонстрирована высокая температурная стабильность характеристик, возможность работы вплоть до 110 °С в непрерывном режиме [5] и возможность малосигнальной амплитудной модуляции вплоть до 7,8 ГГц [6]. В работе [6] был выполнен аналитический расчет величины RIN и его спектра для таких микролазеров, в зависимости от тока накачки и коэффициента подавления боковых мод, а также определены условия для безошибочной передачи данных на максимально достижимой скорости. Насколько нам известно, экспериментально значения RIN и его спектральная зависимость для МШГ микролазеров не исследовалась.

В данной работе выполнено исследование RIN в микродисковых лазерах с активной областью на основе массива InGaAs/GaAs КЯТ. Эпитаксиальная гетероструктура для лазеров выращивалась методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений на подложке GaAs. Микролазеры диаметром 20-30 мкм были изготовлены методами электронной литографии и сухого травления. Для реализации преимущественно одномодового излучения и направленного вывода излучения была применена деформация формы микролазера, не приводящая к ухудшению добротности резонатора. Исследование RIN выполнялось в непрерывном режиме работы микролазеров, в качестве источника питания использовался источник-измеритель Keithley 2401. Излучение микролазера собиралось с помощью микролинзированного волокна. Спектральная характеристика излучения исследовалась с помощью оптического спектроанализатора Yokogawa AQ6370D. Для регистрации RIN в диапазоне 0.1 – 10 ГГц при различных токах накачки использовался высокочастотный малошумящий многомодовый фотодетектор Newport 1414-50 и анализатор электрического спектра Rohde&Schwarz FSW26. Спектры RIN были скорректированы с учетом дробового и теплового шумов фотоприемника. Полученные частотные зависимости RIN и его абсолютные значения в зависимости от коэффициента подавления боковых мод и тока накачки свидетельствуют о перспективности применения InGaAs/GaAs КЯТ микролазеров для высокоскоростной передачи данных на плате.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10002, <https://rscf.ru/project/22-72-10002/>.

Список литературы

1. McCumber D. E. Intensity fluctuations in the output of cw laser oscillators. I //Physical Review. – 1966. – Т. 141. – №. 1. – С. 306.
2. Joindot I. Measurements of relative intensity noise (RIN) in semiconductor lasers //Journal de Physique III. – 1992. – Т. 2. – №. 9. – С. 1591-1603.
3. Vahala K. J. Optical microcavities //nature. – 2003. – Т. 424. – №. 6950. – С. 839-846.
4. Ward J., Benson O. WGM microresonators: sensing, lasing and fundamental optics with microspheres //Laser & Photonics Reviews. – 2011. – Т. 5. – №. 4. – С. 553-570.
5. Moiseev E. et al. Highly efficient injection microdisk lasers based on quantum well-dots //Optics Letters. – 2018. – Т. 43. – №. 19. – С. 4554-4557.
6. Zhukov A. E. et al. Dynamic characteristics and noise modelling of directly modulated quantum well-dots microdisk lasers on silicon //Laser Physics Letters. – 2021. – Т. 19. – №. 2. – С. 025801.

Исследование микродисковых лазеров с оптически связанным волноводом

Фоминых Н. А.^{1,2}, Моисеев Э.И.^{1,2}, Крыжановская Н.В.¹, Комаров С.Д.¹, Гусева Ю.А.³, Кулагина М.М.³, Иванов К.А.¹, Минтаиров С.А.³, Калюжный Н.А.³, Хабибуллин Р.А.⁴, Галиев Р.Р.⁴, Павлов А.Ю.⁴, Томош К.Н.⁴, Жуков А.Е.¹

¹ВШЭ

²Алфёровский университет

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе

⁴ИСВЧПЭ

e-mail: *fominy-nikita@yandex.ru*

Замена электронного способа передачи данных на микрочипе на оптическую ведет к увеличению скорости, повышению устойчивости к помехам, снижению тепловыделения и энергопотребления устройств [1, 2]. Полупроводниковые микролазеры с резонатором дисковой формы, поддерживающем моды шепчущей галереи (МШГ), могут быть использованы в качестве источника оптического излучения для передачи данных на микрочипе [3]. МШГ за счет высокой добротности (до 10^7 для Si МШГ резонаторов, до 10^5 для A_3B_5 микролазеров диаметром около 30 мкм) сильно локализованы в объеме резонатора и, следовательно, обладают низкими потерями на вывод излучения [4]. При этом аксиальная симметрия микродисковых (МД) резонаторов приводит к отсутствию выделенного направления в диаграмме направленности микролазеров на их основе, что, в свою очередь, сильно затрудняет реализацию оптической связи на микрочипе. Для достижения направленного вывода излучения МШГ микролазеров существуют различные способы. Например, для этого применяются некоторые модификации формы МД резонаторов, такие как, малое гармоническое отклонение от дисковой геометрии резонатора [5] или использование сквозного отверстия в резонаторе вблизи его края [6]. Однако данные модификации также могут негативно влиять на такие характеристики микролазера, как порог лазерной генерации и добротность. Другим эффективным способом реализации направленного излучения МД лазеров также является оптическая связь с другими оптическими элементами, например, с магистральным волноводом (диэлектрическим или полупроводниковым) [7]. При этом данная конфигурация является планарной и достаточно легко реализуется на интегральной микросхеме.

В данной работе проведено исследование вывода излучения полупроводниковых МД лазеров в сопряженный волновод, сформированный из той же эпитаксиальной гетероструктуры в планарной геометрии. Исследуемые гетероструктуры получены методом МОС-гидридной эпитаксии на подложке n^+ -GaAs. В качестве активной области были использованы 5 слоев InGaAs/GaAs квантовых яма-точек. Для формирования волноводов и МД резонаторов (диаметром 15 – 40 мкм), а также узких зазоров между ними (0 – 200 нм) применялись электронная литография и плазмохимическое травление. Изучался вывод излучения в прямоугольные волноводы и волноводы с секцией, огибающей МД лазер (углы огибания составляли 20 и 45 градусов), в зависимости от величины зазора между МД лазером и волноводом. Исследована эффективность вывода излучения в волновод в зависимости от параметра связи МД-волновод. Проведено исследование спектров электролюминесценции и порога лазерной генерации при комнатной температуре в зависимости от параметров пристыкованного волновода. Исследовано влияние прокачки волновода электрическим током

(«просветления» волновода) на эффективность вывода излучения и величину порогового тока МД лазеров.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10002, <https://rscf.ru/project/22-72-10002/>.

Список литературы

1. Koseki S. et al. *Appl. Phys. Lett.*, **94** (5), 0511102009 (2009).
2. Arakawa Y. et al. *Appl. Phys. Lett.*, **40** (11), 939–941 (1982).
3. Kryzhanovskaya N. V. et al. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **54** (45), 453001 (2021).
4. Savchenkov A. A. et al. *Opt. Express*, **15** (11), 6768 (2007).
5. Liew S. F. et al. *Applied Physics Letters*, **104** (23), 231108 (2014).
6. Tian Z. N. et al. *Optics Letters*, **42** (8), 1572-5 (2017).
7. Choi S. J. et al. *IEEE Photonics technology letters*, **15** (10), 1330-2 (2003).

Спектральный анализ эпидермальных стафилококков с гемолитической активностью при пародонтите

Зотова А. В.¹, Иванов С.С.¹, Тимченко Е.В.¹, Тимченко П.Е.¹, Лямин А.В.², Бажутова И.В.², Трунин Д.А.²,
Фролов О.О.¹, Волова Л.Т.²

¹Самарский университет

²Самарский государственный медицинский университет

e-mail: zotova_alena@bk.ru

Актуальной задачей современной клинической стоматологии является выявление и своевременное лечение воспалительных заболеваний полости рта, которые вызваны бактериальными патогенами. Одним из потенциальных участников патологического процесса при заболеваниях полости рта могут быть коагулазонегативные стафилококки с определенным фактором патогенности, которые на протяжении последнего столетия являются наиболее значимыми оппортунистическими патогенами в медицинской практике [1]. В литературе имеется большое количество работ, посвященных стафилококкам в том числе с помощью спектральных методов исследований [2]. Однако, роль данного микроорганизма в патологии органов полости рта (пародонтите) остается до сих пор малоизученной, несмотря на наличие значительного числа факторов патогенности, к одному из которых можно отнести их гемолитическую активность. [3]

Целью работы являлось исследование штаммов эпидермального стафилококка с гемолитической активностью с помощью Рамановской спектроскопии.

Проведено исследование 12 штаммов *Staphylococcus epidermidis*, выделенных из клинического материала от пациентов с хроническим пародонтитом (из пародонтальных карманов). Идентификацию всех выделенных штаммов проводили с использованием метода MALDI-ToF масс-спектрометрии на приборе MicroflexLT (Bruker) с использованием стандартного метода пробоподготовки и библиотек масс-спектров. У всех изолятов дополнительно определяли гемолитическую активность, при этом 50% штаммов обладали выраженной гемолитической активностью, которая была выявлена при повесе в аэробных условиях на 5% кровяном агаре с бараньей кровью. Для постановки эксперимента из суточных культур штаммов стафилококка получали инокулом 1,0 по МакФарланду в физиологическом растворе, что соответствовало 3×10^8 КОЕ/мл. В качестве отрицательного контроля использовали неинокулированный физиологический раствор.

В качестве основного метода анализа штаммов эпидермального стафилококка с гемолитической активностью был использован метод спектроскопии КР, проводимый с помощью экспериментального стенда, состоящего из рамановского пробника RPB-785, совмещенного с лазерным модулем Luxx MasterLML-785.0RB-04 (мощность до 500 мВт, длина волны $784,7 \pm 0,05$ нм) и высокоразрешающего цифрового спектрометра Shamrock sr303i, обеспечивающего спектральное разрешение 0,15 нм, со встроенной охлаждаемой камерой DV420A-OE (спектральный диапазон до 1200 нм) [4]. В исследованиях установлена мощность лазера 350 мВт при времени экспозиции 60сек, что обеспечивало стабильность измерений и получаемых результатов. Детальная обработка спектров КР осуществлялась в программе Mathematica, на основе ресурса «Ramantool v.1.0.175». Последующий детальный спектральный анализ исследуемых групп проводился с помощью дискриминантного анализа.

В результате проведенных исследований были установлены основные спектральные отличия штаммов эпидермального стафилококка с гемолитической активностью и без гемолитической активности, которые наблюдаются на линии КР $\sim 1650\text{см}^{-1}$ (Amide I vibration (collagen-like proteins)). Для оценки гемолитической активности был использован также комплексный критерий на основе относительной интенсивности линий КР.

Полученные результаты могут быть в дальнейшем использованы в качестве экспресс-оценки маркеров патогенности стафилококка и других условно-патогенных микроорганизмов и выявления их потенциального участия в развитии заболеваний слизистых оболочек полости рта.

Список литературы

1. А. Ю. Пестов, А. В. Панченко КОЛОНИЗАЦИЯ ПОЛОСТИ РТА СТАФИЛОКОККАМИ ПРИ ПАРОДОНТИТЕ // Вестник ВолгГМУ, 2011 Выпуск 4 (40) – стр. 62-65
2. Evelin Witkowska, Anna M. Łasica, Krzysztof Nicinski, Jan Potempa, and Agnieszka Kaminska In Search of Spectroscopic Signatures of Periodontitis: A SERS-Based Magnetofluidic Sensor for Detection of *Porphyromonas gingivalis* and Aggregatibacter actinomycetemcomitans // ACS Sens. 2021, 6, 1621–1635 <https://doi.org/10.1021/acssensors.1c00166>
3. Белобородов В. Б., Митрохин С. Д. // Инфекции и антимикробная терапия. — 2003. — Т. 5. — № 1. — С. 4—12
4. P. E. Timchenko, E. V. Timchenko, L. T. Volova, M. A. Zybin, O. O. Frolov, and G. G. Dolgushov Optical Assessment of Dentin Materials // Optical Memory and Neural Networks, 2020, Vol. 29, No. 4, pp. 354–357

Влияние легирования железом на высокотемпературную стабильность и физико-химические свойства танталатов висмута-магния.

Некипелов С. В.^{1,2}, Жук Н.А.², Кржижановская М.Г.³, Сивков В.Н.¹

¹ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,

²Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина

³Санкт-Петербургский государственный университет

e-mail: *NekipelovSV@mail.ru*

Висмутсодержащие соединения, в частности пирокслоры, перспективны благодаря своим прекрасным диэлектрическим свойствам - высокой диэлектрической проницаемости, малым диэлектрическим потерям в мегагерцовом диапазоне частот и регулируемому температурному коэффициенту емкости. В связи с этим материалы на основе таких пирокслоров могут быть использованы при изготовлении многослойных керамических конденсаторов, диэлектрических резонаторов, термисторов, толсто пленочных резисторов и элементов связи, генераторов или фильтров СВЧ.

Железосодержащие пирокслоры на основе танталата висмута также характеризуются термической стабильностью и отсутствием фазовых переходов вплоть до 1140 С. Между тем термическое поведение железо- и магнийсодержащих пирокслоров в области высоких температур остается неизученным. В докладе сообщается о получении новой непрерывной серии образцов $\text{Bi}_2\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ta}_2\text{O}_9$ ($x=0-1$) и наблюдаемом влиянии ионов железа на термическую стабильность и тепловое расширение танталатов висмута-магния со структурой пирокслора.

Все образцы были синтезированы твердофазным методом и исследованы методами высокотемпературного рентгеноструктурного анализа и методами рентгеновской NEXAFS- и XPS-спектроскопии. Было показано, что железо, как и магний, сосредоточен в структуре в октаэдрическом положении тантала. Легирование железом атомов привело к увеличению верхней границы интервала термической стабильности магнийсодержащих пирокслор от 1050 С ($x = 0$) до температуры 1140 С ($x = 1$). Было обнаружено влияние ионов железа (III) на термическую устойчивость и тепловое расширение исследованных твердых растворов, в частности было установлено, что термическая устойчивость железосодержащих твердых растворов коррелирует с параметром элементарной ячейки, и чем ниже параметр, тем стабильнее соединение. Величина коэффициента термического расширения, наоборот, обратно пропорциональна константе ячейки. Кроме того, на основании спектральных исследований было показано, что атомы висмута, магния и железа во всех рассматриваемых соединениях имеют зарядовое состояние Bi^{3+} , Mg^{2+} и Fe^{3+} , соответственно, а атомы тантала, свою очередь, имеют эффективный заряд $+(5-\delta)$. Было также показано, что железо, как и магний, сосредоточен в структуре пирокслора в октаэдрических положениях тантала.

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

Пористый кремний допированный эрбием для оптоэлектрических приложений

Хамзин Э. Х.¹, Нестеров Д. А.¹, Латухина Н. В.¹, Артемьев Д. Н.¹, Мельников А. А.¹

¹Самарский университет

e-mail: *elkhan.k.khamzin@gmail.com*

Проведено исследование систем нанокристаллического пористого кремния с ионами эрбия, допированными в диэлектрический оксидный слой. Исследовались характеристики спектров микро-фотолюминесценции и комбинационного рассеяния света структур с оксидным слоем сложного состава. Выявлено заметное влияние эрбиевой примеси на характеристики образцов. Результаты проведенных исследований могут быть использованы для методики изготовления кремниевых ап-конвертеров и светоизлучающих структур.

Изучение многослойных структур на основе пористого кремния (ПК) является актуальной задачей современной физики. Этот материал способен существенно повысить эффективность и расширить функциональные возможности оптоэлектронных приборов на основе кремния [1,2]. Особый интерес представляет ПК, допированный ионами эрбия, который может использоваться и как основа ИК-светодиода, и как ап-конверсионное покрытие для солнечных элементов. В подобных системах наблюдается эффективная люминесценция на длине волны 1,55 мкм, связанная с излучательными центрами эрбия, и преобразование излучения ближней ИК-области в видимое [3]. Передача энергии между ионами эрбия и от нанокристаллов кремния к ионам эрбия способствует повышению эффективности фотопреобразователей [4], а также квантового выхода светоизлучающих систем ПК-эрбий [5].

Образцы пористого кремния создавались на подложке монокристаллического кремния с полированной или текстурированной поверхностью, путём электрохимического травления в спиртовом растворе плавиковой кислоты $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Травление происходило при постоянной плотности тока 10 мА/см². Время травления составило 5, 10 и 15 минут. Для изготовления люминесцентных кремниевых структур использовался порошок 5-ти водной соли азотнокислого эрбия $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. Легирующая примесь эрбия создавалась путём пропитки пористого слоя водным раствором азотнокислого эрбия с последующим отжигом в воздушной среде при 950 °С в течении 30 минут.

Спектроскопия комбинационного рассеяния проводилась как по поверхности пористого кремния, так и на поперечном сколе пористого слоя при комнатной температуре в темновых условиях. Спектры микро-фотолюминесценции измерялись ИК-Фурье спектрометром длина волны лазерного возбуждения которого составила 532 нм. Во всех случаях измерения проводились в области пористого слоя. Ввиду неоднородности пористого слоя, лазерный луч фокусировался таким образом, чтобы захватить протравленные отверстия и участки между ними.

Структуры показывают хорошие люминесцентные свойства при комнатной температуре. Интенсивность люминесценции образцов зависит от толщины окисла между частицами эрбия и нано кристаллами кремния. Спад люминесценции эрбиевого мультиплетного пика связан с температурами отжига свыше 800 градусов как при коротковолновом, так и при длинноволновом возбуждении. в то время как увеличенная интенсивность свидетельствует о наличие дополнительных каналов передачи внешнего возбуждения через нанокристаллы кремния к

примесным ионам и эрбия. Ионы эрбия обнаружены на поверхности и в порах пористого кремния. Помимо преобладающего секвиоксида эрбия обнаружены следовые концентрации безводной соли нитрата эрбия.

Список литературы

1. Латухина Н.В., Лизункова Д.А., Рогожина Г.А., Степихова М.В. Перспективы пористого кремния как материала для оптоэлектронных приложений // Российская конференция и школа молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоники «Фотоника 2019». — 2019. — С. 69 ISBN 978-5-85957-153-6
2. Латухина Н.В., Лизункова Д.А., Рогожина Г.А., Жильцов И.М., Степихова М.В., Чепурнов В.И. Многослойные наноструктуры на базе пористого кремния для оптоэлектроники // Фотоника. — 2018. — № 5. — С. 508-513. DOI: 10.22184/1993-7296.2018.12.5.508.513
3. Koptev M. Yu, Morozov A. N., Shatilova K. V., Muravyev S. V., Zapryalov A. E., Likhachev M. E., Kim A. V. All-fiber high-power erbium-doped laser system generating optical pulses with a duration of 200 μ s to 5 ms for fractional photo-rejuvenation // Applied Optics. - 2022. - №16. - С. 4851-4856 DOI:10.1364/AO.455761
4. Joubert M. F. Photon avalanche upconversion in rare earth laser materials // Optical Materials. -1999. - № 11. - С. 181-203
5. Krasilnik Z. F., Andreev B. A., Gregorkiewicz T., Jantsch W., Klik A.J., Kryzhkov D. I., Ludmila V. Krasilnikova, Viktor P. Kuznetsov, Hanka Przybylinska, Dmitry Yu. Remizov, Vladimir G. Shengurov, Viacheslav B. Shmagin, Margarita V. Stepihova, Victor Yu. Timoshenko, Nguyen Q. Vinh, Artem N. Yablonskiy, Denis M. Zhigunov Erbium Doped Silicon Single- and Multilayer Structures for light-emitting device and Laser Applications // Journal of Materials Research. - 2006. - №21. - С. 574–583. DOI:10.1557/jmr.2006.0083

Метаматериалы с временной неоднородностью для управления оптическими полями

Минибаев А. И.¹, Харитонов А. В.¹, Харинцев С. С.¹

¹КФУ Институт физики

e-mail: ajdiminibaev@stud.kpfu.ru

Метаматериалы, представляющие собой искусственные наноструктурированные среды, открывают уникальные возможности управления светом. За годы исследований в метаматериалах был обнаружен ряд необычных эффектов [1], таких как отрицательное преломление, бездифракционное огибание препятствий и др. Благодаря этому они находят широкое применение в фотонике и оптоэлектронике. Все эти особенности обусловлены наличием в среде пространственной неоднородности.

В последнее время большой интерес привлекают метаматериалы, обладающие неоднородностью во временной области [2]. Под временной неоднородностью понимается быстрое изменение свойств всей среды во времени, например, переключение показателя преломления. Создание временных модуляций позволило пронаблюдать множество новых эффектов, среди которых нарушение взаимности, усиление волн, преобразование частоты и др. В большинстве работ переключение среды предполагается мгновенным. Однако, в действительности скорость отклика любой физической системы является конечной. Целью настоящей работы является исследование зависимости оптических свойств метаматериалов от структуры их временной неоднородности. Рассматривался эффект преобразования частоты света и изучались такие параметры, как скорость, глубина и профиль переключения. С помощью методов численного моделирования были рассчитаны коэффициенты отражения R и пропускания T света при прохождении через временной интерфейс. Данные коэффициенты характеризуют эффективность преобразования частоты света в материалах с временной неоднородностью. Показано, что при увеличении скорости переключения коэффициенты R и T испытывают рост, а затем выходят в насыщение. Данный эффект проанализирован с помощью метода на основе Фурье преобразования. Обнаружено, что при фиксированном времени переключения значение коэффициента R (T) может изменяться на десятки процентов в зависимости от временного профиля переключения показателя преломления.

Результаты проведенных исследований позволяют осуществлять дизайн и оптимизацию оптических устройств, основанных на метаматериалах с временной неоднородностью.

Работа выполнена за счёт средств Российского научного фонда (22-72-00091), <https://grant.rscf.ru/site/user/forms?number=22-72-00091>.

Список литературы

1. Shelby R. A., Smith D. R. and Schultz S., Experimental Verification of a Negative Index of Refraction// Science, Vol. 292. pp.77–79(2001).
2. Galiffi E., Tirole T., Yin S., et al., Photonics of time-varying media // Advanced photonics, Vol. 4(1), pp.1–32(2022).

Терагерцовая спектроскопия динамичных биологических объектов

Кушлевич М.А.^{1,2}, Строганова Е.В.¹, Репин Р.Л.¹

¹Кубанский Государственный Университет

²Кубанский Государственный Медицинский Университет

e-mail: *mariakup196@gmail.com*

Особенностью всех скрининговых процедур *in vivo* для получения ТГц-изображения исследуемого органа является то, что все известные методы позволяют отслеживать изменение диффузности биологических тканей только в статичных объектах. Нерешенной остается задача по разработке методики получения спектральных характеристик динамично изменяющихся объектов.

В работе проводились исследования спектров отражения биологического объекта на примере живого сердца лягушки. В качестве инструментария был использован спектрограф Tera K15 [1], в основе которого лежит принцип когерентного детектирования импульсов излучения, отраженного от исследуемого образца.

Впервые получены амплитудно- и фазо-частотные характеристики (АЧХ и ФЧХ) бьющегося сердца лягушки в диапазоне частот от 0,5 до 3,8 ТГц. Измерения проводились в статичном положении без использования методики сканирования поверхности объекта. Рассматриваемые в работе результаты получены при фокусировке терагерцового излучения на произвольную точку поверхности бьющегося сердца.

Было установлено, что амплитудно-частотная характеристика для произвольной точки поверхности открытого сердца лягушки при различных временах накопления приводит к ярко выраженным откликам на частотах 1,25 ТГц, 2,6 ТГц. Данные пики выражены в амплитудно-частотной характеристике отраженного сигнала с временем накопления на одну точку 100 мс, при большем времени накопления (300 мс) наблюдается уширение спектральной линии сигнала. Выдвинуто предположение, что такие различия при разном времени накопления сигнала вызваны превышением времени накопления сигнала на одну точку минимальной длительности образующих сердечного цикла (например, систолы предсердий ~ 100 мс) и охват сразу нескольких циклов (систолу желудочков, диастолу предсердий и желудочков ~ 300 мс):

$$B(\tau) = \int G(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega,$$

где B - корреляционная функция, G - спектральная плотность сигнала, ω - частота, τ - время накопления.

Подобное смешивание различных составляющих сердечного цикла интегрирует соответствующие им корреляционные функции (с различным τ) и приводит к уширению спектров. Частоты 1,25 ТГц и 2,6 ТГц на фазо-частотной характеристике произвольной точки бьющегося сердца выступают в качестве откликов на толщину сердечной стенки и стенок за ней, поскольку наличие областей с полочками (изломы) на этой характеристике свидетельствуют о переходе ТГц импульса из одной среды в другую (граница воздух-мышца, мышца – внутренняя полость сердца и тд).

Работа выполнена при поддержке гранта Кубанского научного фонда № МФИ-20.1-17/21 и РФФИ № 19-42-23006 р_а.

Список литературы

1. Menlo Systems GmbH: official website. – 2023. – URL: <https://www.menlosystems.com/> (дата обращения: 05.03.2023)

Impact of the control electrodes scheme of the piezoelectric deformable mirror on the light focusing through a scattering medium

Galaktionov I. ¹, Sheldakova J., Toporovsky V., Kudryashov A.

¹Institute of Geosphere Dynamics RAS

e-mail: *galaktionov@activeoptics.ru*

Efficiency of the laser beam focusing through the scattering medium with known concentration values was numerically investigated. We used the response functions of 3 kinds of bimorph deformable mirrors — with 14, 32 and 48 electrodes. The algorithm for numerical correction were programmed. The obtained results shown that 14 electrodes (2 rings) are not enough to compensate for the distortions, produced by the scattering medium with the given concentration values.

It is well known that light undergone multiple scattering while propagating through the turbid medium [1]. However, the initial laser beam energy is not lost but is converted into a diffuse glow of scattered light that makes objects look blurred and thus represents a major obstacle to the imaging and focusing applications. Thus it is important to understand the impact of the turbid medium on the light propagation [2].

We performed the correction of the scattered laser beam distortions numerically — we used experimentally measured response functions of the bimorph mirror [3]:

1. We know the Poynting surface of the scattered beam (from experimental measurements).
2. Approximate this surface with Zernike polynomials.
3. Calculate the corresponding Shack-Hartmann focal spots offsets.
4. Calculate the control voltages to compensate for these offsets.
5. Estimate the residual focal spots offsets after voltages “apply”.
6. Calculate the Zernike coefficients that corresponds to these residual focal spots offsets.
7. Calculate the RMS of the point-to-point difference between the initial and current Poynting surfaces.

The results of the numerical correction of the scattered beam distortions shows that, as expected, the mirror with 48 electrodes is the most efficient – it allowed to improve the calculated Strehl ratio up to 0.98. The mirror with 32 electrodes also significantly increased the Strehl ratio because its electrodes number and dislocation scheme is closer to the one of the 48 electrodes mirror. The mirror with the 14 electrodes shown the worst result – Strehl ratio is about 0.4. It is due to the not enough control electrodes – this mirror has only 3 rings of electrodes which is not enough to compensate for the spherical wavefront aberrations.

Funding information

The research was carried out within the Russian Science Foundation project # 20-69-46064 —research of efficiency of compensation of aberrations of a scattered radiation wavefront.

References

1. A.P. Mosk, A. Lagendijk, G. Lerosey, M. Fink, “Controlling waves in space and time for imaging and focusing in complex media”, *Nature Photonics*, 6, 283, 2012.
2. I.V. Galaktionov, J.V. Sheldakova, A.V. Kudryashov, “Wavefront analysis of the laser beam propagating through a turbid medium”, *Quantum Electronics*, 45 (2), 143 – 144 (2015).
3. I V Galaktionov, A V Kudryashov, Y V Sheldakova, A A Byalko, G Borsoni, «Measurement and correction of the wavefront of the laser light in a turbid medium», *Quantum Electronics*, 47(1), 32-37, 2017.

Анализ температурного гашения стимулированного излучения и оже-процессов в гетероструктурах с квантовыми ямами на основе HgCdTe

Разова А. А.^{1,2}, Кудрявцев К. Е.^{1,2}, Румянцев В. В.^{1,2}, Уточкин В. В.¹, Фадеев М. А.¹, Алешкин В. Я.^{1,2}, Михайлов Н. Н.³, Гавриленко В. И.^{1,2}, Морозов С. В.^{1,2}

¹Институт физики микроструктур РАН

²ННГУ им. Н. И. Лобачевского

³Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН

e-mail: ania.razova@yandex.ru

В настоящее время квантово-каскадные лазеры (ККЛ) являются самыми востребованными компактными источниками излучения в средней и дальней инфракрасной (ИК) области. Однако, несмотря на столь широкое использование и высочайшие характеристики, данные лазеры не перекрывают диапазон 20 – 60 мкм из-за сильного решеточного поглощения в материалах $A^{III}B^V$, которые используются для изготовления большинства ККЛ [1], а также простые межзонные излучатели среднего ИК диапазона могут быть интересны в ряде приложений как более доступные и обладающие лучшими возможностями перестройки по длине волны излучения.

Альтернативой ККЛ могут выступать межзонные лазеры на основе узкозонных материалов, например такого, как твердый раствор HgCdTe. Гетероструктуры с узкими квантовыми ямами (КЯ) Hg(Cd)Te/CdHgTe, в которых в окрестности $k=0$ реализуется симметричный для электронов и дырок закон дисперсии, являются перспективным материалом для создания лазеров в диапазоне длин волн 3-60 мкм. Как известно, в средней и дальней ИК области необходимо подавлять безызлучательную оже-рекомбинацию, так как при увеличении длины волны происходит уменьшение вероятности излучательной рекомбинации. Квазисимметричный закон дисперсии в структурах с КЯ на основе HgCdTe существенно увеличивает энергетический порог оже-процессов и приводит к их заметному подавлению.

В данной работе исследуются гетероструктуры с КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs (013) с буферными слоями ZnTe и CdTe [2]. Анализ оптических свойств данных структур осуществляется с помощью исследования при различных температурах спектров фотолюминесценции (ФЛ) при различном уровне импульсной оптической накачки и спектров стимулированного излучения (СИ) с целью выяснения причин гашения СИ. Оно, как показывают проведенные исследования, связано с разогревом носителей, приводящим к увеличению темпа оже-рекомбинации.

Ранее в работе [3] было показано, что в волноводных гетероструктурах с узкими (4-9 нм) КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe в диапазоне 10-20 мкм происходит гашение СИ за счет «включения» пороговой оже-рекомбинации из-за решеточного разогрева. Известно, что при уменьшении длины волны происходит увеличение вероятности излучательной рекомбинации и рост пороговой энергии оже-процесса с участием двух электронов и дырки (ССНС). Согласно данным расчета закона дисперсии для гетероструктур с КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe толщиной 4-5 нм с длиной волны излучения в диапазоне 5-10 мкм пороговая энергия ССНС оже-процесса составляла $\sim 30-40$ мэВ. С увеличением энергии межзонного перехода максимальная температура наблюдения СИ в данных структурах увеличивается. Однако это приводит к

существенному росту порога наблюдения СИ и, как следствие, к росту необходимой для получения СИ плотности мощности оптической накачки. Увеличение плотности мощности накачки существенно разогревает газ носителей, что приводит к «включению» пороговой оже-рекомбинации, которая в диапазоне 5-10 мкм стабилизируется около 200 К и определяет максимальную температуру наблюдения СИ. Отметим, что пороговая энергия ССНС оже-процесса для этих структур была в несколько раз больше, чем kT при 200 К (≈ 17 мэВ). Оценка эффективной температуры носителей по спаду коротковолнового края спектров ФЛ показала, что при повышении плотности мощности возбуждаемого излучения температура носителей становится существенно отличной от температуры решетки, в результате разогрев носителей не позволяет добиться инверсии населенности, и, как следствие, происходит гашение СИ при более высокой температуре. Отметим, что спектры ФЛ были получены при таких значениях плотности мощности, при которых СИ не наблюдалось.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-72-10111).

Список литературы

1. M. S. Vitiello et al., *Opt. Express.*, **23** (4), 5167-5182 (2015).
2. S. Dvoretzky et al., *Journal of Electronic Materials*, **39** (7), 918 (2010).
3. V. V. Romyantsev et al., *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, **41**, 750–757 (2020).

Моделирование XAFS-спектров углеродных наноструктур низкой размерности

Макаров П. А.¹, Некипелов С. В.¹, Сивков В. Н.¹

¹ФГБУН ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

e-mail: *makarovpa@ipm.komisc.ru*

Возможность создания таких экзотических форм соединений углерода как фуллерен C₆₀ [1,2], углеродные нанотрубки [3] и графен [4,5] открыла широчайшие перспективы для экспериментальных исследований подобных наносистем низкой размерности. Несмотря на интенсивную работу множества научных групп в этой области, данные исследования остаются актуальными и по сей день. Это обусловлено как прикладной значимостью нанотехнологий, так и развитием фундаментальной науки в целом.

Как известно, хорошо зарекомендовавшими себя экспериментальными методами исследования внутреннего строения, электронной конфигурации, электрических, магнитных и оптических свойств различных наносистем, являются техники, основанные на поглощении и эмиссии данными структурами рентгеновского излучения [6]. Успешность данных методик объясняется специфическим характером тонкой структуры соответствующих спектров. Вместе с тем, построение полной количественной теории явления взаимодействия рентгеновских квантов с атомами или ионами мишени вблизи края поглощения ещё далеко от своего завершения [6-8].

В силу указанных причин, теоретические исследования особенностей поглощения рентгеновского излучения углеродными наноструктурами низкой размерности (особенно вблизи края поглощения) является весьма актуальной задачей и требует привлечения самых современных методов моделирования и вычислительных технологий.

В рамках данной работы выполнено моделирование XAFS-спектров нескольких низкоразмерных (0D и 1D) аллотропных модификаций углерода. В частности, были изучены особенности тонкой структуры спектра поглощения рентгеновского излучения вблизи К-края атома С для фуллеренов C₂₀ и C₆₀, а также нанотрубок C₃₆₀. В ходе этих исследований отработана методика совместного использования программного обеспечения с открытым исходным кодом Fullerene [9,10] и FDMNES [7,8]. Для указанных наносистем вычислены уровни Ферми, а также построены энергетические зависимости сечения фотопоглощения в области XANES. Выявлены характерные особенности полученных энергетических спектров, которые позволяют однозначно идентифицировать соответствующую им систему.

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

Список литературы

1. H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, et al. // Nature, v. 318, 162-163 (1985).
2. W. Krätschmer, L. Lamb, K. Fostiropoulos, et al. // Nature, v. 347, 354-358 (1990).
3. S. Iijima. // Nature, v. 354, 56-58 (1991).
4. K.S. Novoselov, et al. // Science, v. 306, 666 (2004).
5. K.S. Novoselov, et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA, v. 102, 10451 (2005).
6. J.A. van Bokhoven, C. Lamberti. X-Ray Absorption and X-ray Emission Spectroscopy: Theory and Applications (Wiley, 2016).

7. Y. Joly. // Phys. Rev. B, v. 63, 125120-125129 (2001).
8. O. Bunau, Y. Joly. // J. Phys.: Condens. Matter, v. 21, 345501 (2009).
9. P. Schwerdtfeger, L. Wirz, J. Avery. // J. Comput. Chem., v. 34, 1508-1526 (2013).
10. P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos. An Atlas of Fullerenes (Dover Publ., New York, 2006, 392 pp.).

Люминесцентная термометрия и ап-конверсия в кристаллах $\text{LiNbO}_3:\text{Er}$

Скворцов А. П., Воронов М.М.¹, Певцов А.Б.¹, Старухин А.Н.¹, Резницкий А.Н.¹, Polgar K.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Политехническая 26, С.-Петербург, Россия

²Wigner Research Centre for Physics of HAS, Konkoly-Thege 29-33, Budapest, Hungary

e-mail: a.skvortsov@mail.ioffe.ru

Люминофоры, активированные редкоземельными ионами (РЗИ), рассматриваются как перспективные материалы для создания наноразмерных высокочувствительных люминесцентных термометров, действие которых основано на ап-конверсионном преобразовании возбуждающего излучения [1]. Важным достоинством подобных датчиков является возможность их использования для неинвазивных измерений биологических объектов. В качестве многообещающих кандидатов для реализации ап-конверсионной термометрии предлагается использовать легированные эрбием оксиды металлов, в которых интенсивная ап-конверсионная фотолюминесценция (ФЛ) в зеленой области спектра сочетается с высокой термочувствительностью и повышенной стабильностью свойств [2].

В настоящей работе исследовано влияние температуры на интенсивность ап-конверсионной ФЛ в конгруэнтных кристаллах $\text{LiNbO}_3:\text{Er}^{3+}$, которые были выращены из расплава методом Чохральского. РЗИ добавлялись в расплав в виде оксидов. Концентрация ионов Er^{3+} составляла 0,25 % по массе. Из объемных кристаллов вырезались ориентированные ($1 \times 5 \times 10$) мм³ образцы. Возбуждение ФЛ осуществлялось полупроводниковым лазерным диодом ($\lambda_{\text{exc}}=808$ нм). Ап-конверсионное излучение регистрировалось в зеленой области спектра (510-580 нм), в которой наблюдалась интенсивная структурированная ФЛ, обусловленная излучательными переходами из двух близко расположенных (термически связанных) уровней энергии иона Er^{3+} [${}^2\text{H}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$ (520-540 нм) и ${}^4\text{S}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$ (545-560 нм)]. Температурные измерения проводились в диапазоне 77-420К. Обнаружено, что в области $T > 290\text{K}$ устанавливается тепловое равновесие между уровнями ${}^2\text{H}_{11/2}$ и ${}^4\text{S}_{3/2}$, определяемое фактором Больцмана [$I({}^2\text{H}_{11/2})/I({}^4\text{S}_{3/2})=C \cdot \exp(-\Delta E/kT)$], что подтверждается линейным характером экспериментальной зависимости I_{525}/I_{550} от обратной температуры, построенной в полулогарифмическом масштабе. Здесь I_{525}/I_{550} - отношение интенсивностей полос «зеленой» ФЛ, центрированных в спектральной области 525 нм и 550 нм и соответствующих переходам ${}^2\text{H}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$ и ${}^4\text{S}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$. Отметим, что определенное таким образом значение $\Delta E=0.043$ эВ, находится в хорошем согласии с данными по разнице энергий между возбужденными уровнями иона эрбия ${}^2\text{H}_{11/2}$ и ${}^4\text{S}_{3/2}$, [3]. Таким образом, изменение интенсивности ап-конверсионной ФЛ в $\text{LiNbO}_3:\text{Er}^{3+}$ можно использовать в качестве чувствительного термодатчика.

В работе также исследованы границы применимости «McCumber» теории [4], устанавливающей связь между поперечными сечениями излучения и поглощения энергетических уровней РЗИ и широко используемой для проверки установления теплового равновесия в системе.

Список литературы

1. D. Jaque and F.Vetrone, *Nanoscale*, 2012, 4 (4301-4326).

2. X. Liu, et al, *J. of Materials Science: Materials in Electronics*, 2019, 30 (5718–5725).
3. J.B. Gruber, et al, *J. of Appl. Phys.*, 2010, 108 (023109).
4. D.E. McCumber, *Phys. Rev.*, 1964, 136 (A954–A957).

Исследование NV-центров в природных алмазах методами спектроскопии фотолюминесценции и оптического детектирования магнитного резонанса

Яковлева В. В.¹, Лихачев К. В.^{1,2}, Бреев И.Д.¹, Титков С.В.³, Баранов П.Г.¹

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе

²САФУ им. М.В. Ломоносова

³ИГЕМ РАН

e-mail: valya_yakovleva_1999@mail.ru

Алмаз является одним из наиболее многообещающих минералов и имеет огромное прикладное значение в различных сферах человеческой деятельности. Несмотря на это, однозначная теория процесса образования алмаза, определения его возраста ещё не построена. Анализ кристаллической структуры алмаза для этих целей проводится множеством различных физических методов, одним из которых для определения свойств внутренних парамагнитных дефектов используется метод оптического детектирования магнитного резонанса (ОДМР). Данный метод примечателен тем, что является локальным, то есть позволяет проводить прецизионный анализ с высоким пространственным разрешением.

Наиболее распространенной примесью в алмазе является азот, который может составлять до 1% от массы алмаза. Многочисленные исследования показали, что азот присутствует в большинстве алмазов и во многих различных конфигурациях. Большая часть азота попадает в алмазную решетку в виде одного атома, однако молекулярный азот также включается в алмаз. Среди парамагнитных дефектов в алмазе выделяется широко известный NV-центр, который представляет собой отрицательно заряженный замещающий атом азота, расположенный рядом с вакансией углерода. Его спектр люминесценции представляет собой нуль фонную линию $\lambda = 637$ нм и боковую полосу фонных повторений. Он имеет основное спиновое состояние $S=1$, спиновые населенности которого выстраиваются при лазерной накачке, что позволяет регистрировать ОДМР при комнатной температуре [1]. Стоит также отметить, что данный центр способен взаимодействовать с донором азота в алмазе, что можно увидеть благодаря методу ОДМР.

В данной работе будут представлены результаты исследований природных монокристаллических и поликристаллических алмазов методами спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) и ОДМР с использованием конфокального микроскопа, для исследования свойств NV-центров в природном алмазе, а также их взаимодействия с донорами азота. Для этого мы используем объектив 0.7 NA 100x, лазер с $\lambda = 532$ нм, $P = 5$ мВт, синхронный детектор, генератор СВЧ и НЧ в диапазоне 2-3 ГГц с антенной для приложения резонансного СВЧ, ПЗС камеру для записи спектра ФЛ, ФЭУ для регистрации интегральной ФЛ.

Мы получили пространственное распределение заряда по алмазам методом регистрирования спектров ФЛ, с помощью которых можно определить соотношение концентраций отрицательно заряженного NV-центра к нейтрально заряженному. Концентрация азота в алмазе была определена по отношению стеллитов к центральной линии ОДМР NV-центра. Также методом ОДМР было получено пространственное распределение микронапряжений в алмазах. Регистрация спектров ОДМР кристаллов в магнитном поле позволило оценить особенности выстраивания NV-центров в моно- и поликристаллических образцах.

Мы предполагаем, что ОДМР NV-центров дает обширную информацию об их свойствах: распределение концентрации NV-центров по образцу, распределение локальных напряжений, характер взаимодействия NV-центров с соседним азотом. Предполагается, что исследование ОДМР NV-центров в природных алмазах позволит дополнить имеющуюся геологическую информацию о процессах их образования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского Научного Фонда (проект № 23-12-00152).

Список литературы

1. A. Gruber, et al. Science 27 Jun 1997: Vol. 276, Issue 5321, pp. 2012-2014.

Исследование энергетической структуры возбужденных состояний спиновых центров в гексагональных и ромбических поли типах SiC методом антипересечения уровней

Вейшторг И. П.^{1,2}, Скоморохов А.М.^{1,2}, Баранов П.Г.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²САФУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: igorveyshtort@gmail.com

Несмотря на высокую степень изученности основного состояния (ОС) вакансионных центров со спином $S=3/2$, спиновые свойства в возбужденном состоянии (ВС) не рассматривались до недавнего времени. ВС определяют природу оптического выстраивания. Поскольку ВС обладают малыми характерными временами жизни в пределах десяти нс, фиксировать их удаётся за счёт высокой чувствительности оптического метода детектирования и большей амплитуды микроволнового поля, обеспечивающего существенную вероятность перехода в течение времени жизни [1]. Понимание свойств системы энергетических уровней возбужденного состояния имеет решающее значение для разработки сверхбыстрых, полностью оптических методов управления спином.

В работе представлены сигналы антипересечения спиновых уровней (АПУ), зарегистрированные по изменению фотолюминесценции (ФЛ) в магнитном поле в основном и возбужденном состояниях для спиновых центров со $S = 3/2$. Исследовалась температурная зависимость линий АПУ в диапазоне температур от 15 до 270 К. Регистрация сигналов осуществлялась посредством синхронного детектирования при приложении постоянного магнитного поля и осциллирующего на низкой частоте переменного магнитного поля, направленных вдоль с-оси кристалла. Для центров в различных поли типах определены температурные сдвиги расщепления тонкой структуры в ВС. Наблюдаемая сильная температурная зависимость расщепления в нулевом поле в возбужденном состоянии позволяет сделать вывод о применимости рассматриваемых ВС центров в приложениях квантовых датчиков температуры.

Благодаря тому что структура ВС определяет поляризацию излучаемой фотолюминесценции, исследование поляризационных зависимостей линий центров даёт информацию об их структуре. Были построены поляризационные зависимости интегральных спектров ФЛ и линий отдельных центров для различных поли типов. Эти эксперименты позволили определить параметры линий ВС и связать их с параметрами ОС.

Известно, что сверхтонкое взаимодействие в ВС в NV-центрах проявляется значительно интенсивнее [2]. В этой связи интерес представляет возможность динамической поляризации ядер, обусловленная перекрытием волновых функций.

Представленные закономерности дают существенное представление о структуре излучающего возбужденного состояния, которое может быть использовано для обработки квантовой информации на основе SiC для высокоскоростных когерентных оптических манипуляций с одиночными спинами, а также для протоколов запутывания.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00152)

Список литературы

1. Anisimov A. N. et al. High-temperature spin manipulation on color centers in rhombic silicon carbide polytype 21R-SiC // JETP Letters. – 2020. – Т. 112. – С. 774-779.
2. Fuchs G. D. et al. Excited-state spectroscopy using single spin manipulation in diamond // Physical review letters. – 2008. – Т. 101. – №. 11. – С. 117601.

Определение требований к оптической поверхности крупногабаритных зеркал системы сбора излучения диагностики ТР / ЛИФ в диверторе ИТЭР на основе анализа светорассеяния в зависимости от способа обработки

Терещенко И. Б.^{1,2}, Д.С. Самсонов^{1,2}, Е.Е. Мухин^{1,2}, А.Н. Коваль¹, Д.Л. Богачев¹, С.В. Солк³, В.В. Арутюнян³, А.П. Семенов⁴, А.Л. Худолей⁵, П.Н. Кумейша⁵, К.О. Николаенко¹, С.Ю. Толстяков¹, Г.В. Марчий¹, О.А. Григорьева⁶

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²АО «Спектрал-Тех»

³АО НИИ ОЭП

⁴АО ЛЗОС

⁵Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси

⁶Университет ИТМО

e-mail: *ivan-tereschenko1994@yandex.ru*

Собирающие системы оптических диагностик ИТЭР должны иметь долговременную оптическую стабильность в условиях значительных эксплуатационных, радиационных, тепловых и прочих нагрузок. В этой связи к зеркалам таких систем предъявляются высокие оптико-механические и климатические требования [1]. Одной из них является оптическая диагностика томсоновского рассеяния (ТР) в комбинации с лазерно-индуцированной флуоресценцией (ЛИФ) в диверторе ИТЭР.

Ввиду малого сечения взаимодействия зондирующего излучения с электронами, для обеспечения достаточного уровня полезного сигнала ТР необходимо зондировать плазму лазерным излучением высокой мощности и собирать рассеянное излучение в максимальном телесном угле. Поэтому для сбора рассеянного излучения диагностики ТР / ЛИФ используются 5 крупногабаритных высокоотражающих зеркал. Пропускание системы сбора в рабочем диапазоне 550-1100 нм диагностики ТР / ЛИФ определяется как отражением зеркала М1 (т.н. «первое» зеркало, находящееся в прямой видимости от плазмы), так и отражением зеркал М2-М5 («вторые» зеркала). На качество передачи рассеянного излучения на волоконные жгуты влияют две характеристики отражающих поверхностей зеркал:

1. Стабильность формы и пространственного положения;
2. Спектральные характеристики зеркального и диффузного отражения.

Отражательная способность зеркал определяется качеством поверхности зеркала и свойствами отражающего покрытия. В качестве материала крупногабаритных зеркал [2] первоначально рассматривался SiC, однако макет зеркала из него не прошел виброиспытания из-за высокой хрупкости материала. Так же существовала проблема развязки узла крепления при тепловом расширении из-за значительной разницы между коэффициентами теплового расширения карбида кремния и стали 316L(N)-IG, которая является основным конструкционным материалом диагностических рам. Вышеупомянутые недостатки, а также значительное и плохо контролируемое распухание материала в нейтронах, привели к отказу от SiC в качестве материала зеркал в пользу стали 316L(N)-IG. Создание крупногабаритных зеркал из нержавеющей стали 316L(N)-IG является достаточно новым подходом, и методы получения высококачественных оптических поверхностей в таком случае мало изучены.

Оптическое качество поверхности зависит от способа ее образования. Определять требуемое оптическое качество поверхности (профиль шероховатости) каждого зеркала для эффективной передачи излучения следует при с учетом анализа мощности излучения, диффузно рассеянного при передаче от одной отражающей поверхности к другой. Для этой задачи пригоден математический аппарат, в основе которого лежит двулучевая функция отражательной способности (ДФОС, англ. Bidirectional reflectance distribution function – BRDF), которая связана с функцией распределения рассеянного света (ФРПС, англ. Angle Resolved Scattering – ARS): $BRDF(\theta_s) = ARS(\theta_s)/\cos(\theta_s)$, где θ_s – а угол рассеяния. [3]. Распределение рассеянного света от θ_s определяется как отношение интенсивности света $\Delta P_s(\theta_s)$, рассеянного в телесный угол $\Delta\Omega_s$, к интенсивности входного потока P_i : $ARS(\theta_s) = \Delta P_s(\theta_s)/\Omega_s \Delta P_i$. При отражении света с длиной волны λ от поверхности и малой величине шероховатости по отношению к длине волны света ($\sigma/\lambda < 0.02$) ARS описывается формулой: $ARS(\theta_s) = \frac{16\pi^2}{\lambda^4} \cos\theta_i \cos^2\theta_s Q PSD(f)$, где θ_i – угол падения света на поверхность, θ_s угол рассеяния, $PSD(f)$ – двумерная спектральная плотность мощности, полученная при измерении поверхности AFM или PMI, а Q – коэффициент зеркального отражения поверхности.

Сравнивались образцы зеркал из нержавеющей стали 316L(N)-IG малого размера, поверхность которых образована абразивным полированием, магнитореологическим полированием, а также алмазным точением слоя меди, присоединенного к нержавеющей стали методом горячего изостатического прессования. Оценивалась эффективность отражающей поверхности каждого типа в составе системы сбора излучения диагностики ТР/ЛИФ в диверторе ИТЭР с учетом рассеяния.

Список литературы

1. Samsonov, D., Tereschenko, I., Mukhin, E., Gubal, A., Kapustin, Yu., Filimonov, V., Babinov, N., et al. “Large-Scale Collecting Mirrors for ITER Optical Diagnostic”. *Nuclear Fusion* 62, no. 8 (August 1, 2022): 086014. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ac544d>.
2. Mukhin, E., Semenov, V., Razdobarin, A., Tolstyakov, S., Kochergin, M., Kurskiev, G., Podushnikova, K., et al. “First Mirrors in ITER: Material Choice and Deposition Prevention/Cleaning Techniques”. *Nuclear Fusion* 52, no. 1 (January 1, 2012): 013017. <https://doi.org/10.1088/0029-5515/52/1/013017>
3. Schröder S., Duparré A., Coriand L., Tünnermann A., Penalver D., Harvey J. “Modeling of Light Scattering in Different Regimes of Surface Roughness”. *Optics Express* 19, no. 10 (May 9, 2011): 9820. <https://doi.org/10.1364/OE.19.009820>

Использование линейной поляризации фотолюминесценции для селективной регистрации ОДМР азотно-вакансионных центров в кристаллах алмаза

Скоморохов А. М.^{1,2}, Бабунц Р.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ²САФУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: *skomorokhov@mail.ioffe.ru*

Уникальные свойства азотно-вакансионных (NV) центров позволяют осуществлять оптическое детектирование магнитного резонанса (ОДМР) при комнатной температуре в нулевом и малых магнитных полях. NV-центры активно применяются в качестве сенсоров магнитного поля и температуры. Они также могут служить источником одиночных фотонов и материальной платформой для реализации высокоточной квантовой запутанности. В последнее время все большее внимание уделяется реализации квантовых вычислений на основе кубитов в NV-центрах. Для использования NV-центров в квантовых операциях и сенсорах одним из основных параметров является время когерентности, которое определяется как время спин-спиновой релаксации. На отрицательно заряженной азотной вакансии (NV⁻) локализовано шесть электронов. Центр имеет основное триплетное состояние, спиновые уровни которого селективно заселяются под действием оптического излучения [1]. NV-центры имеют четыре различных направления оси симметрии в кристаллической решетке алмаза, которые разрешаются во внешнем магнитном поле.

В работе исследованы поляризационные свойства фотолюминесценции и ОДМР NV⁻ центров в кристаллах алмаза. Эти свойства могут быть использованы для селективной регистрации сигналов ОДМР NV-центров в различных направлениях. Методика также может быть использована для увеличения контраста ОДМР. Были исследованы поляризационные свойства ОДМР в различных магнитных полях и продемонстрировано, что угловая зависимость степени линейной поляризации для NV⁻ центров обладает анизотропией, что может быть связано с кристаллографическими свойствами NV-центров. Такая анизотропия позволяет получить данные об ориентациях NV-центров и кристаллической симметрии кристалла, а также селективно изучать заданные направления путем изменения линейной поляризации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00152).

Список литературы

1. Braukmann D. et al., Anisotropies in the linear polarization of vacancy photoluminescence in diamond induced by crystal rotations and strong magnetic fields // *Physical Review B*. – 2018. – Т. 97. – №. 12. – С. 125426.

Коперативное безинверсионное сверхизлучение двух параллельных резонансных слоев, легированных трехуровневыми редкоземельными ионами, с дублетом в основном состоянии

Рыжов И. В.¹, Колобов А.В.¹, Строганова А.О.¹

¹Herzen State Pedagogical University

e-mail: igoryzhov@yandex.ru

В квазиклассическом приближении теоретически, пренебрегая квантовыми корреляциями между полем и излучающими центрами, рассматривается квазирезонаторный режим сверхизлучения двухслойной среды [1,2], легированной активными центрами, с Λ -схемой рабочих переходов. При этом начальная заселенность верхнего состояния варьировалась от полной его заселенности до режима сверхизлучения без инверсии включительно. Особый интерес представляет поведение системы в идеальном бездиссипативном состоянии, когда процесс выброса сверхлучистой энергии из двухслойной системы происходит максимально быстро по сравнению с релаксационными процессами активных центров. Представленная модель предполагает, что излучающее вещество находится в вакууме. Условия сверхизлучения рассматриваются, когда слои [3-5] приготовлены идентично (симметрично) друг другу. В этом режиме выявлены доминирующие резонансы и асимптотические закономерности нерезонансности среды по параметру, характеризующему расстояние между слоями. Данная модель предполагает аналитические закономерности как для линейной стадии процесса сверхизлучения, так и для режима сверхизлучения в условиях вырожденного дублета. В другом варианте рассматривались неодинаково приготовленные слои по концентрации в них активных излучающих центров. В этом режиме проявляется нарушение симметрии в резонансных свойствах системы. Отмечается смена резонансов и появление доминирующих длительных звонов сверхизлучения в областях близких к резонансным.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766).

Список литературы

1. Logvin, Yu. A., Samson, A. M., Volkov, V. M., Spatiotemporal light structures in a chain of bistable two-level medium thin-films, *Chaos, Solitons, Fractals*, 4, 1451, 1994.
2. Babushkin, I. V., Logvin, Yu. A., Loiko, N. A., Symmetry-breaking transverse solitons in a resonant bilayer, *J. Opt. B: Quantum Semi class Opt.*, 2, L15-L17, 2000.
3. Ryzhov I. V., Malikov R. F., Malyshev A. V., Malyshev V. A., Quantum metasurfaces of arrays of Λ -emitters for photonic nano-devices, *J. Opt.* 23, 115102, 2021.
4. Ryzhov I. V., Malikov R. F., Malyshev A. V., Malyshev V. A., Nonlinear optical response of a two-dimensional quantum-dot supercrystal: Emerging
5. multistability, periodic and aperiodic self-oscillations, chaos, and transient chaos, *Phys. Rev. A* 100, 033820, 2019.
6. Байрамдурдыев Д. Я., Маликов Р. Ф., Рыжов И. В., Мальшев В. А., Нелинейная оптическая динамика и высокая отражательная способность монослоя трехуровневых квантовых излучателей с дублетом в возбужденном состоянии, *ЖЭТФ*, том 158, вып. 2 (8), стр. 269–281, 2020.

Градиентная фазовая структура неорганических галоидных перовскитов

Батталова Э. И.¹, Фишман А.И.¹, Харинцев С.С.¹

¹Казанский федеральный университет

e-mail: *elbatt@rambler.ru*

Дефекты кристаллической решётки оказывают существенное влияние на оптические и электронные свойства полупроводников [1]. Точечные структурные дефекты выступают в роли оптических наноплазмонных антенн, способных увеличивать локальную плотность электромагнитных состояний. Концентрация дефектов в полупроводниках изменяется при фазовых переходах второго рода. Её можно настраивать путём контролируемого изменения температуры.

В настоящей работе демонстрируется градиентная фазовая структура микрокристаллов неорганических галоидных перовскитов CsPbBr₃, полученная с помощью термоплазмонной метаповерхности. Термоплазмонная метаповерхность представляет собой двумерный массив наноразмерных тепловых источников. Она позволяет создавать субволновые температурные профили за счёт локального оптического нагрева [2]. В рамках проведённого исследования показано, что управляемый оптический нагрев позволяет настраивать фазовую структуру перовскита. Неорганические перовскиты CsPbBr₃ испытывают два термоиндуцированных фазовых перехода: при 88°C происходит фазовый переход из орторомбической (Pnma) структуры в тетрагональную (P4/mbm); при 130°C тетрагональная структура переходит в кубическую (Pm3m) [3]. Кристалл перовскита, помещённый на термоплазмонную метаповерхность, может находиться в мультифазном состоянии. Это означает, что разные области кристалла отличаются симметрией кристаллической решётки. В такой системе наблюдается миграция носителей заряда из областей с низкой симметрией решётки в области с высокой симметрией решётки. Данный процесс способен увеличивать эффективность излучательной рекомбинации носителей заряда, благодаря чему усиливается квантовый выход фотолюминесценции. Подобные структуры могут быть использованы при разработке дисплеев, а также компактных широкополосных источников света.

Список литературы

1. Queisser H. J., Haller E. E., Defects in semiconductors: some fatal, some vital, *Science*, vol. 281, 945-950, 1998.
2. Kharintsev S. S. et al, Designing two-dimensional temperature profiles using tunable thermoplasmonics, *Nanoscale*, vol. 14, 12117-12128, 2022.
3. Alaei A. et al, Polymorphism in metal halide perovskites, *Mater. Adv.*, vol. 2, 47-63, 2021.

Исследование свойств ОДМР активных спеченых детонационных наноалмазов с NV-центрами, полученных без облучения и реализация магнитометрии на их основе

Учаев М. В.^{1, 2}, Лихачев К.В.^{2, 3}

¹НИУ ИТМО, ²ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ³САФУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: *uchaev.maximm@gmail.com*

Алмаз является одним из наиболее многообещающих минералов и имеет огромное прикладное значение в различных сферах человеческой деятельности. Анализ кристаллической структуры алмаза для этих целей проводится множеством различных физических методов, среди которых для определения свойств внутренних парамагнитных дефектов используются методы конфокальной спектроскопии и оптическое детектирование магнитного резонанса (ОДМР), которые позволяют проводить анализ с высоким пространственным разрешением. Среди парамагнитных дефектов в алмазе можно особенно выделить NV-центр, который образуется за счет встраивания отрицательно заряженного атома азота на место углерода и связывания с вакансией соседнего атома углерода. Данный центр обладает яркой люминесценцией в видимом спектральном диапазоне с нуль фонной линией 637 нм (1.945 эВ) и фонным крылом в красной области спектра. NV центры обладают уникальной особенностью оптического выстраивания спиновых состояний в нулевом магнитном поле при комнатной температуре, что в свою очередь позволяет регистрировать ОДМР с высоким пространственным разрешением. На основе NV-центров в алмазе реализуются квантовые вычисления [1], и изучение биологических объектов [2].

В рамках данной работы были описаны результаты исследования оптическими методами кристаллической структуры и состава микрокристаллических алмазов, полученных методом высокотемпературного спекания частиц детонационного наноалмаза (SDND) под высоким давлением, проведена модернизация АСМ-кантилевера SDND частицей и реализована магнитометрия с использованием модернизированного АСМ-кантилевера. Ярко выраженные азотно-вакансионные дефекты были охарактеризованы методом оптически детектируемого магнитного резонанса, который показал, что спиновые свойства полученных монокристаллов соответствуют высококачественным природным алмазам и превосходят синтетические алмазы, полученные из графита в присутствии металлических катализаторов с последующим облучением и отжигом.

Важным этапом данного исследования стало использование алмазов, полученных при высоком давлении и температуре (НРПТ) спеканием DND частиц в качестве наносенсоров. Кантилеверы атомно-силового микроскопа мотивировались путем фиксации частиц. Проверка успешности операции модификации проводилась при помощи построения карт распределения сигнала комбинационного рассеяния света алмаза и кремния (материал, из которого изготовлен сам зонд) с кончика зонда.

Одним из основных результатов данной работы является успешная регистрация сигнала ОДМР с кончика АСМ-кантилевера, модифицированного монокристаллом алмаза. Во внешнем магнитном поле наблюдается расщепление спектра ОДМР на четыре линии с одной стороны от центра (2.8 ГГц), соответствующие четырем ориентациям осей NV-центра. Положение

резонансных линий спектра ОДМР дает информацию о величине и направлении магнитного поля [3]:

$$f_{\pm} = D + 3\gamma_e^2 B^2 / 2D \cdot \sin^2(\theta_B) \pm \gamma_e B \cos(\theta_B) \cdot \sqrt{1 + \gamma_e^2 B^2 / 4D^2 \cdot \tan^2(\theta_B) \cdot \sin^2(\theta_B)}$$

Данное выражение дает оценку величины внешнего магнитного поля ~ 70 Г. В рамках данной работы также будет реализован программный код, способный автоматически определять ориентацию монокристалла на зонде, а также величину приложенного внешнего магнитного поля.

Схожесть спектров фотолюминесценции НРНТ со спектрами, присущим идеальному кристаллическому алмазу с заметным содержанием фотолюминесцирующих центров свидетельствует об эффективном формировании высококачественных монокристаллических алмазов размером 0,1-15 мкм путем спекания DND частиц размером 4-5 нм. Исследование ОДМР показало, что расщепление резонансной линии спеченных образцов SDND меньше, чем у НРНТ алмаза и приблизительно равно расщеплению резонанса в монокристалле природного алмаза. Таким образом, было показано, что качество синтезированных алмазов с NV-центрами выше, чем качество полученных ранее другими методами алмазов.

Исследование было выполнено при поддержке фонда РФФИ №20-52-76010 ЭРА_т

Список литературы

1. F. Kong, C. Ju, Y. Liu, et. al., Phys. Rev. Lett. 117.6, 060503 (2016).
2. R. Schirhagl, K. Chang, M. Loretz, C.L. Degen, Rev. Phys. Chem. 65.1, 83-105 (2014).
3. M. W. Doherty, et al. "Measuring the defect structure orientation of a single NV- centre in diamond" New Journal of Physics, DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063067

Температурные дисперсии показателей преломления и коэффициентов поглощения кристаллов тиогалата ртути в терагерцовом диапазоне частот

Строганова Е. В.¹, Бадиков Д.В.¹, Галуцкий В.В.¹

¹КубГУ

e-mail: *stroganova@kubsu.ru*

Кристаллы тиогалата ртути HgGa_2S_4 - традиционные нелинейно-оптические кристаллы для преобразования лазерного излучения в среднем ИК диапазоне. Расширения спектрального диапазона перестройки частоты лазерного излучения связано с исследованием условий согласования фазовых скоростей взаимодействующих волн и в ТГц диапазоне частот. В качестве объектов исследования выбраны образцы кристаллов тиогалата ртути, выращенные в Кубанском государственном университете методом Бриджмена-Стокбаргера. Образцы кристаллов представлены кристаллами желтого цвета стехиометрического состава с объемными и поверхностными центрами люминесценции на длинах волн 580 нм и 550 нм соответственно и образец оранжевого цвета нестехиометрического состава с избытком Ga_2S_4 с дополнительной полосой поглощения на 475 нм и появления новых центров рекомбинации и ловушек электронов.

Ранее авторами было показано, что наличие отклонения от стехиометрии в составе нелинейно-оптических кристаллов ниобата лития приводит к различиям в температурной зависимости показателей преломления взаимодействующих волн в ТГц диапазоне. Проводя исследования ТГц спектров поглощения и преломления кристаллов тиогалата ртути различного состава в температурном диапазоне 300-400 К обнаружено изменение показателей преломления для кристаллов в зависимости от их стехиометрии. Для оранжевых (нестехиометрических) и стехиометрических образцов $\Delta n/\Delta T$ изменяется более чем в два раза от $0,31 \cdot 10^{-3}$ до $0,13 \cdot 10^{-3}$ K^{-1} . Коэффициент поглощения исследуемых образцов тиогалата ртути в диапазоне 0,3-1,25 ТГц составил менее 20 см^{-1} . Изменение показателя преломления исследуемых образцов тиогалата ртути в диапазоне 0,3-1,25 ТГц составило 3,42-3,55 при $T=300 \text{ К}$.

Работа поддержана проектом FZEN-2023-0006.

Список литературы

1. Галуцкий В.В., Ивашко В.С., Температурные дисперсии показателей преломления и коэффициентов поглощения кристаллов ниобатов калия и лития, активированных ионами иттербия, эрбия и хрома, в терагерцовом диапазоне частот, Оптический журнал, том. 87, 62-68, 2020
2. Badikov V.V., Don A.K., Mitin K.V., Seregin A.M., Sinaiskii V.V., Schebetova N.I., A HgGa_2S_4 optical parametric oscillator, Quantum Electronics, v. 33(9), 831, 2003.
3. Badikov V.V., Don A.K., Mitin K.V., Seregin A.M., Sinaiskii V.V., Schebetova N.I., Shchetinkina T.A., Optical parametric mid-IR HgGa_2S_4 oscillator pumped by a repetitively pulsed Nd : YAG laser, Quantum Electronics, v. 37(4), 363-365, 2007.

Самоостановка света в однородной двухуровневой резонансной среде

Архипов Р. М.^{1,2}, М.В. Архипов¹, И.В. Бабушкин³, Н.Н. Розанов^{1,2}

¹СПбГУ

²ФТИ им. А. Ф. Иоффе

³Institute of Quantum Optics, Leibniz University Hannover and Cluster of Excellence PhoenixD, Hannover, Germany

e-mail: *arkhipovrostislav@gmail.com*

С момента появления первых лазеров было обнаружено множество нелинейно-оптических явлений, при которых взаимодействие лазерного излучения и вещества приводит к значительной локализации световой энергии в пространстве и времени — самофокусировке света, пространственно-временным оптическим солитонам и т. д. [1-2]. Все такие локализованные структуры распространяются с соответствующей групповой скоростью, которая не так уж далека от скорости света в среде.

Фотоны, имеющие ненулевую массу покоя, не могут быть остановлены, однако взаимодействие света с веществом могут привести к образованию поляритонной структуры с близкими к нулю групповыми скоростями вблизи резонансов атомной среды [3]. При этом с помощью явления электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) было достигнуто значительное замедление света до нескольких метров в секунду в холодном газе [4], а также наблюдалась полная остановка при выключении поля накачки [5]. Для достижения значительного снижения групповой скорости с помощью подходов, основанных на ЭИП, импульс должен располагаться как можно точнее в точке минимальной групповой скорости на дисперсионной кривой. Необходимым условием для этого, конечно, является то, что импульс должен иметь чрезвычайно узкий спектр и, как следствие, очень большую длительность.

Если ЭИП можно рассматривать как линейный эффект, то уменьшение скорости распространения импульса может возникать и за счет нелинейного когерентного взаимодействия света с веществом, когда импульсы самоиндуцированной прозрачности (СИП), 2π импульсы, могут распространяться без потерь в поглощающей среде [6]. В этом случае скорость достаточно длинных многопериодных импульсов может быть существенно снижена. Однако существенно снизить скорость малоцикловых импульсов с помощью подходов СИП и ЭИП в резонансной среде невозможно. С другой стороны, в неоднородных средах свет также может замедляться и даже останавливаться [7].

В данном докладе, основанном на недавней публикации авторов [8] теоретически демонстрируется возможность самоостановки мало- и одноцикловых световых импульсов в однородной двухуровневой резонансной среде. В этом случае в среде формируется структура нового типа, которую мы называем "осциллоном". Это связанная структура света и вещества, которая колеблется во времени без движения в пространстве. Он возникает в сильно нелинейном режиме распространения малоцикловых импульсов в среде. Рассмотренное явление остановки света отличается от явлений известных СИП и ЭИП.

Список литературы

1. R. W. Boyd, "Nonlinear optics". The 4th edition, Academicpress, 2020.
2. Yu. S. Kivshar, G. P. Agrawal, "Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals", Academic Press, 2003.

3. M. Fleischhauer, M. D. Lukin, "Dark-state polaritons in electromagnetically induced transparency", Phys. Rev.Lett. V. 84, p. 5094, 2000.
4. L. V. Hau, S. E. Harris, Z. Dutton, and C. H. Behroozi, "Light speed reduction to 17 metres per second in an ultracold atomic gas", Nature, V. 397, p. 594, 1999.
5. Ch. Liu, Z. Dutton, C. H. Behroozi, and L. V. Hau, "Observation of coherent optical information storage in an atomic medium using halted light pulses", Nature, V. 409, p. 490, 2001.
6. S. L. McCall, E. L. Hahn, "Self-induced transparency", Phys. Rev. V. 183, p. 457, 1969.
7. R. H. Goodman, R. E. Slusher, and M. I. Weinstein, "Stop-ping light on a defect", JOSA B, 19, 1635 (2002).
8. M. Arkhipov R. Arkhipov, I. Babushkin, and N. Rosanov, "Self-stopping of light", Physical Review Letters 128 (20), 203901 (2022).

Изготовление и расчет параметров планарных диффузионных волноводов в лазерном стекле ГЛС-6

Пустовалов А. В.¹, Гурьев Д.А.², Николаев Н.Э.¹, Равин А.Р.¹, Цветков В.Б.², Чехлова Т.К.¹

¹РУДН, Россия

²Научный центр лазерных материалов и технологий ИОФ РАН, Россия

e-mail: *alpz@mail.ru*

Твердотельные волноводные лазеры на основе активных стекол и кристаллов находят применение в таких областях науки и техники, как оптические системы связи, спектроскопия, радиофотоника и др. Они позволяют осуществлять генерацию как в непрерывном режиме, так и в режиме ультракоротких импульсов. На их основе создаются оптические частотные гребёнки, компактные, высокостабильные генераторы СВЧ-диапазона, устройства частотной и временной оптической рефлектометрии и др. [1].

Наиболее распространенной технологией изготовления волноводов в активных стёклах является ионообменная диффузия, обеспечивающая низкий уровень потерь $\sim 0,1$ дБ/см [2]. При этом для создания волноводного слоя стекло выдерживается в расплаве солей KNO_3 , $NaNO_3$, $AgNO_3$ при температурах 220–450°C. Зарубежные производители выпускают специализированные типы активных стёкол для создания ионообменных волноводных структур: Schott IOG-1, IOG-10 и др. По данной технологии получены оптические волноводы с низкими потерями в силикатных неодимовых стёклах отечественного производства ГЛС-2, ГЛС-3, КГСС026 [3].

Однако не все типы стекла обладают необходимым химическим составом и стойкостью для осуществления ионного обмена. В работе [4] исследовалась возможность формирования ионообменных волноводов в стекле ГЛС-10 при различных составах и температурах расплава. При этом изготовленные волноводы имели высокие потери. Волноводы хорошего качества были получены с помощью твердотельной диффузии оксида свинца PbO в стекло, однако в работе не приведены значения их оптических потерь.

В настоящей работе нами исследовалась возможность применения технологий ионного обмена и твердотельной диффузии PbO для получения оптических волноводов в силикатном стекле ГЛС-6.

Ионный обмен в стекле ГЛС-6 проводился в расплавах KNO_3 и $AgNO_3$ в диапазоне температур 360–420°C и 220–245°C соответственно. Время процесса варьировалось от 60 до 240 минут. При этом волноводные слои получить не удалось.

Методом твердотельной диффузии оксида свинца в стекло были изготовлены волноводы с потерями от 5,5 дБ/см до 0,2 дБ/см в зависимости от времени диффузии и толщины пленки оксида свинца.

Для теоретического расчета коэффициентов замедления волноводных мод использовались дисперсионные уравнения градиентного волновода, полученные в приближении ВКБ и модельная функция с гауссовским распределением показателя преломления, соответствующая классической задаче диффузии из бесконечно тонкого источника [5]. По

измеренным коэффициентам замедления при различных временах диффузии, были вычислены параметры модели.

Список литературы

1. Choudhary, A., Kannanet, P., Lagatsky, A. A., Beecher, S.J. Ultrafast High-Repetition-Rate Waveguide Lasers // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. — 2015.
2. Jean-Emmanuel Broquin, Seppo Honkanen. Integrated Photonics on Glass: A Review of the Ion-Exchange Technology Achievements // Appl. Sci. — 2021. — No. 11. — P. 4472.
3. Бабукова, М. В., Никоноров, Н. В., Петровский, Г. Т. и др. Исследование диффузионных волноводов на неодимовых силикатных стеклах // Квантовая электроника. — 1985. — Т. 12, № 9. — С. 1973–1975.
4. Никитин, В. А., Святенко, Н. В., Яковенко, Н. А. Получение интегрально-оптических волноводов в лазерном стекле методами ионного обмена и твердотельной диффузии // Автометрия. — 2003. — № 2.
5. Аникин, В. И., Горобец, А. П., Половинкин, А. Н. Характеристики плоских оптических волноводов, изготовленных методом твердотельной диффузии // Квантовая электроника. — 1978. — Т. 5, № 1. — С. 181–184.

Стеклообразный сульфид мышьяка, легированный переходными металлами: структура и свойства.

Провоторов П. С.¹, Крбал М.², Фрумарова Б.², Колобов А. В.¹

¹РГПУ им. А.И. Герцена

²Университет Пардубице

e-mail: *p.provotorov95@yandex.ru*

Открытие халькогенидных стеклообразных полупроводников Коломийцем Б.Т. и Горюновой Н.А. в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе в середине 1950-х годов положило начало новому направлению физики – физики неупорядоченных полупроводников, которое активно изучаются до сих пор. Особенность полупроводниковых свойств халькогенидных стекол определяется наличием неподеленных пар электронов в валентной зоне. Эти электроны не участвуют в связях, но чувствительны к воздействиям температуры [1], фотонов [2] и т.д. Последние годы привлекают огромный интерес дихалькогениды переходных металлов, которые в пределе монослоя становятся прямозонными полупроводниками, а также обладают чрезвычайно большим коэффициентом преломления в коротковолновом диапазоне [3]. В тоже время об аморфных халькогенидах, содержащих переходные металлы, известно мало. С целью восполнить этот пробел в настоящей работе представлено исследование тонких пленок As_2S_3 , модифицированного Mo и W.

Пленки были получены на стеклянной подложке методом центрифугирования (спин-коатинга). Оптические свойства полученных пленок измерялись методом спектрофотометрии в диапазоне длин волн от 200 нм до 1600 нм. Процесс формирования пленок и их структура изучались методом комбинационного рассеяния света и методом нарушенного полного внутреннего отражения [4].

Показано, что модификация переходными металлами сульфида мышьяка приводит к существенному изменению свойств стекла, в частности к повышению термической стабильности стекол на более, чем 200 градусов, уменьшению ширины запрещенной зоны [5], а также уменьшению фотоотклика (фотоструктурные превращения) что связано с уменьшением концентрации неподеленных пар при легировании переходными металлами.

Обсуждаются области потенциальных применений халькогенидных стекол, легированных переходными металлами.

Работа выполнена в рамках совместного международного проекта, поддержанного РФФИ и Чешским научным фондом (грант РФФИ - 19-53-26017, грант ЧНФ - 20-23392J).

Список литературы

1. Nemanich R.J., Connell G. A.N., Hayes T.M., Street R.A. Thermally induced effects in evaporated chalcogenide films. I. Structure // Physical Review B., Vol. 18., № 12., P. 6900 (1978).
2. Tanaka K. Photoinduced structural changes in amorphous semiconductors. // Semiconductors, Vol. 32(8), pp. 861–866., (1998).
3. Kolobov A.V., Tominaga J., Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenides. // Springer, Cham (2016).
4. M. Krbal, V. Prokop, V. Cervinka, S. Slang, B. Frumarova, J. Mistrik, P. Provotorov, M. Vlcek, A. V. Kolobov, The structure and optical properties of amorphous thin films along the As_40S_60 - MoS_3 tie-line prepared by spin-coating. // Materials Research Bulletin, Vol. 153, P. 111871 (2022).

5. Provotorov, P.S., Avanesyan, V.T., Krbal, M., Kolobov, A.V. Effect of doping of molybdenum on the optical properties of glasses of the As—S system. // *Physics of Complex Systems Vol. 2*, pp. 115–121. (2021).

Исследование Ван-дер-Ваальсовых полупроводников GaS и GaSe, легированных марганцем, методом высокочастотного ЭПР

Батуева А. В.^{1,2}, Бабунц Р.А.¹, Гурин А.С.¹, Лихачев К.В.^{1,2}, Единач Е.В.¹, Баранов П.Г.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²САФУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: batueva@mail.ioffe.ru

Слоистые Ван-дер-Ваальсовы монохалькогениды третьей группы, в частности сульфид галлия GaS и селенид галлия GaSe, считаются крайне перспективными для различных областей электроники. Благодаря большой ширине запрещенной зоны, параметрами которой можно управлять путем подбора количества монослоев, а также комбинацией слоев разных материалов, такие 2D полупроводники могут использоваться в оптоэлектронике видимого и УФ диапазонов [1,2]. При этом представляется важным детальное изучение зарядового состояния и электронной структуры собственных и примесных дефектов, неизбежно возникающих при синтезе, так как они оказывают определяющее влияние на электрические, оптические и магнитные свойства [3]. Легирование переходными металлами слоистых полупроводников для управления их свойствами предполагается использовать в спинтронике и валлитронике. Переходный металл преимущественно образует глубокие уровни в широкозонном материале, таким образом можно получить полуизолирующий или магнитный материал.

В настоящей работе экспериментально исследуются свойства парамагнитных центров в объемных образцах слоистых GaS:Mn и GaSe:Mn на высокочастотном ЭПР/ОДМР-спектрометре [4] на частотах 94 и 130 ГГц и температуре 6 К, разработанном в ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Спектры фотолюминесценции и комбинационного рассеяния для характеристики образцов получены на конфокальном микроскопе, выполненном на базе микроскопа NT-MDT SI.

Зарегистрированы спектры ЭПР пар Mn^{2+} (Mn_2^{4+}), замещающих ковалентно связанные пары Ga_2^{4+} и находящихся в центре слоя GaS:Mn. Параметры тонкой структуры нижнего мультиплета со спином $S=5$ определены равными $D=430$ $G=402 \cdot 10^{-4}$ $см^{-1}$. Наличие в спектрах дополнительных линий в области магнитного поля, соответствующей пересечению уровней энергии мультиплетов $S=5$ и $S=4$, позволило оценить энергию изотропного обменного взаимодействия J как ~ -0.5 $см^{-1}$. Для всех переходов наблюдалась хорошо разрешенная сверхтонкая структура, обусловленная взаимодействием с двумя эквивалентными ядрами ^{55}Mn . Спектры образцов GaSe:Mn и GaS:Mn включают линии от единичных ионов Mn^{2+} в разных позициях.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 23-12-00152).

Список литературы

1. X. Li, L. Tao, Z. Chen, H. Fang, X. Li, X. Wang, J.-B. Xu, and H. Zhu, "Graphene and related two-dimensional materials: Structure-property relationships for electronics and optoelectronics," *Appl. Phys. Rev.* 4(2), 021306 (2017).
2. Y. Gutiérrez, M. M. Giangregorio, S. Dicorato, F. Palumbo, M. Losurdo, Exploring the Thickness-Dependence of the Properties of Layered Gallium Sulfide, *Frontiers in Chemistry* 9, 781467 (2021)
3. G. D. Watkins, *Radiation Damage in Semiconductors*, Academic Press, New York (1965)
4. E. V. Edinach, Yu. A. Uspenskaya, A. S. Gurin, R. A. Babunts, H. R. Asatryan, N. G. Romanov, A. G. Badalyan, and P. G. Baranov, *Phys. Rev. B* 100, 104435 (2019)

Темные оптические состояния в сплошной метаповерхности на границе периодической фотонной структуры

Валитова А. Ф.^{1,2}, Газизов А. Р.^{1,2}, Салахов М. Х.^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет

²Академия наук Республики Татарстан

e-mail: valaigul94@gmail.com

В настоящее время метаповерхности с периодической фотонной структурой демонстрируют высококачественные резонансы, основанные на физике связанных состояний в континууме, лежащем в основе многих интересных явлений в фотонике. Связанные состояния в континууме это темные (оптически неактивные) резонансы, вследствие которых возникает локализация света в электромагнитном поле внутри структуры, чтобы усилить взаимодействие света с веществом [1-3].

В нашей работе исследуются оптоплазмонные материалы с фотонной запрещенной зоной. В результате моделирования получены дисперсионные соотношения для сплошной метаповерхности Au и Ag с периодической фотонной структурой. Специфическое поведение дисперсионных кривых, полученное при численном моделировании, открывает возможность управления дисперсией мод. Мы предполагаем о наличии дополнительных темных оптических состояний в рассматриваемых нами структурах.

Мы считаем, что предсказанные эффекты внесут вклад в производство высококачественных резонансных фотонных систем, такие как чувствительные сенсоры, датчики на основе темных оптических состояний. Большие значения добротности позволят увеличить время взаимодействия между светом и веществом на порядки величин. Гибридные моды, образованные взаимодействием фотонной и плазмонной составляющих, могут компенсировать высокие диссипативные потери металлических компонентов, поддерживая высокую локализацию поля. Изучение плазмонных свойств и дисперсии мод позволят оптимизировать параметры структуры для ее экспериментальной реализации.

Список литературы

1. Bernhardt N., Koshelev K., White S. J. and et al. Quasi-BIC resonant enhancement of second-harmonic generation in WS₂ monolayers, *Nano Lett.*, 20, 5309-5314, 2020.
2. Lochner F. J., George A., Koshelev K. and et al. Hybrid dielectric metasurfaces for enhancing second-harmonic generation in chemical vapor deposition grown MoS₂ monolayers, *ACS Photonics*, 8, 218-227, 2021.
3. Azzam S. I., Shalaev V. M., Boltasseva A., Kildishev A. V. Formation of Bound States in the Continuum in Hybrid Plasmonic-Photonic Systems, *Physical review letters*, 121, 253901, 2018.

Гигантское комбинационное рассеяние света в нанорезонаторе с близкой нулю диэлектрической проницаемостью

Газизов А. Р.^{1,2}, Салахов М.Х.^{1,2}

¹КФУ

²Академия наук Республики Татарстан

e-mail: eq.uusmet.e.o.res@gmail.com

Прогресс в производственных и цифровых технологиях и дизайне новых материалов в настоящее время трудно представить без управления взаимодействием фотонов с одиночными нанообъектами. Наноструктуры, в которых возбуждаются плазмонные резонансы, позволяют локализовать энергию электромагнитного поля и усилить оптический отклик одиночных молекул на несколько порядков по величине. Плазмонные нанорезонаторы привлекают внимание как платформа для различных сенсоров, для реализации усиленной оптической спектроскопии, оптоэлектронных устройств захвата света, фотохимии, дизайна оптических материалов и микроскопии сверхвысокого разрешения[1,2]. Приведенные выше успехи в микроскопии стали доступны в экзотических условиях криогенных температур и сверхвысокого вакуума при использовании атомно-гладкой поверхности подложки и суб-нанометрового зазора. Параметр оптомеханической связи металлических зазоров на 4-5 порядка превышает параметр традиционных оптомеханических микрорезонаторов, что теоретически позволяет добиться нелинейного колебательного отклика от одиночной молекулы[3]. В отличие от них, одиночные плазмонные частицы обладают низкой добротностью, вследствие того, что металлы имеют омические потери в видимой и ближней инфракрасной области. Поэтому в условиях комнатных температур для колебательной спектроскопии плазмонные частицы используют в сочетании с диэлектрическими резонаторами, у которых модовый объем намного больше области локализации молекулы. Особое значение нанорезонаторы приобретают в оптомеханике молекул, в частности для оптического охлаждения с помощью антистоксова комбинационного рассеяния.

В данной работе мы предлагаем использовать в нанорезонаторе материал с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью. С одной стороны эти среды позволяют снизить оптические потери и обладают уникальными свойствами, такими как малая групповая и большая фазовая скорость, большая оптическая нелинейность[4]. С другой стороны, плазмонные частицы позволяют передать внутрь такой среды больше энергии за счет согласования поверхностных импедансов. В работе проводится моделирование усиленного комбинационного рассеяния в зазоре между плазмонной наночастицей и подложкой с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью. Исследован спектр комбинационного рассеяния в зависимости от действительной части диэлектрической проницаемости материала и поляризацией ближнего поля наночастицы. Показано, что при достижении условия равенства ее действительной части нулю происходит дополнительное усиление комбинационного рассеяния. Также решающее влияние оказывает объем когерентности колебания. Отдельно проведено моделирование вынужденного комбинационного рассеяния внутри материала подложки.

Использование нанорезонаторов с материалом с близкой нулю диэлектрической проницаемостью в спектроскопии комбинационного рассеяния позволяет управлять его модовым объемом, увеличить чувствительность и наблюдать такие оптомеханические эффекты как охлаждение и колебательная накачка, фонанный лазер, оптомеханическая квантовая запутанность и др.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№21-72-00052).

Список литературы

1. Li G.-C., et al., Plasmonic particle-on-film nanocavities: a versatile platform for plasmon-enhanced spectroscopy and photochemistry, *Nanophotonics*, vol. 7, 1865-1889, 2018.
2. Lee J., et al., Visualizing vibrational normal modes of a single molecule with atomically confined light, *Nature*, vol. 568, 78–82, 2019.
3. Roelly P., et al., Molecular cavity optomechanics as a theory of plasmon-enhanced Raman scattering, *Nat. Nanotechnol.* vol.11, 164–169, 2015.
4. Liberal I., Engheta N., Near-zero refractive index photonics, *Science* vol. 358, 1540, 2017.

Оценка качества решения задачи диагностики солевого состава водных сред по спектрам комбинационного рассеяния света с применением методов машинного обучения для различных методов предобработки данных

Утегенова Л. С.¹, Сарманова О.Э.^{1,2}, Лаптинский К.А.^{1,2}, Буриков С.А.^{1,2}, Доленко Т.А.^{1,2}, Гуськов А.А.², Исаев И.В.^{2,3}, Доленко С.А.^{1,2}

¹МГУ им. М.В. Ломоносова

²НИИЯФ МГУ

³Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН

e-mail: utegenova.ls20@physics.msu.ru

В настоящее время проблема контроля концентрации ионов тяжелых металлов в водных природных средах является актуальной задачей в области экологии и медицины [1]. В данной работе решение задачи определения концентрации ионов тяжелых металлов в водных средах по спектрам комбинационного рассеяния (КР) света реализовано с использованием различных методов машинного обучения.

Регистрируемые спектроскопические данные содержат шумы из разнообразных источников, не связанные с изменением состава или свойств исследуемых образцов. Эти отклонения могут быть вызваны механическими изменениями, шумами в системе регистрации (нестабильность мощности лазера, изменения в оптической фокусировке), тепловым шумом или изменением влажности окружающей среды. Для повышения качества решения обратной задачи и нивелирования влияния указанных негативных шумовых эффектов в данной работе к данным перед дальнейшим анализом были применены различные методы предварительной обработки.

Влияние процедур предобработки данных исследовано на базе спектров КР растворами неорганических солей $Zn(NO_3)_2$, $ZnSO_4$, $Cu(NO_3)_2$, $CuSO_4$, $LiNO_3$, $Fe(NO_3)_3$, $NiSO_4$, $Ni(NO_3)_2$, $(NH_4)_2SO_4$, $NH_4(NO_3)$ в различных водах. Так, в базе содержится 3744 спектра КР образцов с ненулевой концентрацией солей в дистиллированной воде и 400 спектров растворов солей в воде из реки Москва. Концентрация катионов варьируется в диапазоне от 0 до 1 М.

Для изучения влияния различных методов предобработки входных данных на качество решения указанной обратной задачи использовались следующие статистические методы нормировки данных: на минимальное/максимальное значение интенсивности КР, Z – преобразование. Кроме того, в работе рассмотрены различные методы предобработки данных, основанные на физических принципах: вычитание флуоресцентного пьедестала, корректировка на оптическое поглощение растворов, корректировка на площадь валентной полосы воды в спектрах КР, а также их различные комбинации. Представлены результаты сравнительного анализа применения каждого способа предобработки данных при решении задачи определения концентрации ионов неорганических солей в водных растворах по спектрам КР с помощью различных методов машинного обучения: многослойных перцептронов, градиентного бустинга, случайного леса, линейной регрессии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-11-00333, <https://rscf.ru/project/19-11-00333/>.

Список литературы

1. P.B. Tchounwou, C.G. Yedjou, A.K. Patlolla, and D.J. Sutton, 2012, "Heavy metal toxicity and the environment", Molecular, clinical and environmental toxicology, Springer, Basel, 133-164. https://doi.org/10.1007/978-3-7643-8340-4_6
2. Simon Haykin // NEURAL NETWORKS: A Comprehensive Foundation. Second Edition // Prentice Hall, Inc., 1999

Polariton graphene as a simulator of skew scattering and ratchet effect

Коняхин С. В.¹, О. Bahrova¹

¹Institute for Basic Science, Center for Theoretical Physics of Complex Systems

e-mail: *kon@mail.ioffe.ru*

Ratchet effect is the appearance of a directed particle flux under external stochastic or periodic field [1]. The flux is nonlinear with respect to the magnitude of the driving force. The studies of ratchet effects are important both for the fundamental physics, because such effects are deeply related with the issues of second law of thermodynamics, and for the future device applications [2].

The artificial optical lattices including their realizations in etched microcavities with strongly coupled photons and excitons have been extensively studied in recent years, exhibiting important interest and potential applications in topological photonics, relativistic physics, quantum electrodynamics and optical vortex generation [3]. The polariton realizations of artificial 2D crystals are remarkable due to full control of wave function evolution including fine engineering the initial state and measuring time dynamics of its amplitude and phase. Therefore the microscopic insight into the phenomena inaccessible for electrons in conventional atomic 2D crystals becomes possible.

In present paper we theoretically study the skew scattering [4] and ratchet effect manifestations in photonic graphene with the coherently oriented defects of the symmetry of equilateral triangle. By using this system we obtain the full microscopic insight into the physics of skew scattering on the single $C3v$ symmetry defect as in the previously studied case of real graphene [5]. We consider the angular dependencies of scattering and obtain the asymmetric scattering rates for various defects obeying the $C3v$ symmetry. Finally, we demonstrate the manifestation of ratchet effect as the transversal flux under various types of noise-like excitation.

References

1. E. Ivchenko and S. Ganichev, JETP Letters **93**, 673 (2011).
2. P. Hanggi and F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
3. A. V. Nalitov, D. D. Solnyshkov, and G. Malpuech, Phys. Rev. Lett. **114**, 116401 (2015).
4. V. I. Belinicher and B. I. Sturman, Physics-Uspekhi **23**, **199** (1980).
5. S.V. Koniakhin, The European Physical Journal B **87**, Article number: 216 (2014).

Спектральные характеристики каскадных фотонно-кристаллических структур с междоменными дефектами

Глухов И. А.^{1,2}, Моисеев С. Г.^{1,2}

¹Ульяновский государственный университет

²Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

e-mail: *glukhov91@yandex.ru*

Слоисто-периодические структуры, известные также как фотонно-кристаллические структуры (ФКС), обладают свойством селективно пропускать и отражать отдельные спектральные составляющие электромагнитного излучения. Спектральные характеристики ФКС определяются сочетанием применяемых материалов, а также его топологией. В спектре пропускания таких структур имеется фотонная запрещенная зона (ФЗЗ) – диапазон частот, в котором отсутствует пропускание при высоком коэффициенте отражения. В ФЗЗ могут быть сформированы одна или несколько относительно узких полос пропускания. Обычно эти полосы пропускания присутствуют в спектрах ФКС с нарушенной периодичностью следования слоёв, тогда их называют «дефектные» моды. Особенности спектральных характеристики ФКС учитываются при разработке отражателей, фильтров, мультиплексоров и других элементов оптики и оптоэлектроники.

Для расширения возможностей по контролю спектральных характеристик ФКС применяются диэлектрические и плазмонные метаслои, композитные материалы [1], жидкокристаллические материалы [2] и др. Альтернативный подход заключается в варьировании топологии ФКС, например, за счет внесения неоднородности в распределение показателя преломления и толщины слоёв по длине ФКС. Аподизированные (с изменяющимся по длине ФКС профилем модуляции показателя преломления) и чирпованные (с отличающейся по длине ФКС толщине слоёв) ФКС позволяют модифицировать ширину и положение ФЗЗ, резонансные частоты и количество дефектных мод [3].

В настоящей работе исследована зависимость дефектных мод от параметров ФКС со ступенчатым (каскадным) профилем изменения периода брэгговских зеркал. Рассмотрены моды, возникающие благодаря наличию дополнительного (дефектного) слоя между парой брэгговских зеркал с отличающимся периодом. Отражательная и пропускная способности фотонной структуры рассчитаны с помощью метода матрицы переноса. Расчеты проведены для оптического и ближнего инфракрасного спектральных диапазонов.

Выявлены общие зависимости дефектных мод от структурных параметров каскадного ФКС. Общее число дефектных мод в ФЗЗ определяется числом доменов в каскаде. С увеличением числа доменов количество дефектных мод возрастает, при этом их амплитуда уменьшается. Количество интенсивных дефектных мод различается в каскадных ФКС с четным и нечетным числом доменов: если в первом случае наиболее интенсивной является пара соседних мод, то во втором – одна мода. Исследована также зависимость спектральных характеристик от величины периода структуры в доменах и толщины дефектных слоёв на границах доменов. Взаимное расположение дефектных мод в спектральной области определяется в большей степени разностью периодов структуры доменов, в то время как положение их общего центра определяется толщиной дефектных слоёв. Выявленные особенности спектральных характеристик каскадных ФКС могут быть полезны при разработке элементов в составе интегрально- и волоконно-оптических схем для управления оптическим излучением.

Список литературы

1. Moiseev, S. G. Spectra from a photonic crystal structure with a metallic nanoparticle monolayer / S. G. Moiseev, I. A. Glukhov, V. A. Ostatochnikov, A. P. Anzulevich, and S. N. Anzulevich // *J. Appl. Spectrosc.* – 2018. – 85. – С. 511–516.
2. Zyryanov, V. Ya. Magnetic-field tunable defect modes in a photonic-crystal/liquid-crystal cell / V. Ya. Zyryanov, S. A. Myslivets, V. A. Gunyakov, A. M. Parshin, V. G. Arkhipkin, V. F. Shabanov, W. Lee // *Opt. Express.* – 2010. – V. 18. – P. 1283-1288.
3. Renilkumar, M., Properties of defect modes in geometrically chirped one-dimensional photonic crystals / M. Renilkumar, Prita Nair // *Optical Materials.* – 2011. – V. 33. – Issue 6. – P. 853-858.

Лазерная диагностика обратных микроэмульсий в процессе синтеза наночастиц

И.В. Пластинин¹, Т.А. Доленко¹

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: *plastinin_ivan@mail.ru*

Активное применение наноматериалов в медицине, энергетике, экологии и других областях науки и промышленности [1] требует синтеза наночастиц определённых размеров и форм, которые влияют на физико-химические свойства конечного продукта. Именно поэтому сегодня активно развиваются разнообразные методы синтеза наночастиц. Среди множества существующих методов синтеза наночастиц можно выделить синтез в обратных микроэмульсиях, который позволяет получать наночастицы с узким распределением по размерам. Сейчас для синтеза наночастиц определённых форм и размеров обычно варьируют параметры реакционной среды (температуру, концентрации веществ) и параметры экспериментальной установки. О результатах можно судить только после прекращения синтеза, многостадийных процессов очистки наночастиц и характеристики наночастиц различными методами. Несмотря на развитие разнообразных методов синтеза, способов непрерывного мониторинга процессов, происходящих в реакционной среде, и методов определения параметров наночастиц практически нет. Таким образом, разработка метода дистанционного контроля размеров синтезируемых наночастиц в режиме реального времени является весьма актуальной задачей. Лазерная спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) является дистанционным и очень информативным методом, который позволяет в режиме реального времени исследовать свойства и взаимодействия компонентов раствора [2], а также обеспечивает успешное количественное решение обратных задач лазерной спектроскопии [2].

В данной работе с помощью спектроскопии КР проведено исследование мицеллярных нанореакторов с синтезируемыми в них наночастицами. Изучена динамика взаимодействия компонентов реакционной среды в процессе синтеза наночастиц. Предложен метод определения размеров и формы наночастиц в микроэмульсиях по калибровочным зависимостям спектральных характеристик полос КР микроэмульсий. Полученные результаты позволяют разработать бесконтактный и экспрессный метод диагностики реакционной среды в процессе синтеза в них наночастиц.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-72-01057, <https://rscf.ru/project/23-72-01057/>.

Список литературы

1. L. Đorđević, F. Arcudi, M. Cacioppo, M. Prato, A multifunctional chemical toolbox to engineer carbon dots for biomedical and energy applications, *Nat. Nanotechnol.* 17 (2022) 112–130. <https://doi.org/10.1038/s41565-021-01051-7>
2. I.V. Plastinin, S.A. Burikov, T.A. Dolenko, Laser diagnostics of self-organization of amphiphiles in aqueous solutions on the example of sodium octanoate, *Journal of Molecular Liquids.* 317 (2020) 113958. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113958>

Применение формализованного моделирования для интерпретации полос поглощения ИК-спектров

Камалова Н. С.¹, Матвеев Н.Н.¹, Лисицын В.И.¹, Евсикова Н.Ю.¹, Внукова С.В.¹,

¹ФГБОУ ВО ВГЛТУ имени Г.Ф. Морозова

e-mail: *rcamel@yandex.ru*

Исследование пористых гетероструктур природного происхождения сопряжено с рядом трудностей, связанных с их многокомпонентностью, анизотропией и неупорядоченностью надмолекулярной матрицы. Одним из способов наблюдения за изменением их микроструктуры является ИК-спектроскопия. Однако, существующие базы математических способов распознавания спектров биоконпозитов не решают все возникающие проблемы интерпретации полос, т.к. они претерпевают существенные изменения в зависимости от состава гетероструктуры и условий ее формирования. Для анализа спектрограмм требуется разработка методов с использованием формализованного моделирования профилей полос поглощения [1-3]. В докладе предлагается моделировать профиль полосы поглощения с помощью функции Гаусса для детализации изменений ИК-спектрограмм при увеличении влажности в порах гетероструктуры до предела ее гигроскопичности на примере древесины березы. Концепция основывается на том факте, что в сложном объекте природного происхождения из-за наличия самоорганизующихся матриц колебания в межмолекулярных связях носят комплексный характер, а полосы поглощения кроме основной частоты (или волнового вектора) характеризуются некоторой дисперсией. При этом выводы об изменениях состава или микроструктуры биоконпозитов основываются на анализе таких спектральных характеристик, как положение максимума полосы (k_0), ее полуширина (σ) и интенсивность (или амплитуда I_i). Функция Гаусса, которая характеризуется тремя похожими по смыслу параметрами, идеально подходит для описания профиля полосы. Для выявления наиболее общих изменений, вызванных увеличением влажности до предела гигроскопичности в порах древесины, в работе рассматривается изменение профиля двугорбой полосы поглощения в области 2300-2400 см^{-1} [2-3], соответствующей колебаниям диоксида углерода CO_2 . Профиль полосы моделировался тремя функциями Гаусса :

$$\frac{I}{I_{\max}} = \frac{I_1 \exp\left(-\frac{(k-k_1)^2}{2\sigma_1^2}\right) + I_2 \exp\left(-\frac{(k-k_2)^2}{2\sigma_2^2}\right) - I_3 \exp\left(-\frac{(k-k_3)^2}{2\sigma_3^2}\right)}{I_{\max}},$$

где I_1 , k_1 , σ_1 , I_2 , k_2 , σ_2 – интенсивность, положение и полуширина горбов полосы соответственно, а I_3 – описывает падение интенсивности поглощения в районе волнового вектора k_3 с полушириной σ_3 , I_{\max} – максимальная интенсивность в выбранном участке спектра. В компьютерной модели анализировалась относительная интенсивность с целью детализации именно изменений профиля полосы. Параметры модели определялись с помощью критерия эффективности Нэша-Сатклиффа (ME), достигающего максимальной величины $ME = 0,97-0,98$ как для спектров сухой древесины березы, так и после достижения предела гигроскопичности. Это соответствует высокому уровню адекватности модели при однозначно определяемых параметрах гауссовых кривых[4-5].

Проведенный анализ изменения профиля полосы, соответствующей колебаниям в молекуле диоксида углерода CO_2 , выявил существенное увеличение полуширины первого горба

(практически в два раза) при уменьшении интенсивности полосы поглощения в целом. При этом наблюдается существенное снижение вклада колебаний с волновым вектором k_2 и увеличение вклада колебаний с волновым вектором k_1 в профиль полосы, а ее положение практически не меняется. Таким образом, использование формализованного моделирования с помощью функций Гаусса позволяет детализировать изменение в ИК-спектрограммах гетероструктуры природного происхождения при увеличении влажности в ее порах до предела гигроскопичности.

Список литературы

1. 1. Камалова Н.С., Постников В.В., Физические основы модифицирования древесины: монография, М-во науки и высшего образования РФ, ФГБОУ ВО «ВГЛУ», Воронеж, 2019, 164 с.
2. Жбанков Р.Г. Инфракрасные спектры целлюлозы и ее производных. Минск, 1964, 338 с.
3. 3. Камалова Н.С., Саушкин В.В., Евсикова Н.Ю., Анализ ИК спектрограмм древесины методом моделирования формы полос поглощения // Сорбционные и хроматографические процессы. 2021. Т. 21. № 1. С. 86.
4. 4. Nash J.E., Sutcliffe J.V., Riverflow forecasting through conceptual models part I-A discussion of principles // J. Hydrology. 1970. V. 10. No 3. P.282.
5. Арнольд В.И. «Жесткие» и «мягкие» математические модели, Москва: МЦНМО, 2004, , 32 с.

Изучение механизмов взаимодействия NiO_x с графеновым слоем: рентгеновская спектроскопия поглощения

Шматко В. А.¹, Дмитриев В.О.¹, Стеблецова Е.С.¹, Яловега Г.Э.¹
¹ЮФУ

e-mail: vashmatko@sfedu.ru

Композиты на основе углеродных наноматериалов и оксидов переходных металлов обладают уникальными физическими и химическими свойствами, что делает их подходящими для использования в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов и других применений. Свойства композитов могут зависеть от взаимодействия атомов металла и углерода. В работе проведено моделирование возможных механизмов взаимодействия NiO_x с графеновым слоем нанотрубки на основе теоретической интерпретации ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения XANES (X-ray absorption near edge structure) композитов NiO_x/МУНТ (многостенных углеродных нанотрубок).

Измерения спектров поглощения XANES К-края никеля композитов NiO_x/МУНТ проводились путем регистрации выхода рентгеновской флуоресценции на станции КМС-2 синхротронного центра BESSY II (HZB, Германия, Берлин), а спектров NEXAFS К-края углерода и L_{2,3}-краев никеля путем регистрации полного электронного выхода в Российско-Германской лаборатории (RGL) синхротронного центра BESSY II (HZB, Германия, Берлин).

Сравнительный анализ экспериментальных NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure) спектров К-края углерода чистых многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и композитов на основе углеродных нанотрубок и оксидов никеля, показал появление в спектрах композита новых особенностей, вероятно связанных с взаимодействием NiO_x с графеновым слоем нанотрубки при формировании композита [1, 2]. В тоже время XANES спектр К-края никеля композита NiO_x/МУНТ при сравнении со спектрами стандартных соединений (NiO, Ni₂O₃, Ni(OH)₂) показывает наибольшее сходство со спектром NiO [2] позволяет утверждать, что преимущественное валентное состояние никеля в композитах 2+. Однако отличия спектров кристаллического NiO и композита говорит о изменениях в локальной структуре Ni при формировании композита.

Проведен расчет спектров рентгеновского поглощения XANES за К- и L_{2,3}- краями никеля для различных структурных моделей возможных механизмов взаимодействия никеля с графеновым слоем нанотрубки и спектров рентгеновского поглощения XANES за К-и L_{2,3}- краями никеля с использованием программного комплекса FDMNES в полном потенциале, методом многократного рассеяния, размер расчетного кластера составлял 7 Å. Для построения структурных моделей вместо многостенной углеродной нанотрубки была взята одностенная, чтобы уменьшить количество атомов в расчётах и сделать структурные модели менее затратными в вычислительном отношении. С помощью программы Nanotube Modeler была получена одностенная углеродная хиральная нанотрубка диаметром 50 Å, с индексами хиральности (55,15). Октаэдры NiO₆, вырезанные из структуры объемного NiO, были помещены рядом с графеновым слоем стенки трубки с наружной и внутренней стороны, рассмотрены три положения октаэдра: атом никеля расположен над центром углеродного гексагона, атом никеля расположен над атомом углерода и атом никеля расположен над связью углерод-углерод.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459,
<https://rscf.ru/project/23-22-00459/>

Список литературы

1. V.A. Shmatko, A.A. Ulyankina, N.V. Smirnova, G.E. Yalovega., *Optics and Spectroscopy*, 2018, 124 (4), 478-482.
2. V. Shmatko, D. Leontyeva, N. Nevzorova, N. Smirnova, M. Brzhezinskaya, G. Yalovega., *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 2017, 220, 76-80.

Спектральные характеристики фотонно-кристаллической структуры с монослоем металлических наночастиц

Глухов И. А.^{1,2}, Моисеев С. Г.^{1,2}

¹Ульяновский государственный университет

²Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

e-mail: *glukhov@enib.fr*

Фотонно-кристаллические структуры (ФКС) являются предметом интенсивных исследований на протяжении десятков лет. Благодаря периодической модуляции показателя преломления в ФКС в его спектре пропускания наблюдается фотонная запрещенная зона (ФЗЗ) – частотный интервал, в котором электромагнитные волны не могут проходить через структуру. Это свойство представляет интерес для практических применений в оптике и фотонике, поскольку позволяет контролировать характеристики оптического излучения. Варьируя геометрические и материальные параметры фотонной структуры, можно значительно расширить их функциональные возможности. Например, нарушение периодичности структуры приводит к появлению спектрально узких полос пропускания в ФЗЗ, а использование материалов с изменяемым оптическим откликом (за счет их нелинейных, резонансных, магнитооптических и др. свойств) позволяют управлять как шириной запрещенной зоны, так и положением полос пропускания в ФЗЗ.

Новые эффекты могут быть получены благодаря включению в ФКС металлодиэлектрических нанокомпозитных сред. Так, например, металлические наночастицы (НЧ), упорядоченные в виде двумерных или трехмерных массивов, могут модифицировать амплитуду и фазу электромагнитной волны, частота которой близка к плазмонному резонансу НЧ [1,2]. Спектры пропускания таких массивов зависят от материала, размера, формы НЧ, а также от расстояния между НЧ. Использование композитных сред с несферическими металлическими НЧ может обеспечить более гибкий контроль спектральных характеристик структуры [3]. В данной работе показана возможность модифицирования спектральных характеристик диэлектрического ФКС в оптической и ближней ИК спектральных областях с помощью 2D массива (монослоя) металлических наночастиц, размещенного в поверхностном слое.

Наночастицы формируют упорядоченный двумерный массив (монослой) с квадратной ячейкой. Все наночастицы имеют форму эллипсоидов одинакового размера, а их полярная ось направлена перпендикулярно плоскости монослоя и совпадает с направлением оси стратификации ФКС. Размеры наночастиц и период решетки монослоя много меньше длины волны в среде, в которой расположен массив наночастиц. Отражательная и пропускная способности многослойной фотонной структуры рассчитаны при помощи модифицированного метода матриц переноса. В этом методе монослой наночастиц рассматривается как нефренелевский интерфейс со специфической матрицей переноса через интерфейс [3].

Показано, что единичный монослой серебряных наночастиц размером 4-8 нм и межчастичным расстоянием порядка 10 нм может приводить к практически полному подавлению отражения и, как следствие, поглощению падающего излучения в узкой спектральной полосе в видимой или ближней ИК области (в зависимости от спектральных характеристик материалов в составе ФКС). Положение полосы поглощения в области частот ФЗЗ фотонной структуры зависит от аспектного отношения наночастиц: для вытянутых наночастиц полоса поглощения смещается в сторону более коротких длин волн, а для сплюснутых – больших длин волн. Подбор материалов

ФКС и аспектного отношения наночастиц позволяет построить узкополосный поглощающий фильтр для наперед заданных частот из видимой или ближней ИК областей спектра. Рассмотренная модель частотного фильтра и поглотителя в сочетании с другими недавно предложенными решениями (основанными на использовании жидких кристаллов или материалов, свойства которых могут управляться магнитным или электрическим полем) будет полезна при разработке сенсоров, поляризаторов и других элементов фотоники, интегральной и волоконной оптики.

Список литературы

1. Dadoenkova Y., Glukhov I., Moiseev S., Svetukhin V., Zhukov A., Zolotovskii I., Optical generation in an amplifying photonic crystal with an embedded nanocomposite polarizer // *Optics Communications*, V. 389, pp. 1-4 (2017).
2. Gerasimov V. S. , Ershov A. E. , Bikbaev R. G. , Rasskazov I. L. , Timofeev I. V. , Polyutov S. P. , and Karpov S. V. , Engineering mode hybridization in regular arrays of plasmonic nanoparticles embedded in 1D photonic crystal // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* // V.224. pp. 303–308 (2019).
3. Moiseev S. G., Glukhov I. A., Dadoenkova Y. S., Bentivegna Florian F. L. \"Polarization-selective defect mode amplification in a photonic crystal with intracavity 2D arrays of metallic nanoparticles,\" *JOSA B*, V. 36, No. 6, pp. 1645-1652 (2019).

Применение время-разрешенной люминесцентной спектроскопии для разработки термосенсора на основе наноконплексов $\text{NaYF}_4:\text{Yb:Tm}$

Буриков С. А.¹, Федянина А.А.¹, Филиппова Е.А.¹, Доленко Т.А.¹

¹МГУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: *sergey.burikov@gmail.com*

В последнее время наноконплексы на основе ионов лантаноидов вызывают большой интерес благодаря возможности реализации для них режима антистоксовой (апконверсионной) люминесценции при инфракрасном возбуждении [1]. Это открывает широкие возможности для их использования в различных, прежде всего, биомедицинских, приложениях, так как отсутствует проблема выделения сигнала фотолюминесценции наночастиц на фоне собственной люминесценции биологической среды.

Наноконплексы на основе лантаноидов состоят из кристаллической матрицы, легированной специально подобранными ионами редкоземельных элементов. Один из них (сенсбилизатор), обладающий большим сечением поглощения, поглощает возбуждающее излучение инфракрасного диапазона и затем передает возбуждение на другой ион (активатор), обладающий интенсивной люминесценцией в видимом диапазоне. В качестве сенсбилизаторов часто выступают ионы иттербия, в качестве активаторов – ионы тулия. Спектр люминесценции такого типа частиц состоит из набора полос в видимой и ближней инфракрасной области спектра. Интересной особенностью конплексов, легированных тулием, является то, что некоторые полосы люминесценции тулия чувствительны к изменению температуры. Это открывает возможность создания наноразмерного сенсора температуры.

В качестве параметров, чувствительных к изменению температуры, выступают обычно интенсивность выбранной полосы люминесценции или соотношение интенсивностей полос люминесценции с термически связанных уровней. Построив соответствующую калибровочную зависимость, можно определять локальную температуру окружающей среды с достаточно высокой точностью. На сегодняшний день основной проблемой является то обстоятельство, что интенсивность люминесценции конплексов сложным нелинейным образом зависит от интенсивности возбуждающего излучения. Это приводит к тому, что точность определения температуры падает при переходе от одного объекта к другому (например, от водной суспензии к биологической среде) [2]. Для каждого конкретного случая необходимо строить свою калибровочную зависимость, что ограничивает универсальность предлагаемого сенсора.

В представленной работе предлагается использовать для определения локальной температуры с помощью наноконплексов $\text{NaYF}_4:\text{Yb:Tm}$ кинетические кривые люминесценции тулия при наносекундном лазерном возбуждении. Эти кривые имеют достаточно сложную форму – есть участки нарастания сигнала и его затухания. Изменение температуры влияет на процессы переноса энергии между сенсбилизаторами и активаторами, а также на эффективность безызлучательной релаксации возбужденных состояний, что дает принципиальную возможность определения температуры.

Использование в качестве чувствительных к изменению температуры параметров времен нарастания и затухания сигнала разных полос люминесценции тулия существенно расширяет

возможности применения термосенсоров на основе комплексов лантаноидов. Предложенный подход апробирован на водных суспензиях комплексов $\text{NaYF}_4:\text{Yb:Tm}$.

Список литературы

1. Auzel. Upconversion and Anti-Stokes Processes with f and d Ions in Solids. // *Chemical Reviews*, 2004, 104(1): 139–173.
2. O.E. Sarmanova, S.A. Burikov, K.A. Laptinskiy, O.D. Kotova, E.A. Filippova, T.A. Dolenko. In vitro temperature sensing with up-conversion $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+}/\text{Tm}^{3+}$ -based nanocomposites: Peculiarities and pitfalls // *Spectrochim. Acta Part A*, 241 (2020), 118627.

Механизмы тушения фотолюминесценции углеродных точек катионами металлов

Вервальд А. М.¹, Чугреева Г. Н.¹, Лаптинский К. А.¹, Власов И. И.¹, Доленко Т. А.¹

¹МГУ им. М.В.Ломоносова

²ИОФ РАН

e-mail: *alexey.vervald@physics.msu.ru*

Фотолюминесцентные углеродные точки (УТ) имеют широкие перспективы применения в разных областях технологий и биомедицины в качестве дешёвых оптических маркеров и наносенсоров окружения. Наносенсорика на базе УТ обусловлена тем, что источником их интенсивной и стабильной фотолюминесценции является их поверхность, свойства которой изменяются при взаимодействии УТ с окружением. Одним из таких приложений является создание наносенсора катионов металлов для использования, например, в технологических средах или в биомедицине. Однако на данный момент не известны ни точные механизмы формирования фотолюминесценции УТ, ни механизмы влияния ионов металлов на неё.

В данной работе для выяснения механизмов тушения фотолюминесценции УТ ионами металлов были исследованы взаимодействия УТ, синтезированных гидротермальным методом из смеси этилендиамина и лимонной кислоты в пропорции 1:1, с ионами нитратов металлов Mg^{2+} , Cr^{3+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+} , Pb^{2+} в воде. Растворы УТ с концентрацией ионов, изменяющейся в диапазоне 0.1 – 10 мМ, были исследованы методами фотолюминесцентной спектроскопии, фотометрии, время-разрешённой спектроскопии, рН-метрии, были измерены дзета-потенциалы наночастиц во всех образцах. Кроме того, особенности взаимодействия УТ с ионами металлов были исследованы с помощью метода молекулярной динамики с использованием SPC-E/OPLS-AA.

Установлено, что фотолюминесценция исследованных УТ обусловлена, как минимум, двумя люминофорами с разными временами жизни уровней. Все ионы одинаковым образом влияют на фотолюминесценцию УТ, однако степень этого влияния для разных ионов значительно отличается. Ионы железа наиболее сильно тушат фотолюминесценцию УТ, в первую очередь, за счёт эффекта внутреннего фильтра. Из остальных ионов наибольшее влияние на УТ оказывают Co^{2+} , Cu^{2+} и Cr^{3+} , наименьшее – Mg^{2+} и Zn^{2+} . На основании сравнительного анализа концентрационных зависимостей различных параметров УТ для разных ионов и результатов численного моделирования определены механизмы тушения флуоресценции УТ.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-12-00138, <https://rscf.ru/project/22-12-00138/>

Список литературы

1. Иванов А. А., Очень известная статья, Цитируемый журнал, том. 17, 142-150, 2003
2. Сидоров К. К., Основополагающая статья, Высокоцитируемый журнал, том. 234, 212-219, 1999 г.

Изучение структуры активных центров медьсодержащих цеолитов с использованием спектроскопии рентгеновского поглощения и элементов машинного обучения

Гладченко-Джевелекис Я. Н.¹, Ермакова А. М.¹, Сухарина Г. Б.¹, Поносова Е. Е.¹, Богданов В. А.¹, Шеметова Э. И.¹,
Прядченко В. В.¹, Авакян Л. А.¹, Бугаев Л. А.¹
¹ЮФУ

e-mail: ygl@sfedu.ru

В сфере разработок эффективных катализаторов реакции окисления метана до метанола одной из основных задач является исследование атомного строения активных металл-кислородных центров, поскольку именно они определяют каталитическую активность материалов [1-4]. Поскольку такие центры имеют сложное атомное строение ближнего окружения атомов меди и неравномерно распределены в каркасе цеолита, то понимание взаимосвязи синтез-структура-каталитическая активность требует подробного изучения структуры таких центров с использованием больших вычислительных и временных ресурсов.

В данной работе для определения параметров локальной атомной структуры медных центров в цеолитах использовались рентгеноспектральная диагностика и элементы машинного обучения. Получены модели локальной атомной структуры медных центров цеолитов типа морденит, для которых методом конечных разностей в программном комплексе FDMNES выполнены расчеты Cu K-XANES спектров. Сформирована база данных, включающая в себя XANES спектры, рассчитанные для многочисленных моделей активных центров меди. На основе рассчитанных данных обучена искусственная нейронная сеть, позволяющая прогнозировать структурные параметры моделей атомной структуры меди в цеолитах по данным XANES. Данный подход демонстрирует хорошую согласованность между полученной структурной информацией и имеющимися спектроскопическими данными для цеолита типа морденит.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00438.

Список литературы

1. E. M. C. Alayon, M. Nachtegaal, A. Bodi, M. Ranocchiari and J. A. van Bokhoven// *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. 17. P7681T.
2. S. Grundner, W. Luo, M. Sanchez-Sanchez, J. A. Lercher// *Chem Commun.* 2016. 52 (12). 2553–2556.
3. S. E. Bozbag, E. M. C. Alayon, Jan Pecháček, Maarten Nachtegaal, Marco Ranocchiari, Jeroen A. van Bokhoven// *Catalysis Science and Technology* 6(13), с. 5011-5022(2016).
4. E. R., Vanelderen P., Schoonheydt R. A., Sels B. F., Solomon E. I// *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 29, 9236–9243

Минимизация поглощения импульсов излучения в разреженном газе

Гладкий А. А.¹, Розанов Н.Н.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *gladjkij.aa@edu.spbstu.ru*

Согласно нелинейнооптическому эффекту самоиндуцированной прозрачности, импульс электромагнитного излучения с определённой формой огибающей распространяется в среде со значительной концентрацией атомов с минимальными потерями энергии. В случае двухуровневой среды (среды состоящей из атомов, в которых возможен переход между двумя энергетическими состояниями – основным и возбуждённым, с известной частотой перехода) этот механизм заключается в следующем: передний фронт такого импульса переводит атомы в возбуждённое состояние, передавая свою энергию среде, тогда как при дальнейшем распространении импульса возбуждение снимается и энергия возвращается из среды обратно в импульс, восстанавливая его первоначальную форму. Форма такого импульса была определена С. Мак-Коллом и Э. Ханом [1].

В астрофизических средах с низкой концентрацией стандартные условия реализации эффекта самоиндуцированной прозрачности нарушаются. В настоящем сообщении мы демонстрируем, как трансформируется этот эффект при распространении импульсов в атомном газе с низкой концентрацией.

Как и в [1], среда моделируется двухуровневой схемой и принимается однородное уширение (низкие температуры). При фиксации энергии импульса и несущей частоты мы плавно варьируем форму огибающей, от «идеальной» (найденной в [1]), до также колоколообразной, но с изменённым профилем – гауссовым, лоренцевским и др. Оказывается, что минимальные потери достигаются именно в случае «идеального» профиля, отвечающего классическому импульсу самоиндуцированной прозрачности. Результаты могут быть полезными для оптимизации транспортировки лазерного или мазерного излучения на значительные расстояния в космосе.

Список литературы

1. S. L. McCall and E. L. Hahn, Self-Induced Transparency by Pulsed Coherent Light, Phys. Rev. Lett. 18, 908, 1967

Размерные эффекты в полимерных 2D ограниченных наноструктурах

Казанцева А. В.¹, Харинцев С.С.¹

¹Казанский Федеральный Университет

e-mail: *nastyakazantseva13@gmail.com*

Двухфотонная полимеризация прямой лазерной записи (ДФП) является методом позволяющим создавать трёхмерные микроструктуры различного архитектурного дизайна с поразительной точностью [1]. Физико-химические свойства ДФП микрообъектов кардинально отличаются от свойств полимерных макрообъектов: проявляются флуктуация степени конверсии, изменение температуры стеклования [2].

В данной работе визуализированы и исследованы свойства наноразмерных полимерных структур. Для изучения степени конверсии полимерной наноструктуры использовался метод гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР), позволяющий достичь субдифракционного пространственного разрешения в оптической спектроскопии [3]. Благодаря этому методу впервые именно нашей командой задетектирована неоднородная заполимеризованность ДФП структуры на наномасштабе. Термохимические свойства полимерной нанодорожки были исследованы методом термометрии комбинационного рассеяния света. Для решения проблемы дефокусировки системы во время нагрева образца была разработана система обратной связи состоящая из хуэ-пьезосканера, дихроичного зеркала, светоделителя, фотоумножителя и контроллера. Таким образом, была измерена локальная температура стеклования полимерной 2D ограниченной наноструктуры. Выяснено, что пространственное ограничение полимера может приводить к уменьшению температуры стеклования в 4 раза по сравнению со сплошной средой.

Данные эксперимента указывают на влияние размерного эффекта на физико-химические свойства структуры. Результаты исследований могут быть использованы при создании микрофлюидных ячеек для реализации компактных биосенсоров.

Список литературы

1. Maruo S, Fourkas J T, Recent progress in multiphoton microfabrication, Laser Photonics Review, V 8, N 2. 100-111, 2008
2. Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах, 352, 2010
3. Kazantseva A.V. et al, Nanoscale investigation of two-photon polymerized microstructures with tip-enhanced Raman spectroscopy, Journal of Physics: Photonics, V 3, N 2, 024001, 2021

Оптоэлектронные приборы

Длинноволновые ($\lambda_{0.5} = 9 \div 12 \text{ мкм}$) ИК фотоприемники на основе твердого раствора InAsSb_x ($0.3 < x < 0.45$)

Кунков Р. Э.¹, Климов А.А.¹, Лебедева Н.М.¹, Лухмырина Т.С.¹, Матвеев Б.А.¹, Ременный М.А.¹, Усикова А.А.¹
¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: romunkov@yandex.ru

Фотоприемники, работающие в длинноволновой ИК области спектра (8-14 мкм), являются ключевыми компонентами как тепловизионных и тепlopеленгационных систем, так и газоаналитического оборудования для детектирования опасных газов, таких как зарин, зоман, табун в системах безопасности жизнедеятельности или галогенсодержащих ингаляционных анестетиков в медицинском оборудовании. Существующая элементная база длинноволновых фотоприемников представлена в основном тепловыми приемниками, способными работать при комнатной температуре и фотонными фотоприемниками на основе как полупроводников группы $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ (КРТ) [1], работающими при термоэлектрическом или криогенном охлаждении, так и на основе квантоворазмерных гетероструктур – сверхрешеток [2] на основе полупроводников группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, также требующих криогенного охлаждения.

Для успешного применения длинноволновых ИК фотоприемников необходима возможность их работы без криогенного охлаждения с параметрами быстродействия и обнаружительной способности – лучшими, чем у тепловых приемников, при этом сохраняя конкурентоспособность по цене.

Фотоприемники на основе диодных гетероструктур с активным слоем из твердых растворов полупроводника $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ являются перспективной альтернативой как наиболее распространенным фотоприемникам на основе полупроводников КРТ, так и развивающимся фотоприемникам из полупроводников $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ на основе сверхрешеток. В первую очередь, их отличает значительно более низкая стоимость при параметрах, сравнимых с лучшими коммерчески доступными аналогами на основе КРТ. Помимо этого, твердые растворы InAsSb имеют более высокие подвижности носителей заряда по сравнению с КРТ, а также позволяют достигать более высоких значений токовой чувствительности по сравнению с фотоприемниками на основе сверхрешеток. В зависимости от химического состава активного слоя, фотоприемники из InAsSb могут работать как в средневолновой (3 – 5 мкм) [3], так и длинноволновой (8 – 14 мкм) инфракрасной области спектра [4].

В докладе мы приводим результаты исследования эпитаксиальных p-n гетероструктур и ФД с поглощающим слоем из $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$, выращенных на подложке n-InAs (100) ($n=2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$), работающих от температур, достижимых при помощи термоэлектрического охлаждения, до повышенных и обладающих максимумом спектральной фоточувствительности около $\lambda = 8 \text{ мкм}$ и длинноволновой границей $\lambda_{0.1}$ около 10,5 мкм (300 К).

В ходе работы были проанализированы вольт-амперные характеристики, спектры фотоответа и электролюминесценции полученных экспериментальных образцов в диапазоне температур 200 ÷ 400 К, а так же проведено сравнение параметров с образцами, результаты исследования которых были опубликованы ранее [5].

Показано, что экспериментальные образцы фотодетекторов характеризуются токовой чувствительностью, равной 0,4 А/Вт при комнатной температуре. При понижении температуры, токовая чувствительность растет и превышает 1 А/Вт уже при 250 К, что достижимо при помощи термоэлектрического холодильника. Гетероструктуры характеризуются диффузионным механизмом токопротекания в диапазоне температур 200 ÷ 300 К. Детектирующие способности в максимуме имеют значение не менее $D_{8\text{ }\mu\text{m}}^* = 1,5 \cdot 10^9$ Джонс при комнатной температуре, что более чем в полтора раза выше значений, опубликованных ранее.

Список литературы

1. A. Rogalski, "Recent progress in HgCdTe infrared detector technologies", *Infrared Physics & Technology*, 2011, Vol. 54, No. 3, P. 136–154.
2. D. H. Wu, A. Dehzangi, Y. Y. Zhang, M. Razeghi "Demonstration of long wavelength infrared type-II InAs/InAs_{1-x}Sb_x superlattices photodiodes on GaSb substrate grown by metalorganic chemical vapor deposition", *Appl. Phys. Lett.*, 2018, Vol. 112, No. 24, Article No: 241103, 4 p.
3. N.D. Il'inskaya, S.A. Karandashev, A.A. Lavrov, B.A. Matveev, M.A. Remennyi, N.M. Stus', and A.A. Usikova, "P-InAsSbP/p-InAs_{0.88}Sb_{0.12}/n-InAs_{0.88}Sb_{0.12}/n⁺-InAs PDs with a smooth p-n junction", *Infrared Physics & Technology* 88 (2018) 223–227
4. R.E. Kunkov, A.A. Klimov, N.M. Lebedeva, T.C. Lukhmyrina, B.A. Matveev, M.A. Remennyi "Photoelectric properties of heterostructures based on InAsSb_x solid solutions (0.3 <x <0.35)", *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, 1851(1), 012019.
5. A.A. Klimov, R.E. Kunkov, A.A. Lavrov, N.M. Lebedeva, T.C. Lukhmyrina, B.A. Matveev, M.A. Remennyi, "Long-wave infrared InAs_{0.6}Sb_{0.4} photodiodes grown onto n-InAs substrates", *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, 1695(1), 012077.

Токовый разогрев структур на основе p-InAsSbP/n-InAs_{0.9}Sb_{0.1}

Лухмырина Т. С.¹, Закгейм А. Л.², Карандашев С. А.¹, Климов А. А.¹, Кунков Р. Э.¹, Матвеев Б. А.¹, Ременный М. А.¹, Черняков А. Е.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²НТЦ микроэлектроники РАН

e-mail: h7k9g00@gmail.com

Характеристики полупроводниковых свето- и фотодиодов (СД и ФД) среднего инфракрасного (ИК) диапазона спектра (2.5 – 6 мкм) на основе узкозонных полупроводников A_3B_5 , имеющих ряд важных практических приложений, существенным образом зависят от температуры, и вопрос разогрева ИК диодов при протекании тока широко обсуждается в литературе. При рассмотрении токового разогрева диодов при прямом (режим СД) или обратном (режим ФД) смещениях, вопрос о природе разогрева обычно опускался, что затрудняет понимание потенциальных возможностей тех или иных диодов.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований и численного анализа распределения температуры в диодных тройках (диодных линейках 1x3), на основе двойных гетероструктур p-InAsSbP/n-InAs_{0.9}Sb_{0.1} ($\lambda = 4.7$ мкм), выращенных на подложках n-InAs (100) и смонтированных на керамических платах по методу флип-чип. Значения температуры на поверхности диодной тройки при активации одного из диодов были получены с помощью калиброванного инфракрасного микроскопа УТК1 [1], разработанного в Институте физики полупроводников СО РАН, и расчетным путем.

В расчетах полагалось, что при прямом смещении диоды на основе p-InAsSbP/n-InAsSb имели низкий внутренний квантовый выход ($IQE < 1\%$), и практически вся поданная на них электрическая мощность преобразовывалась в тепло вследствие безызлучательной Оже-рекомбинации, электрон-фононного взаимодействия и Джоулева нагрева [2]. В первых двух случаях тепло выделяется при передаче энергии инжектированных носителей фононам, в третьем, выделение тепла происходит на последовательном сопротивлении диода, состоящем из сопротивления контактных площадок диода (анода и катода) и ростовой подложки.

Проведенный анализ показал, что для правильной интерпретации данных, полученных при повышенных температурах при обратном смещении, приведенных выше механизмов преобразования электрической энергии недостаточно, и необходим учет работы, затрачиваемой на «электронное» охлаждение p-n перехода.

Список литературы

1. Bazovkin V. M., Mzhel'skii I. V., Kuryshv G. L., Polovinkin V. G. "Infrared scanning microscope with high spatial resolution", *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, **47** (5), p. 498 (2011).
2. Закгейм А.Л., Карандашев С.А., Климов А.А., Кунков Р.Э., Лухмырина Т.С., Матвеев Б.А., Ременный М.А., Усикова А.А., Черняков А.Е. "К вопросу о механизмах разогрева светодиодов на основе p-InAsSbP/n-InAs(Sb)", *ФТП*, **57** (1), p. 42 (2023)

Формирование твердых растворов InGaN для источников излучения в ближней ИК области на длине волны 0.85-1 мкм

Калинников М. А.¹, Д.Н. Лобанов, К.Е. Кудрявцев, Б.А. Андреев, П.А. Юнин, А.В. Новиков, Е.В. Скороходов, З.Ф. Красильник

¹Институт физики микроструктур Российской академии наук

e-mail: kalinnikov@ipmras.ru

Для современных систем связи и отображения информации необходимы эффективные оптоэлектронные устройства, работающие в широком спектральном диапазоне. Потенциальным материалом в качестве основы для устройств, способных работать во всем видимом диапазоне, а также ближней ИК области спектра, является нитрид индия-галлия (InGaN). В настоящее время устройства на основе InGaN с небольшой долей In демонстрируют высокую квантовую эффективность в сине-зеленой области спектра [1]. Вследствие отсутствия коммерчески доступных согласованных подложек для эпитаксии III-нитридов в структурах с слоями InGaN с высоким и средним содержанием In наблюдается высокая плотность дислокаций, а вследствие термодинамической нестабильности в слоях InGaN наблюдаются фазовый распад, разложение и металлические включения [2].

В настоящее время коллективом авторов данной работы была успешно продемонстрирована возможность получения однородных оптически активных планарных структур InGaN с содержанием In $\geq 50\%$ [3], а на структурах с слоями InGaN содержанием In $\geq 75\%$ впервые было получено стимулированное излучение в ИК диапазоне [4]. При уменьшении содержания In в InGaN с 80% до 50% для продвижения в видимую красную область спектра, интенсивность сигнала спонтанной фотолюминесценции снижается в ~ 3 раза, что связывалось с ухудшением общего кристаллического качества [3]. Стимулированное излучение в образцах с InGaN с содержанием In $< 70\%$ не наблюдалось. Таким образом, для слоев InGaN «средних» составов необходима оптимизация ростовых параметров для формирования высококачественных структур, что позволит улучшить излучательные свойства.

В докладе представлены результаты исследований роста и оптических свойств эпитаксиальных слоев InGaN с содержанием In $\sim 60-65\%$, выращенных на GaN/AlN/c-Al₂O₃ методом молекулярно-пучковой эпитаксией с плазменной активацией азота (ПА-МПЭ) при различных температурах роста и соотношениях потоков металла к активированному азоту (III/V). Показано, при формировании InGaN с содержанием In $\sim 60-65\%$ при III/V $\sim 0.75-0.85$, увеличение температуры роста с 440⁰С до 490⁰С приводит к снижению плотности дислокаций с $\sim 3 \cdot 10^{11}$ см⁻² до $\sim 7 \cdot 10^{10}$ см⁻². Также с увеличением температуры роста наблюдается существенный рост интенсивности сигнала фотолюминесценции. Однако, при $\sim 450^0$ С согласно рентгеноструктурному анализу начинается разложение, приводящее к накоплению металлического индия на поверхности роста. При температурах свыше $\sim 470^0$ С кроме металлического индия наблюдаются сигналы от InGaN разного состава, что говорит о начале фазового распада.

Процессы разложения и фазового распада можно подавить за счёт снижения соотношения III/V, необходимое значение которого зависит от температуры роста. В частности, для формирования однородных слоев InGaN при температуре роста $\sim 490^0$ С необходимо уменьшать соотношение потоков металлов к активированному азоту до III/V < 0.6 . Не смотря на то, что общее

кристаллическое качество (плотность дислокаций и концентрация свободных носителей заряда) однородных слоев InGaN, выращенных при температурах $\sim 470\text{-}490^{\circ}\text{C}$, находится примерно на одном уровне с структурами с слоями InGaN с большим содержанием In [4], стимулированное излучение от них не наблюдается. Возможной причиной этого является формирование структур в сильно азотообогащенных условиях, приводящих к возрастанию средней шероховатости поверхности, что в свою очередь увеличивает оптические потери [5]. Показано, что слои InGaN, в которых наблюдается фазовый распад и присутствуют в явном виде флуктуации состава, демонстрируют сигнал спонтанной фотолуминесценции в несколько раз интенсивнее, чем от однородных слоев, что может быть связано с эффектами локализации носителей заряда в таких слоях [6].

Работа выполнена при поддержке НЦМУ “Центр фотоники” (Соглашение № 075-15-2020-906 от 16.11.2020 г).

Список литературы

1. R. Kour et al., ECS J. Solid State Sci. Technol., 9, 015011, 2020
2. G.B. Stringfellow. J. Cryst. Growth., **312**, 735 (2010).
3. Б.А. Андреев и д.р. ФТП, 56 (7), (2022).
4. D. N. Lobanov et al., Appl. Phys. Lett. 118, 151902, (2021).
5. K.E. Kudryavtsev et al. , ECS J. Solid State Sci. Technol., 11, 014003, (2022).
6. S.A. Kazazis et al., J. Appl. Phys.,**127**, 225701, (2020).

Генератор случайных чисел на основе поляризационных переключений в высокоскоростных вертикально-излучающих лазерах спектрального диапазона 1,3 мкм

Петренко А. А.¹, Ковалев А.В.¹

¹ИТМО

e-mail: aapetrenko@itmo.ru

Для большинства типов вертикально-излучающих лазеров (ВИЛ) характерна нестабильность поляризации выходного излучения. Возможным фактором, обуславливающим нестабильность поляризации излучения, может быть квазиизотропность резонатора и активной среды ВИЛ в плоскости активных слоёв, отсутствие внутреннего механизма отбора одной конкретной поляризации излучения [1]. Таким образом, несмотря на то что лазерное излучение ВИЛ в различных режимах преимущественно поляризовано линейно, ориентация поляризации непредсказуема и может измениться во время работы. Переключение между двумя ортогональными направлениями поляризации может происходить при изменении тока, температуры, а также инъекции линейно поляризованного излучения от внешнего лазера, поляризация которого ортогональна поляризации исходного ВИЛ [2]. Наблюдаемый эффект переключения поляризации может использоваться в областях, требующих применения источников хаотического сигнала, например, для генерации случайных чисел [3].

Динамика поляризации ВИЛ может быть описана в рамках spin-flip модели [1], согласно которой считается, что в лазере формируются две независимые ортогональные поляризованные моды, переключение между которыми должно происходить в точках бифуркации. Экспериментально установлено, что среднее время пребывания в одном из состояний (dwell time) определяется высотой потенциального барьера между ямами, шумом спонтанной эмиссии. Из-за быстро меняющегося тока накачки точка бифуркации смещается в область больших значений при нарастании тока или в более низкие – при уменьшении тока, что приводит к появлению петли поляризационного гистерезиса [4].

В ходе данной работы были исследованы поляризационные свойства излучения быстродействующих ВИЛ спектрального диапазона 1,3 мкм с активной областью на основе сверхрешётки InGaAs/InGaAlAs; разработан экспериментальный образец генератора случайных чисел (ГСЧ) на основе описанного ВИЛ; проведены исследования скорости и качества генерации потоков случайных битов с использованием разработанного ГСЧ. Показано, что при увеличении тока накачки ВИЛ после превышения порога накачки наблюдается линейно поляризованное в одном из направлений излучение. При достижении тока накачки 10 мА наблюдается переключение поляризации на ортогональную. После этого при токе накачки 11,9 мА наблюдается повторное переключение в исходное состояние, а при 12,3 мА – обратное переключение. Полученные результаты хорошо согласуются с полученными ранее результатами [5].

Переключения поляризации лазерного излучения могут являться причиной хаотических колебаний интенсивности лазерного излучения во времени, имеющих достаточно быстрые временные масштабы. Таким образом, исследуемые ВИЛ, отличающиеся хаотическими переключениями поляризации излучения при определенных значениях токов накачки, могут выступать в качестве источников энтропии, используемых при создании ГСЧ. Для проведения

исследования характеристик экспериментального образца ГСЧ волоконный вывод ВИЛ был подключен через оптический изолятор к калиброванному фотоприемнику, соединенному с одним из каналов осциллографа. При помощи осциллографа производилась запись выходного сигнала фотоприемника, пропорционального интенсивности лазера - временных рядов интенсивности, – выступающих в качестве исходного сигнала в экспериментальном образце ГСЧ, передаваемого далее в алгоритм математической обработки и получения битовых последовательностей. Полученные битовые последовательности (100 последовательностей длиной 1 Мбит) были проверены на случайность при помощи набора статистических тестов NIST 800-22. Успешными оказались не менее 95% последовательностей, скорость генерации которых составляет около 132 Гбит/с.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект тематики научных исследований №2019-1442 (код научной темы FSER-2020-0013).

Список литературы

1. Michalzik R. 2013 *VCSELs Springer Berlin Heidelberg*
2. Quirce A. et al. 2014 *IEEE Journal of Quantum Electronics* **50** 11
3. Shakhovoy R. et al. 2021 *Journal of Physics: Conference Series* **1984** 1
4. Jadan M. et al. 2019 *Results in Physics* **14**
5. Long C.M. et al. 2016 *Optics Express* **24** 9

Многофункциональный оптоэлектронный элемент на основе слоистого полупроводника n-InSe<PЗЭ>

Бабаева Р. Ф.

¹UNEC

e-mail: *babaeva-rena@yandex.ru*

С целью выявления новых прикладных возможностей для оптоэлектроники кристаллов n-InSe в чистых и легированных редкоземельными элементами (PЗЭ) образцах этого слоистого полупроводника исследованы эффект переключения (ЭП) [1], фототриггерный эффект [2] и электролюминесценция [3].

Установлено, что при определенных условиях на одном и том же образце n-InSe сочетаются все эти три эффекта. При достижении электрического напряжения к так называемому напряжению переключения ($U_{пер}$) происходит эффект переключения (ЭП) [1] симметричной S-образной ВАХ. С повышением температуры - $U_{пер}$ уменьшается. $U_{пер}$ зависит также от воздействия света - наблюдается фототриггерный эффект [2]. С повышением интенсивности света значение $U_{пер}$ уменьшается, а зависимость $U_{пер}$ от длины волны света совпадает со спектром собственной фотопроводимости в исследуемом образце. В n-InSe<PЗЭ> с ростом содержания введенной примеси ($N_{PЗЭ}$) сначала (до 10^{-3} ат.%) величина $U_{пер}$ увеличивается на $\sim 20\div 25$ %, а далее спадает и приближается к имеющему в наиболее низкоомных чистых кристаллах. $U_{пер}$ не зависит от химической природы введенной примеси. Самые стабильные характеристики ЭП наблюдаются при $N_{PЗЭ} \approx 10^{-1}$ ат.%.

Электролюминесцентное свечение (ЭЛ) в образцах n-InSe и n-InSe<PЗЭ> наблюдается при $T < 200$ К, охватывает область $0.900\div 1.150$ мкм с максимумом при ~ 0.965 мкм. Яркость ЭЛ (B_λ) с увеличением падения напряжения на образце (U_0) возрастает по закону $B_\lambda \sim U_0^k$, а от значения тока - зависит линейно. С увеличением значения исходного (имеющего при 77 К) темнового удельного сопротивления (ρ_{77}) величина B_λ монотонно уменьшается, а k - увеличивается. В чистых кристаллах наиболее стабильные и воспроизводимые результаты наблюдаются в образцах с наименьшим ρ_{77} . ЭЛ тоже, как и ЭП не зависит от химической природы введенных примесей, но с ростом $N_{PЗЭ}$ величина B_λ меняется немонотонно и проходит через свой минимум при $N_{PЗЭ} = 5 \cdot 10^{-4}$ ат.%. При $10^{-2} < N_{PЗЭ} \leq 10^{-1}$ ат.% характеристики ЭЛ совпадают с имеющимися в образцах чистых кристаллов с наименьшим ρ_{77} , становятся значительно стабильными и воспроизводимыми. B_λ в обеих группах (чистых и легированных) образцов при $T \approx 105$ К не зависит от T , а с дальнейшим повышением её экспоненциально уменьшается и при $T \approx 160\div 165$ К гаснет.

Анализ полученных результатов позволяет сказать, что в n-InSe при $U = U_{пер}$ происходит коллективный туннельный переход захваченных на мелких уровнях прилипания инжектированных основных носителей заряда на свободную энергетическую зону и плотность тока через образец скачком увеличивается. Последнее, приводит к шнурованию тока, между контактами образуется шунтирующий остальные части образца нитеобразный высокопроводящий канал и образец скачком переходит в низкоомное состояние. При повышении

Т и воздействии света ускоряется процесс заполнения ловушек и $U_{пер}$ уменьшается. Как в чистых, так и в легированных РЗЭ кристаллах n-InSe ЭЛ имеет инжекционную природу. При эффекте переключения, во-первых, U_0 резко уменьшается и E становится намного меньше, чем напряженность электрического поля для «зажигания» ЭЛ; во-вторых, из-за сосредоточения носителей лишь в нитеобразном высокопроводящем канале, инжекция неосновных носителей в объем образца, где локализованы носящие непосредственную ответственность для ЭЛ центры рекомбинации прекращается. Оба этих фактора приводит к резкому спаду V_λ . В образцах n-InSe<РЗЭ> с изменением $N_{РЗЭ}$, меняется степень пространственной неоднородности образцов [4], что в свою очередь, обуславливает обнаруженные зависимости $U_{пер}(N_{РЗЭ})$, $V_\lambda(N_{РЗЭ})$ и т.п.

Поскольку среди основных функциональных элементов оптоэлектроники со своими возможностями выделяются также оптроны с S-образной характеристикой, перспективность многофункциональных элементов с сочетанием в себе таких трех разных функций не вызывает сомнения. Более того, при этом не требуются сложные технологические операции, которые необходимы в случае создания регенеративных оптронов [5], состоящих из нескольких взаимосвязанных р-п, или же других электрических переходов.

Список литературы

1. Ахундов Г.А., Абдинов А.Ш., Мехтиев Н.М., Кязым-заде А.Г. // ФТП. 1974. Т. 8. В. 11. с. 2283-2284.
2. Абдинов А.Ш., Акперов Я.Г., Мамедов В.К., Салаев Эль.Ю. // ФТП. 1974. Т. 14. В. 4. с. 749-753.
3. Ахундов Г.А., Абдинов А.Ш., Мехтиев Н.М. // Оптика и спектроскопия. 1975. т. 38. №5. С. 952-955.
4. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука. 1979. - 416 с.
5. Осинский В.И. Интегральная оптоэлектроника. Минск, Наука и техника, 1977. - 246 с.

Ширина линии излучения и α -фактор вертикально-излучающих лазеров на основе квантовых ям InGaAs/InGaAlAs спектрального диапазона 1.55 мкм

Ковач Я. Н.¹, Блохин С.А.¹, Бобров М.А.¹, Блохин А.А.¹, Малеев Н.А.¹, Кузьменков А.Г.¹, Гладышев А.Г.², Новиков И.И.², Карачинский Л.Я.², Воропаев К.О.³, Егоров А.Ю.⁴, Устинов В.М.¹

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе

²ИТМО

³НовГУ им. Ярослава Мудрого

⁴ООО «Коннектор Оптикс»

e-mail: yakovachyakov@gmail.com

В последние годы вновь усилился интерес к проблематике создания длинноволновых (спектральный диапазон 1.3–2.4 мкм) вертикально-излучающих лазеров (ВИЛ). Также лазеры представляют интерес не только для создания газовых сенсоров и систем распознавания объектов на расстоянии, но и для создания нового типа высокоскоростных оптических межсоединений с пространственным мультиплексированием [1]. Наиболее перспективным вариантом создания длинноволновых ВИЛ является гибридная интеграция эффективной активной области на основе системы InAlGaAs/InP и распределенных брэгговских отражателей (РБО), обеспечивающих компромисс между повышенной теплопроводностью и высокой отражательной способностью. Здесь можно выделить два подхода, продемонстрировавших свою эффективность при создании ВИЛ спектрального диапазона 1.3/1.55 мкм: применение диэлектриков, обладающих высоким контрастом показателей преломления CaF₂/ZnS или AlF₃/ZnS [2] (ГИ), и технологию спекания, позволяющая использовать преимущества РБО в системе AlGaAs/GaAs [3] (СП). Сравнительно недавно была успешно апробирована активная область на основе InGaAs квантовых ям (КЯ) в качестве альтернативы традиционным InAlGaAs КЯ [4]. В настоящей работе приведены результаты исследования одномодовых СП-ВИЛ на основе InGaAs КЯ спектрального диапазона 1.55 мкм.

Детали конструкции гетероструктуры СП-ВИЛ и особенности ее формирования, а также особенности изготовления кристаллов СП-ВИЛ приведены в работах [4–6]. Индивидуальные кристаллы СП-ВИЛ с заращенным туннельным переходом (ЗТП) диаметром 7 мкм были смонтированы в СВЧ-корпуса с оптоволоконным выходом, нюансы сборки приведены в работе [7]. Анализ спектров лазерного излучения выявил снятие вырождения фундаментальной моды по поляризации и появление расщепления между двумя ортогонально поляризованными модами ~20 ГГц, обусловленное асимметрией и/или эластооптическим эффектом [8,9]. Исследование поляризации излучения СП-ВИЛ показало, что генерация начинается через более коротковолновую моду с линейной поляризацией вдоль кристаллографического направления, соответствующего короткой оси мезы ЗТП, однако затем переключается на генерацию через более длинноволновую моду с ортогональной поляризацией вдоль длинной оси мезы ЗТП. При этом фактор подавления ортогонально-поляризованной моды не превышает 10 дБ в обоих режимах, что обусловлено большим вкладом спонтанного излучения при данном типе ввода излучения в волокно. Обнаруженное переключение поляризации (тип I) связано с изменением спектрального рассогласования длины волны моды относительно максимума спектра усиления и падением материального усиления активной области при изменении внутренней температуры лазера (нагрев или саморазогрев).

При исследованиях ширины линии излучения СП-ВИЛ использовался сканирующий интерферометр Фабри–Перо. Для подавления шумов источника питания и эффектов, связанных с оптической обратной связью, использовался химический источник питания и волоконный оптический изолятор. По мере роста выходной оптической мощности (скорректированной на эффективность ввода излучения в волокно) сперва наблюдается обратно пропорциональное уменьшение ширины линии излучения СП-ВИЛ до ~ 30 МГц при 0.37 мВт, что коррелирует с данными для ГИ-ВИЛ на основе InAlGaAs КЯ [10]. Затем происходит скачкообразное увеличение ширины линии, связанное с переключением генерации на длинноволновую моду, и повторное резкое падение ширины линии до ~ 30 МГц (при 1.14 мВт). При мощностях более 1.5 мВт наблюдается аномальное уширение линии, связанное с эффектами саморазогрева лазера и насыщения усиления.

Оценка α -фактора из экспериментальной зависимости ширины линии излучения от обратной оптической мощности дает значения ~ 5 и ~ 9 для коротковолновой и длинноволновой моды, соответственно. Более высокое значение α -фактора для длинноволновой моды обусловлено падением дифференциального усиления при более высокой концентрации носителей в микрорезонаторе, по аналогии с работой для ГИ-ВИЛ на основе InAlGaAs КЯ [11].

Список литературы

1. Padullaparthi B.D., Tatum J.A., Iga K. VCSEL industry : communication and sensing.
2. Spiga S. и др. Single-Mode High-Speed 1.5- μm VCSELS // J. Light. Technol. 2017. Т. 35, № 4. С. 727–733.
3. Ellafi D. и др. Control of cavity lifetime of 15 μm wafer-fused VCSELS by digital mirror trimming // Opt. Express. 2014. Т. 22, № 26. С. 32180.
4. Babichev A. V. и др. 6-mW Single-Mode High-Speed 1550-nm Wafer-Fused VCSELS for DWDM Application // IEEE J. Quantum Electron. 2017. Т. 53, № 6. С. 1–8.
5. Blokhin S.A. и др. 1.55- μm -Range Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers, Manufactured by Wafer Fusion of Heterostructures Grown by Solid-Source Molecular-Beam Epitaxy // Semiconductors. 2020. Т. 54, № 10. С. 1276–1283.
6. Voropaev K.O. и др. The fabrication technology of VCSELS emitting in the 1.55 μm waveband // J. Phys. Conf. Ser. 2020. Т. 1658, № 1. С. 012069.
7. Blokhin S.A. и др. 1.55- μm range optical transmitter based on a vertical-cavity surface-emitting laser // J. Opt. Technol. 2022. Т. 89, № 11. С. 681.
8. Volet N. и др. Polarization mode structure in long-wavelength wafer-fused vertical-cavity surface-emitting lasers / под ред. Panajotov K. и др. 2012. С. 84320B.
9. Yu J.L. и др. Detecting and tuning anisotropic mode splitting induced by birefringence in an InGaAs/GaAs/AlGaAs vertical-cavity surface-emitting laser // J. Appl. Phys. 2012. Т. 111, № 4. С. 043109.
10. Shau R. и др. Linewidth of InP-based 1.55 μm VCSELS with buried tunnel junction // Electron. Lett. 2003. Т. 39, № 24. С. 1728.
11. Halbritter H. и др. Chirp and linewidth enhancement factor of 1.55 μm VCSEL with buried tunnel junction // Electron. Lett. 2004. Т. 40, № 20. С. 1266.

Исследование нелинейных искажений СВЧ-сигнала в оптоволоконной линии передачи

Таценко И. Ю.¹, Устинов А. Б.¹

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: *abitur.tatsenko@mail.ru*

В настоящее время, огромный интерес вызывает передача аналоговых и цифровых сверхвысокочастотных (СВЧ) сигналов по оптоволоконной линии передачи (ОВЛП) [1-5]. За счёт использования оптоэлектронных компонентов, ОВЛП характеризуется низкими потерями при передаче сигнала на большие расстояния и широкой полосой рабочих частот.

Схема ОВЛП состоит из: лазера, электрооптического модулятора, оптоволоконна и фотодетектора. На вход модулятора подается непрерывное оптическое излучение, которое модулируется по амплитуде входным СВЧ-сигналом. Модулированный оптический сигнал передается по оптоволоконну и подается на фотодетектор, на выходе которого формируется выходной СВЧ-сигнал, пропорциональный интенсивности оптического излучения. Известно, что повышение мощности лазера позволяет уменьшить потери при передаче СВЧ-сигнала [3]. Из-за нелинейности передаточной характеристики электрооптического модулятора, на выходе ОВЛП может наблюдаться компрессия СВЧ-сигнала, а также паразитные гармоники, вызванные интермодуляционными искажениями.

Целью настоящей работы являлось исследование нелинейных искажений СВЧ-сигнала в ОВЛП с положительным коэффициентом передачи, а также исследование влияния мощности лазера на нелинейные искажения СВЧ-сигнала.

На первом этапе работы исследовалось влияние мощности лазера на амплитудно-частотную характеристику (АЧХ) ОВЛП. Были измерены амплитудно-частотные характеристики ОВЛП при различных мощностях лазера. В конструкции ОВЛП использовались лазер с длиной волны 1550 нм и мощностью излучения до 1 Вт, электрооптический модулятор Маха-Цендера с полуволновым напряжением $V_{\pi}=1.6$ В и оптическими потерями в максимуме коэффициента передачи 4.5 дБ, оптоволоконно длиной 1 км и фотодетектор с чувствительностью 0.8 А/Вт с рабочей полосой частот от 0 до 10 ГГц и максимальным фототоком 80 мА. Результаты показали, что с увеличением мощности лазера коэффициент передачи ОВЛП увеличивается. При мощности лазера 25.3 дБм коэффициент передач ОВЛП становится положительным в диапазоне частот 0-10 ГГц.

На следующем этапе работы исследовались компрессия СВЧ-сигнала и интермодуляционные искажения в ОВЛП. Измерения проводились при мощности лазера 20.5 дБм и 25.4 дБм, что соответствовало коэффициенту передачи ОВЛП на частоте 10 ГГц около -10 дБ и 0 дБ, соответственно. При мощности лазера 20.5 дБм однодецибельная компрессия на частоте 10 ГГц наблюдалась при мощности входного СВЧ-сигнала 13.2 дБм. При повышении мощности лазера до 25.4 дБм значение точки однодецибельной компрессии уменьшилось до 11.2 дБм. Для исследования влияния мощности лазера на интермодуляционные искажения был определен динамический диапазон по помехам (SFDR) при передаче двухчастотного сигнала. При мощности лазера 20.5 дБм SFDR составил 85.5 дБ, а увеличение мощности лазера до 25.4 дБм привело к незначительному увеличению SFDR до 86.5 дБ. Таким образом, полученные результаты показывают возможность увеличения коэффициента передачи ОВЛП за счёт

использования лазера с относительно высокой мощностью излучения и при этом динамический диапазон по помехам практически не изменяется. Увеличение мощности лазера приводит к незначительному уменьшению точки однодецибельной компрессии передаваемого СВЧ-сигнала.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках "Мегагранта" (соглашение № 075-15-2021-609).

Список литературы

1. A.L.M. Muniz, D.F. Noque, R.M. Borges, A. Bogoni, M. Hirano, A.C. Sodré Jr. *Microwave and Optical Technology Letters*, **59** (9), 2185, (2017).
2. D.F. Noque, R.M. Borges, A.L.M. Muniz, A. Bogoni, A.C. Sodré Jr. *Optics Communications*, **414**, 191, (2018).
3. И.Ю. Таценко, Т.К. Легкова, А.В. Иванов, А.Б. Устинов. *Изв. вузов России. Радиоэлектроника*, **23** (4), 48, (2020).
4. E. I. Ackerman, G. E. Betts, W. K. Burns, J. C. Campbell, C. H. Cox, N. Duan, J. L. Prince, M. D. Regan, H. V. Rousell. In *2007 IEEE/MTT-S International Microwave Symposium* (IEEE, 2007), p.51-54.
5. А.Н. Петров, А.В. Тронеv, В.В. Лебедев, И.В. Ильичев, Е.Н. Величко, А.В. Шамрай. *Журнал технической физики*, **85** (5), 131, (2015).

Моделирование и измерение локального перемещения актюаторов в пьезокерамических линейках при уменьшении поперечного сечения

Топоровский В. В.¹, Самаркин В.В.¹, Кудряшов А.В.¹, Галактионов И.В.¹, Панич А.А.², Сокалло А.И.², Малыхин А.Ю.²

¹Институт динамики геосфер имени академика М.А. Садовского Российской Академии Наук

²Южный федеральный университет

e-mail: *topor@activeoptics.ru*

С развитием элементной базы адаптивной оптики возникает необходимость создания корректоров волнового фронта с компактной конструкцией и высоким пространственным разрешением управляющих элементов для обеспечения точной компенсации фазовых флуктуаций лазерного излучения [1]. Наиболее часто используемыми корректорами волнового фронта являются деформируемые зеркала пьезоактюаторного типа [2]. Несмотря на ряд преимуществ таких устройств (высокая частота первого резонанса, высокое пространственное разрешение), имеются недостатки этих корректоров (низкая ремонтпригодность конструкции, громоздкая конструкция), которые ограничивают их применение в ряде научных и технологических задач: лидарное зондирование атмосферы [3], офтальмология [4], биофотоника [5] и т.д. [6-8]

В предыдущей работе нами было предложено и разработано деформируемое зеркало картриджного типа, где в качестве управляющих элементов были использованы пьезокерамические гребенки с 5 индивидуальными актюаторами с площадью поперечного сечения $4 \times 4 \text{ мм}^2$ [9]. Для увеличения пространственного разрешения управляющих элементов в данной работе были проведены теоретические и экспериментальные исследования по снижению линейных размеров индивидуальных актюаторов до $2,5 \times 2 \text{ мм}^2$.

Гармонический анализ показал, что абсолютная деформация многослойных актюаторов по вертикальной оси составляет 5,33 мкм для актюатора площадью 16 мм^2 и 5,52 мкм для актюатора площадью 4 мм^2 . Полученные значения соответствуют идеальным условиям, в которых все слои актюатора полностью механически согласованы между собой, а влияние демпфирующих факторов не учитывается.

В полученной модели активные слои соединены между собой слоем серебра, закоммутированного параллельно на чётных и нечётных слоях, так называемая межэлектродная коммутация [10]. В качестве изолятора выступает область активного слоя 200 мкм, не покрытая серебром. Эффективная площадь поляризации пьезокерамики в актюаторе снижается до $14,4 \text{ мм}^2$ и $3,2 \text{ мм}^2$, что приводит к появлению локальных областей напряжённости и оказывает значительное влияние на прочностные характеристики актюаторов.

Модель, полученная в ходе математического анализа показала, что при рабочей площади $14,4 \text{ мм}^2$, сборка работает как единое целое и наблюдается эффект «бочки» на поперечной деформации. Это даёт возможность рассматривать такой актюатор как монолитный объект. При снижении эффективной площади до $3,2 \text{ мм}^2$ происходит локальное перераспределение максимумов поперечной деформации, приводящее к снижению механической прочности и

надёжности всей системы. Это явление подтверждается результатами моделирования послойного давления. В случае с поперечным сечением $14,4 \text{ мм}^2$ максимум давления при управляющем напряжении 300 В распределяется по всей площади пьезоэлектрического слоя. В случае актюаторов с сечением $3,2 \text{ мм}^2$ давление сконцентрировано на краях пьезоэлектрических слоёв.

Результаты математического моделирования в программной среде ANSYS показали, что переход на линейки актюаторов с меньшей площадью элемента нежелателен в связи с возникновением локальных концентраций давления на краях элементов. Для проверки данного явления на практике были изготовлены линейки актюаторов с коммутационным слоем на боковых гранях. Размеры актюатора были приближены к модельному эксперименту и составили $4*4 \text{ мм}^2$ и $2,5*2 \text{ мм}^2$. Размер $2,5*2 \text{ мм}^2$ обусловлен технологическим пределом оборудования, используемого в изготовлении данного типа актюаторов.

Уменьшение площади поперечного сечения актюатора в линейке с 16 мм^2 до 5 мм^2 приводит к сжижению перемещения отдельного актюатора линейки с 4 мкм до 1,5 мкм при управляющем напряжении 300 В. Это связано с уменьшением эффективного сечения слоя многослойного актюатора и боковым зажатием пакета вследствие неоднородной деформации на каждой пластине пакета.

Для использования всей площади активных слоёв пьезокерамики была использована технология проволочной коммутации электродов [11]. В данном случае перемещение при управляющем напряжении 300 В составляет 4,6-4,8 мкм.

Список литературы

1. Kashani Ilkhechi, A.; Martell, M.; Zemp, R. Miniature Deformable MEMS Mirrors for Ultrafast Optical Focusing. *Micromachines* 2023, 14, 40. <https://doi.org/10.3390/mi14010040>.
2. V. Toporovsky, V. Samarkin, J. Sheldakova, A. Rukosuev, A. Kudryashov, "Water-cooled stacked-actuator flexible mirror for high-power laser beam correction", *Optics & Laser Technology* 144, pp.107427, 2021. doi:10.1016/j.optlastec.2021.107427.
3. Tan X., Wu Z., Liang Z., "Effect of adaptive optical system on the capability of lidar detection in atmosphere", *Proc. SPIE* 7284, 72840G (2009)
4. Fernández E.J. Adaptive optics with a magnetic deformable mirror: applications in the human eye / E. J. Fernández, L. Vabre, B. Hermann, A. Unterhuber, B. Považay, W. Drexler // *Opt. Express*. – 2006. – V. 14. – PP. 8900-8917.
5. Tao X. Adaptive optics confocal microscopy using direct wavefront sensing / X. Tao, B. Fernandez, O. Azucena, M. Fu, D. Garcia, Y. Zuo, D. C. Chen, J. Kubby // *Optics Letters*. – 2011. – V. 36. – №7. – PP. 1062-1064.
6. Ma X.-S. Quantum teleportation over 143 kilometers using active feedforward / X.-S. Ma, T. Herbst, T. Scheidl, D. Wang, S. Kropatschek, W. Naylor, B. Wittmann, A. Mech, J. Kofler, E. Anisimova, V. Makarov, T. Jennewein, R. Ursin, A. Zeilinger // *Nature*. – 2012. – V. 489. – №7415. – PP. 269-273.
7. Laskin A. Building beam shaping optics for micromachining / A. Laskin, V. Juzumas, A. Urniežius, V. Laskin, G. Šlekys, A. Ostrun // *Proc. of SPIE*. – 2015. – V. 9346. – 934615.
8. Sheldakova J. New approach for laser beam formation by means of deformable mirrors / J. Sheldakova, A. Kudryashov, A. Lylova, V. Samarkin, A. Byalko // *Proc. of SPIE*. – 2015. – V. 9581. – 95810H.
9. Vladimir Toporovskiy, Alexis Kudryashov, Vadim Samarkin, Anatoliy Panich, Alexander Sokallo, and Anatoliy Malykhin, "Investigation of properties of the stacked-actuator deformable mirror made of the piezoceramic combs", *Proc. SPIE* 11916, pp119161I, 2021. doi: 10.1117/12.2603503
10. Kenji Uchino; Sadayuki Takahashi (1996). Multilayer ceramic actuators, 1(5), 0–705. doi:10.1016/s1359-0286(96)80054-4
11. Kouichi Kanayama, Hiroshi Mase1, Hiroaki Saigoh, Hiroyuki Nagayama1, Hiroyasu Yamaoka Hiroyasu Yamaoka and Yoshihisa Ushida. Gap Structure Multilayer Piezoelectric Actuator. *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 30, Number 9S, 2281

Изменение шумовых и электрофизических характеристик InGaN ультрафиолетовых светодиодов при температурах от – 74 до 84 °С

Иванов А. М.¹, Клочков А. В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: alexandr.ivanov@mail.ioffe.ru

Совершенствование технологии изготовления оптоэлектронных полупроводниковых элементов на основе нитридных материалов представляет современный исследовательский интерес [1]. А изменение электрофизических характеристик с охлаждением [2] или нагревом [3] показывает возможности использования этих приборов и пределы их применяемости в особых климатических условиях.

Расширение областей приложения коммерческих УФ светодиодов и лазеров с одновременным ростом их объемов производства повышает требования к надежности и стабильности их работы. Области их использования – промышленность, сельское хозяйство, медицина и санитария, а так же специфические применения в криминалистике и банковском деле, в твердотельном освещении, в косметологии. Это вызывает заинтересованность в изучении их поведения во внешних условиях отличных от обычных – комнатных.

Измерение плотности низкочастотного токового шума представляет разработчикам оптоэлектронной аппаратуры данные по надежности, срокам службы, характеру спектра и возможной локализации его источников [4] в этих приборах при пониженных и увеличенных температурах.

В современном понимании с понижением температуры внешняя квантовая эффективность InGaN светодиодов растет из-за лучшего перекрытия волновых функций электронов и дырок в квантовых ямах [5], а плотность низкочастотного шума уменьшается. При нагреве проявляются противоположные тенденции.

Целью работы являлись сравнительные исследования поведения промышленных УФ InGaN светодиодов в температурном диапазоне от – 70 до 80 °С; изучение относительных изменений электрофизических и шумовых параметров приборов, возможные последствия применения приборов в этих условиях. Обсуждается транспорт носителей, рекомбинационные процессы, механизмы формирования шумов.

Для исследований была сконструирована камера, позволяющая в одном цикле измерять шумовые и электрооптические характеристики от температуры жидкого азота до 100 °С.

Тестирование светоизлучающих полупроводниковых приборов осуществлялось на промышленных индикаторных УФ светодиодах с *InGaN/GaN* квантовыми ямами фирмы Nichia (NSPU510CS, с пиковой энергией излучения $h\nu_{QW} = 3.31$ eV и длиной волны $\lambda = 375$ nm, мощность 8200 μ W). Номинальный ток светодиодов $I = 20$ mA. Активная площадь $\sim 10^{-3}$ cm². Мощность токового шума определялась в четырех полосах с центральными частотами 20, 70, 270 и 1000 Hz, граничная частота – 7.3 kHz.

Результаты показали монотонное увеличение прямого смещения на УФ светодиодах для достижения тока 20 mA при снижении температуры до – 74 °С. При нагреве до 84 °С

зависимости тока от прямого смещения сдвигались в область меньших напряжений. При понижении температуры до $-34\text{ }^{\circ}\text{C}$ начинается падение внешней квантовой эффективности УФ светодиодов при номинальных токах. Это противоречит известным представлениям о росте квантовой эффективности и люминисценции при охлаждении в этом температурном интервале [2]. Исследование спектральной зависимости плотности токового шума продемонстрировало весьма незначительное двукратное его увеличение при нагреве до $84\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $I = 20\text{ mA}$, что возможно связано с изменениями в транспорте носителей.

В светодиодах с *InGaN/GaN* квантовыми ямами важную роль играет туннелирование по дефектам [6]. При малых токах с понижением температуры его роль возрастает. При нагреве УФ светодиодов возрастает туннельная проводимость [7] и этот механизм транспорта носителей проявляется в исследуемых светодиодах, что доказывают результаты расчета фактора идеальности.

Проведенные исследования продемонстрировали перспективность использования коммерческих светодиодов УФ диапазона излучений в широком интервале возможных рабочих температур от -70 до $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ без существенного изменения оптических и электрофизических характеристик при номинальных токах. При меньших токах наблюдалось улучшение некоторых параметров приборов, что связано с различными вкладами механизмов транспорта носителей, изменениями спектра дефектов за счет энергии высвобождающейся при безызлучательной рекомбинации.

Список литературы

1. N. Liu et al. Superlattices Microstruct. **141**, 106492, 2020
2. D.S. Arteev et al. J. Luminesc. **234**, 117957, 2021
3. Z. Peng et al. IEEE Photonics J. **12** (1), 8200108, 2020
4. J. Glemža et al. Lith. J. Phys. **58** (2), 194-203, 2018
5. Q. Wang et al. Opt. Commun. **478**, 126380, 2021
6. M. Auf der Maur et al. Appl. Phys. Lett. **105**, 133504, 2014
7. Н.И. Солин, С.В. Наумов. ФТТ, **45** (3), 460-467, 2003

Моделирование поляризационного делителя на основе тонких плёнок ниобата лития

Кузнецов И. В.¹, Перин А.С.¹

¹ТУСУР

e-mail: igor33457@gmail.com

Делитель поляризации – пассивное оптическое устройство, выполняющее пространственное разделение ТЕ- и ТМ-волн. Контроль состояния поляризации лазерного излучения имеет значение для устройств интегральной фотоники и оптоэлектроники. Также, интегральное устройство для разделения ортогональных поляризаций может быть полезно в системах связи, использующих уплотнение каналов по поляризации.

Как правило, интегральные поляризационные делители реализуются на основе направленных разветвителей [1, 2]. В данной работе рассматривается поляризационный делитель на основе модифицированной схемы направленного разветвителя, отличающаяся тем, что вместо двух близко расположенных параллельных волноводов, между которыми наблюдается перетекание мод, используется один волновод, ширина которого в 2 раза превышает ширину входных и выходных волноводов. Эффект разделения поляризации в таком волноводе достигается за счёт интерференции симметричной (фундаментальной) и ассиметричной (моды первого порядка) мод [3]. Длина удвоенного волновода, при которой наблюдается наиболее эффективное разделение мод, может быть определена по формуле:

$$L = \frac{\pi}{\beta_s - \beta_a},$$

где $\beta_{a, s}$ – постоянные распространения ассиметричных и симметричных ТЕ и ТМ мод.

В данной работе рассматривалась оптическая схема из гребенчатых волноводов на основе тонких плёнок ниобата лития, окруженных воздухом. Высота волноводов составляла 350 нм, ширина 400 нм. Длина волны лазерного излучения была принята равно 1,55 мкм. Показатель преломления ниобата лития был принят равным 2,211 [4], воздуха – 1. Для указанной конфигурации, эффективная длина была рассчитана равной 30,65 мкм.

Модель оптического устройства была построена в среде Comsol. Использовались граничные условия port для расчёта и согласования мод, perfectly matched layers для предотвращения обратного отражения излучения от внешних границ оптической схемы и scattering boundary condition для учёта потерь мощности на рассеяния на границах оптической схемы.

Переходная погрешность рассчитывалась по формуле:

$$A = 10 \lg\left(\frac{P_W}{P_W + P_R}\right),$$

где P_W – величина мощности, прошедшая в неправильный порт, P_R – величина мощности, прошедшая в правильный порт. Переходная погрешность составила -13,06 дБ и -17,31 дБ для ТЕ- и ТМ-мод соответственно.

Таким образом, было проведено моделирование делителя поляризации на основе гребенчатых волноводов тонкопленочного ниобата лития. Полученные переходные помехи превосходят уровень -10 дБ, полученный для аналогичной геометрии, волноводы в которой формировались методом диффузии титана в кристалл ниобата лития [3]. Использование гребенчатых волноводов в данной оптической схеме позволяют получить меньшие переходные помехи при меньших размерах интегральной схемы, по сравнению с устройством, использующими метод диффузии титана для формирования волноводов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEWM-2022-0004 «Исследование и разработка способов изготовления интегральных оптических волноводов и элементов на их основе»).

Список литературы

1. Kuznetsov M. Expressions for the coupling coefficient of a rectangular-waveguide directional coupler // Optics letters. – 1983. – V. 8. – №. 9. – P. 499-501.
2. Hereth R., Schiffner G. Broad-band optical directional couplers and polarization splitters // Journal of lightwave technology. – 1989. – V. 7. – №. 6. – P. 925-930.
3. Sattibabu, R., Dey, P. K., Bhaktha, B. S., Ganguly, P. Passive polarization splitter using zero-gap directional coupler in LiNbO₃ // Results in Optics. – 2022. – V. 8. – P. 100262.

Моделирование нелинейных рабочих характеристик кремниевых микро-кольцевых резонаторов

Рябцев И. А., Чекмезов К.Н., Никитин А.А., Устинов А.Б.
СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: ryabcev.ilya@gmail.com

Эффект оптической дисперсионной бистабильности является ключевым для создания полностью оптических элементов памяти [1]. В микро-кольцевых резонаторах (МКР), изготовленных по технологии кремний на изоляторе (КНИ), оптическая бистабильность проявляется в результате возникновения двух конкурирующих эффектов: дисперсия свободных носителей заряда, возникающих в результате двухфотонного поглощения, и термооптический эффект [2,3]. Последний, является сравнительно медленным эффектом, при котором время переходного процесса между бистабильными состояниями составляет порядка единиц мкс. Поэтому его использование нецелесообразно для создания запоминающих устройств. До недавнего времени экспериментальные исследования оптической бистабильности в кремниевых МКР подтверждали доминирующую роль термооптического эффекта [4]. В работе [5] впервые наблюдалась доминирующая роль зарядовой нелинейности, а в работе [6] показана возможность создания элемента памяти используя этот эффект. Однако модель описывающая принцип работы такой ячейки памяти, отсутствует.

Целью данной работы является моделирование зависимости выходной от входной мощности в бистабильных МКР, изготовленных по технологии КНИ с доминирующей зарядовой нелинейностью, и сравнение с экспериментальными результатами. Исследуемый МКР, изготовленный по технологии ИНР [7], состоял из кольца диаметром 256 мкм симметрично связанного с двумя прямыми волноводами.

На первоначальном этапе проводилось моделирование амплитудно-частотной характеристики кремниевого резонатора. На ней наблюдались серия резонансных пиков, соответствующих различным модам кольцевого резонатора. Для моделирования нелинейного поведения был выбран резонанс на частоте 191,811 ТГц. Для расчета использовался нелинейный закон дисперсии, где изменение показателя преломления возникало в результате конкурирующих зарядовой нелинейности и термооптического эффекта. Кроме того, учитывалось нелинейное затухание, которое возникает в результате двухфотонного поглощения, рассеяния на свободных носителях и разогрева структуры. Исследовались как выходной сигнал, прошедший прямой подводный волновод, так и сигнал, прошедший через кольцевой резонатор. Результаты показали, что увеличение входной мощности в МКР сопровождалось нелинейным сдвигом частоты в область высоких частот. Оптическая бистабильность возникала при пороговом значении входной мощности 3,6 дБм. При мощности 14,9 дБм нелинейный сдвиг частоты составлял 17 ГГц, а ширина петли гистерезиса – 10 ГГц.

На следующем этапе было проведено исследование зависимости мощности на выходах кольцевого резонатора от мощности на его входе. Моделирование проводилось для частоты оптического излучения 191,823 ТГц. Была промоделирована серия передаточных характеристик при различных мощностях на входе с шагом 0,1 дБм в диапазоне от -10 до 15 дБм. Для этого при каждом значении входной мощности определялась мощность на выходах резонатора.

Результаты показали, что увеличение входной мощности до 11,5 дБм обеспечивает плавное увеличение мощности на выходе МКР. При мощности 11,5 дБм выходная мощность скачком увеличивается на 4,4 дБм. Дальнейшее возрастание входной мощности до 15 дБм сопровождается слабым увеличением мощности выходного сигнала. При обратном изменении мощности от 15 дБм до 7 дБм мощность на выходе плавно уменьшается, а при значении мощности 7 дБм наблюдается скачок вниз величиной 9,76 дБм. Дальнейшее поведение совпадает с предыдущим случаем. Таким образом формируется петля гистерезиса шириной 4,5 дБм.

Результаты моделирования использовались для описания экспериментальных зависимостей выходной мощности оптического излучения при разных уровнях входной мощности для кремниевого микро-кольцевого резонатора, изготовленного по технологии КНИ. Сравнение показало, что полученные при помощи моделирования зависимости с хорошей точностью описывают экспериментальные данные.

Исследования были поддержаны Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSEE-2020-0005).

Список литературы

1. Alexoudi T., Kanellos G. T., Pleros N. Optical RAM and integrated optical memories: a survey //Light: Science & Applications. – 2020. – Т. 9. – №. 1. – С. 1-16.
2. Eichler H. J., et al., «Optical nonlinearity and bistability in silicon», Phys. Physica Status Solidi (b), Vol. 150, №2, pp. 705-718, (1988)
3. Xu Q., Lipson M., «Carrier-induced optical bistability in silicon ring resonators», Opt.Lett., Vol. 31, №3, pp. 341-343, (2006)
4. Almeida V. R., Lipson M. Optical bistability on a silicon chip // Optics letter. – 2004. – Т. 29. – №. 20. – С. 2387-2389
5. Nikitin A. A. et al. Carrier-induced optical bistability in the silicon micro-ring resonators under continuous wave pumping //Optics Communications. – 2021. – Т. 480. – С. 126456.
6. Nikitin A. A. et al. Optical bistable SOI micro-ring resonators for memory applications//Optics Communications. – 2022. – С. 127929.
7. IHP – innovations for high performance microelectronics, 2022, <https://www.ihp-microelectronics.com/services/research-and-prototyping-service/mpw-prototyping-service/sigec-bicmos-technologies>. (Accessed 09 March 2023)

Одномодовые вертикально-излучающие лазеры спектрального диапазона 1.55 мкм для оптических систем передачи данных

Папылев Д. С.¹, Андриюшкин В.В.¹, Блохин С.А.², Бабичев А.В.¹, Бобров М.А.², Гладышев А.Г.¹, Новиков И.И.¹, Карачинский Л.Я.¹, Колодезный Е.С.¹, Воропаев К.О.³

¹ИТМО

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³АО «ОКБ-Планета»

e-mail: dspapylev@itmo.ru

В настоящее время идет непрерывный рост объемов передачи данных по оптическим сетям и как следствие лавинообразно растут энергозатраты. Поэтому на первый план выходит энергоэффективность оптической передачи данных. Одномодовые вертикально-излучающие лазеры (ВИЛ) спектрального диапазона 1.55 мкм потенциально могут стать хорошей альтернативой современным используемым решениям в системах передачи данных на расстояния более 1 км за счет своей компактности и высокой энергоэффективности. Тем не менее создание таких эффективных излучателей связано с рядом физических и технологических проблем, что в отличии от лазеров диапазона 850–1050 нм не позволяет создавать приборы на основе монокристаллов (созданных в едином эпитаксиальном процессе) гетероструктур на подложке InP. Наиболее перспективным методом создания ВИЛ диапазона 1.55 мкм, позволяющим создавать надежные ВИЛ со скоростью передачи данных более 25 Гбит/с [1], является технология спекания гетероструктур распределенных Брэгговских отражателей (РБО) на основе системы материалов AlGaAs/GaAs с гетероструктурой оптического резонатора с активной областью на основе InP.

В рамках данной работы проведено исследование ВИЛ спектрального диапазона 1.55 мкм изготовленных методом спекания пластин РБО и оптического резонатора, изготовленных методом молекулярно-пучковой эпитаксии. В качестве оптического и токового ограничения была использована оригинальная конструкция композитного туннельного перехода n^{++} -In_{0.53}Ga_{0.47}As/ p^{++} -In_{0.53}Ga_{0.47}As/ p^{++} -In_{0.53}Ga_{0.31}Al_{0.16}As. Активная область состояла из 10 квантовых ям (КЯ) In_{0.74}Ga_{0.26}As. Детали конструкции кристалла ВИЛ приведены в [2].

В ходе доклада будут представлены результаты исследования статических характеристик ВИЛ с размером захороненного туннельного перехода 6 мкм. При комнатной температуре продемонстрирована одномодовая лазерная генерация с пороговым током менее 2 мА. Дифференциальная эффективность в данных условиях составила более 0.27 Вт/А. Ограничение максимальной выходной оптической мощности на уровне 3.4 мВт, что соответствует значению тока 17 мА, связано с насыщением ватт-амперной характеристики. Уменьшение паразитной емкости области p^+ n -перехода с обратным смещением за пределами области зарощенного туннельного перехода, за счет оптимизации легирования зарощающего слоя n -InP и достижения компромисса между низким электрическим сопротивлением и высокой паразитной частотой отсечки, позволило повысить паразитную частоту отсечки до 13-14 ГГц, и показано, ключевым механизмом, ограничивающим быстродействие таких устройств, является демпфирование релаксационных колебаний. В результате созданные ВИЛ с оптимизированными как конструкцией гетероструктуры, так и топологией кристалла ВИЛ продемонстрировали полосу пропускания более 13 ГГц и передачу данных в формате NRZ со скоростью 37 Гбит/с.

Расчетные оценки показывают, что полученная высокая выходная оптическая мощность одномодового излучения и динамические характеристики исследованных ВИЛ на основе InGaAs КЯ спектрального диапазона 1.55 мкм указывают на их потенциал для передачи данных на большие расстояния (более 10 км).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект тематики научных исследований №2019-1442 (код научной темы FSER-2020-0013).

Список литературы

1. Blokhin S. A. et al, High Power Single Mode 1300-nm Superlattice based VCSEL: Impact of the Buried Tunnel Junction Diameter on Performance, IEEE Journal of Quantum Electronics , vol. 58, no. 2, 1-15, 2022.
2. Babichev A. et al, Single-Mode High-Speed 1550 nm Wafer Fused VCSELs for Narrow WDM Systems, IEEE Photonics Technology Letters, vol. 35, no. 6, 297-300, 2023.

Исследование параметров хаотического сигнала, генерируемого в оптоэлектронном генераторе

Гордиенко М. А.¹, Устинов А. Б.¹

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: *mg260599@gmail.com*

Оптоэлектронные генераторы (ОЭГ) могут найти различные области применения, благодаря богатой нелинейной динамике. Например, ОЭГ используются в качестве малошумящих генераторов СВЧ-сигналов [1], физических резервуаров для нейроморфных вычислений [2,3], генераторов хаотических сигналов [4,5]. На хаотическую динамику оптоэлектронных генераторов влияют такие параметры, как время задержки, коэффициент усиления, полоса пропускания фильтра и нелинейность преобразования сверхвысокочастотного (СВЧ) электрического сигнала в амплитудно-модулированный оптический сигнал.

Целью данной работы являлось теоретическое исследование параметров сигналов, генерируемых в оптоэлектронном генераторе.

При проведении численного моделирования предполагалось, что оптоэлектронный генератор [4] состоит из лазерного диода, создающего непрерывное оптическое излучение с длиной волны 1,55 мкм, электрооптического модулятора Маха-Цендера, выполняющего амплитудную модуляцию оптического сигнала, оптоволоконной линии задержки, фотоприёмника, СВЧ усилителя и полосно-пропускающего СВЧ фильтра. Полуволновое напряжение модулятора Маха-Цендера было равным 3,3 В, время задержки модулированного излучения было равным 4,82 нс, что соответствует длине оптоволокна 1 км. Напряжение смещения модулятора Маха-Цендера было выбрано 1,65 В, что соответствует работе в точке квадратуры.

В результате численного моделирования методом Рунге-Кутты были получены хаотические временные реализации на выходе оптоэлектронного генератора при различных значениях коэффициента усиления в цепи обратной связи. По полученным временным реализациям были найдены зависимости корреляционной размерности от размерности вложения аттракторов хаотических сигналов. Для нахождения корреляционных размерностей был использован алгоритм Грассбергера-Прокаччиа [6].

Полученные результаты показали, что хаотический сигнал, генерируемый оптоэлектронным генератором, имеет широкую полосу хаотической генерации и высокие значения таких параметров, как корреляционная и фрактальная размерность. Таким образом, ОЭГ может быть использован для генерации шумоподобных сигналов и в качестве генератора случайных чисел.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSEE-2020-0005).

Список литературы

1. A. B. Ustinov et. al. «A tunable spin wave photonic generator with improved phase noise characteristics». Journal of Physics: Conference Series. Vol. 1326, № 1. pp. 012015. 2019.
2. Y. K. Chembo «Machine learning based on reservoir computing with time-delayed optoelectronic and photonic systems». Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. Vol. 30, № 1. pp. 013111. 2020.
3. G. Tanaka et. al. «Recent advances in physical reservoir computing: A review». Neural Networks. Vol. 115. pp. 100-123. 2019.

4. K. E. Callan et al. «Broadband chaos generated by an optoelectronic oscillator». Physical review letters. Vol. 104, № 11. pp. 113901. 2010.
5. A. V. Kondrashov, A. B. Ustinov «Self-generation of Möbius solitons and chaotic waveforms in magnonic-optoelectronic oscillators under simultaneous action of optic and magnonic nonlinearities». Journal of Applied Physics. Vol. 132, № 17. pp. 173907. 2022.
6. P. Grassberger, I. Procaccia «Characterization of strange attractors». Physical review letters. Vol. 50, № 5. pp. 346. 1983.

Оптимизация технологии выращивания градиентных слоев AlGaAs для использования в мощных фотодиодах с торцевым вводом излучения

Хвостикова О. А., Хвостиков В.П., Потапович Н.С., Власов А.С., Салий Р.А.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: olgakhv@mail.ioffe.ru

В последние годы ведутся активные разработки по созданию фотоэлектрических преобразователей (фотодиодов) с боковым вводом излучения. Отличительной особенностью таких фотодиодов является наличие толстого слоя $Al_xGa_{1-x}As$ (50-100 мкм) с градиентным составом. Подобные слои также могут использоваться в светодиодных структурах. С экономической точки зрения такие толстые слои эффективно вырастить методом жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ). Тройные твердые растворы AlGaAs обеспечивают необходимый уровень оптической прозрачности и кристаллического совершенства структур на основе GaAs. Кроме того, при выращивании ЖФЭ за счет изменения коэффициента сегрегации Al с температурой происходит рост твердого раствора с градиентом состава. Наличие градиента обеспечивает искривление хода лучей, что существенно облегчает собиране света.

Методом жидкофазной эпитаксии были выращены толстые (более 50 мкм) слои градиентного состава $Al_xGa_{1-x}As$ в диапазоне $x=0.6-0.1$, которые были использованы для создания фотодиодов с торцевым вводом излучения. Для набора большой толщины $Al_xGa_{1-x}As$ слоя требуется высокая температура роста, при этом вероятность фоновое легирования увеличивается с повышением температуры процесса. Основной фоновой примесью при использовании графитовых кассет в ЖФЭ является углерод (акцептор). Нелегированные слои, полученные традиционным для данной системы методом выращивания из расплава Ga при $T=900$ °C имеют p-тип проводимости, а также демонстрируют провал проводимости при составов $x\sim 0.4$ вызванный пересечением (сближением) прямой (G) и непрямых(L,X) зон. Эксперименты по увеличению уровня легирования слоев приводили к появлению эффекта «зеркала»: слои с $x=0.35-0.38$ обнаруживали избыточную концентрацию электронов, приводящую к частичному отражению световой волны [1]. Для решения проблемы снижения фоновое легирования и получения слоев n-типа проводимости были проведены исследования по добавлению висмута в расплав. Использование висмут-содержащих расплавов приводит к изменению спектра дефектов и влияет на встраивание примеси в кристаллическую решетку AlGaAs. Согласно проведенным исследованиям добавление в расплав даже 1 ат.% висмута изменяет тип проводимости материала (слои приобретают n-тип проводимости), что значительно облегчает создание гетероструктуры. Были проведены расчеты бинарных параметров взаимодействия и смоделированы кривые ликвидуса-солидуса для пяти-компонентного расплава Al-Ga-As-Bi-Sn при температуре 900 °C. Расчетные кривые подтверждены экспериментальными данными.

Измерения концентрации свободных носителей методом Холла показали снижение концентрации электронов и увеличение подвижности нелегированных AlGaAs слоев при использовании висмут-содержащих расплавов, что очевидно говорит о снижении уровня легирования фоновыми примесями. В спектрах фотолюминесценции наблюдалось изменение спектра дефектных состояний. Спектры измерялись при температуре 77K и плотности возбуждения ~ 100 Вт/см². Из анализа спектров ФЛ установлено, что использование висмута снижает количество собственных дефектов, характерных для материала, выращенного

из расплава Ga: т.н. EL2 и EL5 полосы, которые ассоциируют с антиструктурным дефектом Ga_{As} и вакансиями мышьяка V_{As}. При этом в спектрах обнаруживаются новые полосы, которые приписывают кластерам Bi, образующим каскад состояний вблизи валентной зоны. Анализ спектров ФЛ показал, что оптимальным содержанием Bi в расплаве является 10-20 ат.%. С точки зрения практического использования данный диапазон составов также представляет существенный интерес ввиду того, что при таких концентрациях присутствие висмута в расплаве не оказывает существенного влияния на снижение скорости роста. Использование Bi содержащих расплавов для выращивания толстых волноводных слоев является перспективным направлением исследования с точки зрения обеспечения оптимального распределения легирующей примеси.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00057, <https://rscf.ru/project/22-19-00057>

Список литературы

1. V. P. Khvostikov, A. S. Vlasov, P. V. Pokrovskiy, O. A. Khvostikova, A. N. Panchak, E. P. Marukhina, N. A. Kalyuzhnyy, V. M. Andreev, "Characterization of Ultra High Power Laser Beam PV Converters," in *AIP Conference Proceedings*, Fes, Morocco, 2019, vol. 2149, Art. no. 080003

Определение температурного поля барьерного разряда теневым фоновым методом

Коротких И. И.¹,
¹НИУ МЭИ

e-mail: *korotkikhii@mpei.ru*

Представлены результаты визуализации электрического разряда, возникающего на поверхности стекла или пластика. Данный разряд используется при создании, исследовании, контроле параметров озонаторов, для обеспечения их стабильной работы, а также как источник ультрафиолетового излучения; при исследовании обтекания поверхностей газовыми или плазменными потоками. Показана возможность применения теневого фонового метода для определения температурного поля барьерного разряда. Представлена методика нормировки по температуре, методика определения полей температуры и концентрации частиц. Продемонстрированы результаты создания оптоэлектронного комплекса для определения температурного поля барьерного разряда при атмосферном давлении. Исследованы особенности использования теневого фонового метода при диагностике слабоионизированных сред. Актуальность работы заключается в сложности диагностики низкотемпературной плазмы и газовых разрядов, применения теневого фонового метода для определения температурного поля такой среды решает эту проблему.

Список литературы

1. Application of Background Oriented Schlieren method for diagnostics of surface discharge I Korotkikh, Yu Malakhov and N Skornyakova // Journal of Physics: Conference Series. № 1923 012006.- 2021, doi: 10.1088/1742-6596/1923/1/012006, ISSN: 1742-6588, E-ISSN: 1742-6596, <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1923/1/012006> (2021)
2. Korotkikh, I., Malakhov, Yu., Skornyakova, N. High-speed registration of discharge formation in inductively-coupled plasma // Scientific Visualization. № 3, V. 9. - 2017, P. 70-76. (2017)

Свойства электрооптического модулятора из градиентного ниобата лития

Галуцкий В. В.¹, Шмаргилов С.А.¹, Суханов А.Е.¹, Строганова Е.В.¹
¹КубГУ

e-mail: galutskiy17v@mail.ru

Исследуются свойства электрооптического модулятора, изготовленного из кристалла ниобата лития с градиентом состава.

Развитием широкой функциональности новых материалов является гетерогенные структуры, состоящие из сегнетоэлектриков и гетерофазных сегнетоэлектрических композитов. Градиентные функциональные материалы, и градиентный ниобат лития в частности, позволяют формировать распределенное изменение эффективности электрооптического и нелинейно-оптического преобразования по длине кристалла. Распределенный характер изменения свойств функциональных материалов позволяет порционно увеличивать долю сигнала и потерь в преобразователе. Разогрев преобразователя при обработке мощных сигналов и как следствие уменьшение эффективности электрооптического или нелинейно-оптического преобразования могут быть скомпенсированы изменением состава кристалла и соответственно величины локального отклика материала на внешнее электрическое поле.

В работе исследуется электрооптический модулятор, изготовленный из ниобата лития с изменением состава по длине преобразователя от конгруэнтного до стехиометрического. При изготовлении модулятора по схеме Маха-Цандера в кристаллической пластине, изготовленной из градиентного ниобата лития применялся фотошаблон с различным изменением угла между волноводами.

В соответствии с принципом построения интерферометра схема содержит два сформированных в ниобате лития планарных одномодовых оптических волновода, которые соединены посредством двух Y-разветвителей на входе и выходе с коэффициентом деления 1:1. Управление показателем преломления нижнего волновода производится фазовым модулятором $\Phi(V)$. В работе его функцию выполняют два алюминиевых электрода, подключенные к источнику тока.

Для экспериментальной реализации созданы фотошаблоны с изменением угла между нижним и верхним плечом интерферометра от 2° до 10° и шириной волнопроводов в диапазоне 4 - 8 мкм, общая длина волнопроводов составила 5 мм. Закладываемое изменение угла в разветвителе связано с различным значением числовой апертуры при изменении состава кристалла и погрешностью технологического процесса при реализации фотошаблона в виде протонно-обменных волнопроводов.

Проведен анализ эффективности градиентных электрооптических модуляторов. Изучены электрооптические характеристики полученных градиентных структур в зависимости от состава $\text{Li}_x\text{Nb}_{2-x}\text{O}_{5-2x}$ и от прикладываемого напряжения смещения. Найдены оптимальные технологические режимы формирования различных топологий модуляторов в градиентных пластинах ниобата лития.

Работа выполнена при поддержке проекта FZEN-2023-0006.

Список литературы

1. Galutskiy V.V., Ponetaeva I.G., Puzanovskiy K.V., Stroganova E.V., Formation of channel proton-exchange waveguides in YB3+, ER3+:PPLN, Applied Nanoscience, v. 12(11), 3417-3420, 2022
2. Яковлева Т.В., Арефьева Н.Н., Расчет геометрических параметров канальных волноводов для электрооптических модуляторов, Известия вузов. Приборостроение, том. 56(5), 21-25, 2013 г.

Особенности измерения теплового сопротивления узкозонных светодиодов на основе InAsSbP/InAsSb

Черняков А. Е.¹, А.Л. Закгейм¹, Т. С. Лухмырина², А. А. Климов²

¹НТЦ микроэлектроники РАН

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: chernyakov.anton@yandex.ru

В работе экспериментально исследовалось тепловое сопротивление узкозонных светодиодов (СД) на основе InAsSb «флип-чип» конструкции. Известными преимуществами приведенной конструкции с оптической точки зрения является отсутствие затеняющих контактов, а с тепловой – расположение *p-n*-перехода и обеих контактных площадок в непосредственной близости к теплоотводящей коммутационной плате-носителю (основанию прибора), выполняемой из высоко теплопроводной AlN керамики.

Объект исследования: ИК светодиод представляющей собой чип с круглой мезой ($\varnothing=190 \mu\text{m}$) на основе двойной гетероструктуры $p\text{-InAsSbP}/n\text{-InAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, выращенной на слаболегированной подложке $n\text{-InAs}$, смонтированный с помощью пайки на теплопроводящей AlN плате- носителе.

Эксперимент: метод, позволяющий экспериментально исследовать полный спектр тепловых сопротивлений элементов конструкции светодиода и оценить температуру чипа, основан на определении теплового импеданса при пропускании через *p-n*-переход светодиода электрических разогревающих импульсов с широтно-импульсной модуляцией (ШИМ), осуществляемой по гармоническому закону, и измерении соответствующих изменений температуры перехода относительно корпуса или окружающей среды [1]. Температура определяется на основе измерения температурочувствительного параметра, в качестве которого используется прямое напряжение на *p-n*-переходе при пропускании через него малого постоянного измерительного тока (TCU) (величина измерительного тока выбирается такая, чтобы чип светодиод не разогревался) [2]. На основе вычисления амплитуд и фаз основных гармоник греющей мощности и температуры *p-n*-перехода определяется модуль теплового импеданса *p-n*-переход–корпус светодиода и сдвиг фаз между температурой *p-n*-перехода и греющей мощностью.

Предварительная калибровка и нахождение температурочувствительного параметра TCU и выбор измерительного тока: считалось, что ток 2 mA не разогревает чип, греющий ток был выбран 100 mA. Стандартная методика подразумевает нагрев образца с шагом 5 K и фиксацию напряжения на *p-n*-переходе. Для большинства приборов этот коэффициент линейный и лежит в пределах $-1 \div -2 \text{ mV/K}$. Особенностью исследуемого узкозонного светодиода является чувствительность к тепловому излучению при температуре выше 280 K. Из-за этого эффекта TCU не линеен. Для определения TCU и дальнейшего измерения теплового сопротивления необходимо «ослепить» - охладить светодиод.

Из-за низкой эффективности СД (менее 1 %), можно считать, что вся приложенная электрическая энергия переходит в тепло, а область выделения тепла равна площади мезы образца $S_{\text{mesa}}=0.028 \text{ mm}^2$.

Светодиод был помещен в криостат и в диапазоне температур $230 \div 280 \text{ K}$ был измерен TCU который составил -1.3 mV/K . Далее при температуре 250 K был получен спектр теплового

сопротивления и оценено общее тепловое сопротивление, которое лежит в пределах 250 K/W, разогрев чипа относительно теплоотвода составил ~ 9 К. Что в сравнении со светодиодами синего диапазона, является хорошим показателем.

Список литературы

1. MicReD, "T3Ster," [Online]. Available: <https://www.mentor.com/products/mechanical/micred/t3ster/>.
- 2.
3. IC Thermal Measurement Method—Electrical Test Method EIA/JEDEC JESD51-1 Standard [Online]. Available at: <http://www.jedec.org/standards-documents/results/JESD51-1>

Численное моделирование автоэмиссионной электронно-оптической системы на основе катодов с мультимодальным энергетическим спектром

Никифоров К. А.¹, Какорин Н. С.¹, Егоров Н. В.¹

¹СПбГУ

e-mail: *k.nikiforov@spbu.ru*

В настоящее время наблюдается увеличивающаяся востребованность в автоэмиссионных приборах различного назначения. Это объясняется физическими принципами, лежащими в основе функционирования таких устройств и определяющими их преимущества по сравнению с полупроводниковой (твердотельной) электроникой, а также вакуумной электроникой, построенной на катодах термоэлектронной эмиссии. В отличие от последних, автоэмиссионные катоды не требуют накала и затрат тепловой энергии, а также практически безынерционны, следовательно, разработанные на их основе приборы нового поколения принципиально более энергоэффективны, имеют уменьшенные массо-габаритные характеристики с увеличенным ресурсом работы при экстремально малом (до десятков наносекунд) времени готовности к включению [1]. Современные долговечные автоэмиссионные катоды, как правило, содержат в своем составе углерод или тонкопленочные защитные покрытия из различных аллотропных форм углерода [2]. Энергетический спектр электронов из большей части углеродосодержащих катодов, так же как и у известных полупроводниковых автокатодов, является немонохроматическим. Два и более максимума в энергетическом распределении электронов повышают важность разработки и моделирования соответствующей автоэмиссионной электронно-оптической системы, т.к. работа любого катода определяется не только фундаментальными – внутренними физическими процессами, но и внешними – в частности, системой специальных электродов, составляющих вместе с катодом электронно-оптическую систему соответствующего электровакуумного прибора и позволяющих при приложении к ним необходимых напряжений обеспечить фокусировку и транспортировку электронного пучка, эмиттированного катодом. Роль электродов в системе существенно возрастает при использовании в качестве источника электронов не термо-, а автоэмиссионного катода, т. к. в этом случае с помощью дополнительных электродов электронно-оптической системы осуществляется не только транспортировка и фокусировка пучка, но и управление как эмиссионной способностью катода, так и самим электронным пучком.

В данной работе рассматриваются особенности численного моделирования автоэмиссионной электронно-оптической системы, основанной на катодах с немонохроматическим спектром начальных скоростей и энергий эмиттированных электронов.

Представляются результаты применения метода частиц в ячейках в программном пакете с открытым исходным кодом DAISI, разработанным в Санкт-Петербургском государственном университете и дополненным возможностью численного моделирования автоэлектронных источников с выбором начального распределения скоростей электронов, а также автоматизированным расчётом вольт-амперных характеристик.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00937. Работы проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Вычислительный центр» и «Нанотехнологии».

Список литературы

1. N.Egorov, E.Sheshin, Field emission electronics. Springer Series in Advanced Microelectronics, 60, 2017.
2. N. Egorov, E. Sheshin, Carbon-Based Field Emitters: Properties and Applications. Topics in Applied Physics, 2020. Modern Developments in Vacuum Electron Sources Vol. 135, pp. 449-528.

Метод определения оптических свойств интегральных волноводов, изготовленных по технологии кремний-на-изоляторе

Ершов А. А.¹, Еремеев А.И.¹, Раяккенен Д.В.¹, Никитин А.А.¹, Еськов А.В.¹, Семёнов А.А.¹, Устинов А.Б.¹
¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: aaershov@stud.etu.ru

Технология кремний-на-изоляторе является одной из основных платформ изготовления фотонных интегральных схем (ФИС), что обусловлено следующими преимуществами: высокий контраст показателя преломления кремниевого волновода относительно оболочки из диоксида кремния; сравнительно низкий уровень потерь на распространение оптического излучения в С-диапазоне и совместимость с КМОП-технологией изготовления. Такие преимущества позволяют создавать структуры с малым энергопотреблением, малым радиусом изгиба, что обеспечивает высокую степень интеграции и, соответственно, низкую стоимость изготовления [1-3].

Целью работы является разработка метода определения оптических параметров кремниевых микроволноводов, описывающих дисперсионные свойства, коэффициент связи по мощности κ и декремента затухания α . Для этого в работе используются следующие опорные элементы: прямой микроволновод, волноводный ответвитель и микрокольцевой резонатор (МКР) длиной $l = 201,06$ мкм. Элементы ФИС созданы на основе кремниевых микроволноводов с поперечным сечением 500×220 нм². Ввод и вывод излучения осуществлялся при помощи брэгговских преобразователей и массива оптических волокон.

Метод исследования ФИС состоит из четырёх этапов: На первом этапе измеряется передаточная характеристика прямого волновода, по которой определяются потери на ввод/вывод излучения. Теоретическая характеристика, аппроксимирующая рабочую характеристику брэгговских преобразователей, описывается следующим выражением: $T_B = 0,0076 \cdot \exp(-(f - 192)^2/6,2)$, где f – частота в ТГц.

На втором этапе при помощи волноводного ответвителя, состоящего из полукольца радиусом 32 мкм и прямого волновода, определяется коэффициент связи по мощности, который составляет $\kappa = 0,056$ на частоте 192 ТГц.

На третьем этапе для определения дисперсионных свойств кремниевых микроволноводов используется передаточная характеристика МКР, из которой находятся экспериментальные значения резонансных частот, соответствующих резонансным волновым числам $\beta = 2\pi/l$. Затем, используя метод Маркатили [4, 5], рассчитывается дисперсионная характеристика основной моды интегрального волновода. Поперечные размеры волноведущих структур определяются путём наилучшего совпадения теоретических и экспериментальных законов дисперсии.

На четвёртом этапе полученные параметры микроволноводов используются для расчёта передаточных характеристик МКР [6]. Величина декремента затухания α находится из условия наилучшего совпадения экспериментальных и теоретических передаточных характеристик. Для исследуемого МКР она составляет $\alpha = 1,2$ дБ/мм.

Проверка полученных параметров выполнялась путём сопоставления результатов расчётов передаточных характеристик интерферометров Маха-Цендера с экспериментальными данными.

Полученные теоретические зависимости с высокой точностью описывали экспериментальные характеристики, что говорит о достоверности рассчитанных характеристик. Таким образом, одним из неразрушающих методов определения оптических свойств ФИС является измерение передаточных характеристик таких опорных элементов, как прямого волновода, волноводного ответвителя и микрокольцевого резонатора.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSEE-2022-0017).

Список литературы

1. Wang, J. [et al.] On-chip silicon photonic signaling and processing: a review // *Science Bulletin*. – 2018. – V. 63, N. 19. – P. 1267–1310.
2. Pathak S. *Photonics Integrated Circuits* // *Nanoelectronics*. – Elsevier, 2019. – P. 219-270.
3. Vivien, L., Pavesi, L. (ed.). *Handbook of silicon photonics*. – Taylor & Francis, 2016. – 812 p.
4. Marcatili, E. A. Dielectric rectangular waveguide and directional coupler for integrated optics // *Bell System Technical Journal*, 1969. – V. 48, N. 7. – P. 2071-2102.
5. Westerveld, Wouter J. [et al.] Extension of Marcatili's analytical approach for rectangular silicon optical waveguides // *Journal of Lightwave Technology*, 2012. – V. 30, N 14. – P. 2388-2401.
6. Bogaerts, W. [et al.] Silicon microring resonators // *Laser & Photonics Reviews*, 2012. – V. 6, N. 1. – P. 47–73.

Исследование пограничных слоев жидкости с помощью метода каустик лазерного излучения

Ведяшкина А. В.¹, Расковская И.Л.², Павлов И.Н.²

¹ОКБ МЭИ

²МЭИ

e-mail: *vedyashkina@mail.ru*

В последние годы метод каустик оптического излучения широко применяется для исследования прочностных характеристик твердых сред, а также для количественной оценки коэффициентов интенсивности статических и динамических напряжений в механике разрушения как для прозрачных, так и для непрозрачных материалов. Помимо этого, каустические поверхности наблюдаются в ряде экспериментов по исследованию оптически-неоднородных сред и пограничных слоев жидкости и несут в себе дополнительную информацию о параметрах среды, в связи с чем область применения метода каустик оптического излучения может быть существенно расширена.

В данной работе показано применение метода каустик лазерного излучения, который основан на регистрации геометрических параметров каустических поверхностей, формируемых зондирующим излучением в неоднородной среде, для диагностики пограничных слоев жидкости [1]. Создана экспериментальная установка для исследования процессов диффузии, разработан алгоритм обработки экспериментальных рефракционных картин, позволяющий восстанавливать распределение показателя преломления в слое на границе двух жидкостей и определять коэффициент диффузии посредством косвенных измерений, приведены результаты экспериментов для диффузионного слоя вода-раствор электролита.

Кроме того, в работе метод каустик применен для определения температуры поверхности объекта, создающего температурное поле в прозрачной жидкости, и показана возможность применения метода каустик для определения краевого угла смачивания по рефракционному изображению, полученному при зондировании капли, лежащей на прозрачной подложке, широким коллимированным лазерным пучком [2].

Разработанные на основе метода каустик лазерного излучения экспериментальные установки, представленные в работе, могут быть использованы для бесконтактного непрерывного мониторинга параметров стратифицированных прозрачных сред. Предложенные установки позволяют визуализировать каустические поверхности, возникающие при зондировании пограничных слоев жидкости структурированным лазерным излучением, что, в свою очередь, дает качественное представление о структуре неоднородности, параметрах исследуемой среды и их динамике. Полученные в работе результаты могут быть использованы для бесконтактного контроля свойств природных стратификаций.

Список литературы

1. Ведяшкина А.В., Ринкевичюс Б.С., Павлов И.Н., Расковская И.Л., Толкачев А.В. Оптико-электронный комплекс для исследования процессов тепло- и массообмена лазерным бесконтактным методом // Научная визуализация. 2019. Т. 11. № 3. С. 43-53.
2. Павлов И.Н., Расковская И.Л., Толкачев А.В. Структура микрорельефа поверхности испаряющейся с шероховатой подложки капли как возможная причина гистерезиса краевого угла // ЖЭТФ, 2017, том 151, вып. 4, с. 670-681.

Краевая инжекционная электролюминесценция GaN pn структур

Стрельчук А. М.¹, Иванцов В.А.², Суховеев В.², Калядин А.Е.¹

¹ФТИ им. А.Ф.Иоффе

²Ostendo Technologies, Inc. CA 92011, USA

e-mail: *iosh_q@mail.ru*

Известно, что впервые инжекционная электролюминесценция (ИЭЛ) в полупроводниках наблюдалась О.В. Лосевым в 1920х гг в видимой области спектра при исследовании природных pn переходов в таком широкозонном полупроводнике, как карбид кремния. Затем в центре исследований оказались полупроводники AZB5, для которых технологические проблемы получения качественных pn структур оказались решены раньше, чем в случае SiC. В частности, при исследовании pn структур на основе GaP было обнаружено, что при нагреве выше комнатной температуры интенсивность краевой ИЭЛ падает. Позднее, исследование pn структур на основе различных политипов SiC показало, что, в отличие от GaP, интенсивность краевой ИЭЛ в SiC росла при нагреве выше комнатной температуры. Рост интенсивности краевой ИЭЛ при нагреве в диапазоне температур 300-800 К наблюдался нами в 6Н-, 4Н- и 3С-SiC pn структурах с энергией активации $\sim(70-150)$ meV [1-6]. В настоящее время наиболее активно исследуемым широкозонным полупроводником является нитрид галлия GaN, а также твердые растворы на его основе. В отличие от SiC и GaP нитрид галлия является прямозонным полупроводником и свойства краевой ИЭЛ в данном случае представляют особый интерес. В настоящее время параметры краевой ИЭЛ (особенно температурной зависимости интенсивности краевой ИЭЛ при температурах выше комнатной) в GaN pn структурах изучены недостаточно, их исследованию и посвящена данная работа. Слои GaN n- и p-типа проводимости выращивались методом хлорид гидридной газофазной эпитаксии в диапазоне температур 1000°C-1050°C. Слои легировались кремнием и магнием для получения n- и p-типа проводимости, соответственно. Характеризация эпитаксиальных слоев проводилась методами рентгеновской дифракции, вольт-фарадных характеристик, поверхностной топографии и низко-когерентной интерферометрии.

Вольт-амперные характеристики исследовавшихся GaN pn структур характеризуются большими падениями напряжения при относительно небольших прямых токах, а при малых прямых и обратных напряжениях наблюдаются значительные избыточные токи. В спектрах ИЭЛ при 300 К наблюдаются две полосы: краевая полоса ИЭЛ в ближней ультрафиолетовой (УФ) области ($h\nu_{\max} \sim 3,33$ eV) и в желтой области спектра ($h\nu_{\max} \sim 2,15$ eV). В диапазоне температур 300-650 К определены такие параметры полос ИЭЛ в зависимости от температуры и тока, как положение максимума, полуширина, интенсивность и др.. В частности, для коротковолновой УФ ИЭЛ установлено, что при нагреве от 300 К ее интенсивность падает с энергией активации ~ 80 мэВ, максимум УФ полосы при нагреве смещается в длинноволновую область линейно с температурой с наклоном " $-5,4 \cdot 10^{-4}$ эВ/К" и в диапазоне температур 300-650 К энергия фотона в максимуме полосы на 66 мэВ меньше E_g , полуширина при нагреве до 430 К уменьшается с 235 мэВ до ~ 145 мэВ, сохраняет это значение до температуры 550 К и затем растет до 195 мэВ при 650 К. Обсуждаются полученные результаты.

Список литературы

1. V. A. Dmitriev, P. A. Ivanov, V. I. Levin, I. V. Popov, A. M. Strel'chuk, Yu. M. Tairov, V. F. Tsvetkov, V. E. Chelnokov, Fabrication of epitaxial silicon carbide pn structures obtained from bulk SiC crystals, Sov. Tech. Phys. Lett. 13 (1987) 489-490.

2. M. M. Anikin, V.V. Evstropov, I.V. Popov, A. M. Strel'chuk, A. L. Syrkin, Variant of non-classical thermal injection current in SiC pn structures, *Semiconductors* 23 (1989) 1813-1818.
3. M. M. Anikin, A. M. Strel'chuk, A. L. Syrkin, V. E. Chelnokov, A. E. Cherenkov, Temperature and current dependence of the intensity of the edge injection electroluminescence of SiC p-n structures, *Semiconductors* 28 (1994) 171-174.
4. A. M. Strel'chuk, A. A. Lebedev, N. S. Savkina, A. N. Kuznetsov, Temperature dependence of the band-edge injection electroluminescence of 3C-SiC pn structure, *Mater. Sci. Forum* 556-557 (2007) 427-430.
5. A M. Strel'chuk, E. V.Kalinina, A A. Lebedev, Temperature dependence of the band-edge injection electroluminescence of 4H-SiC pn structure, *Mater. Sci. Forum* 740-742 (2013) 569-572.
6. A.M. Strel'chuk, Yu.S. Kuz'michev, K.F. Shtel'makh, Features of the band-edge injection electroluminescence in 4H-SiC pn structures, *Mater. Sci. Forum* 821-823 (2015) 289-292.

Участие дефектов, локализованных на гетерограницах, и протяженных дефектов в деградации светоизлучающих приборов на основе нитридов

Тальнишних Н. А.¹, Иванов А.Е.¹, Шабунина Е.И.², Шмидт Н.М.²

¹НТЦ микроэлектроники РАН

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

e-mail: *nadya.fel@mail.ru*

Несмотря на впечатляющие успехи технологии светодиодов и лазеров на основе нитридов, проблема низкого срока службы лазеров и светодиодов зеленого и особенно ультрафиолетового диапазона не решена. Как отмечено в обзоре [1], во многом это связано с тем, что не выяснен механизм генерации дефектов под действием инжекционного тока и нет единого мнения о том, в какой части излучающих квантоворазмерных структур развивается этот процесс. Во многих работах в качестве основного механизма привлекается Оже-рекомбинация, а также генерация точечных дефектов Шокли-Рида-Холла в активной области или в дислокациях и границах зерен.

В данной работе исследовалось снижение внешней квантовой эффективности (ВКЭ) коммерческих светодиодов на основе квантоворазмерных структур InGaN/GaN синего и зеленого диапазонов и AlGaIn/GaN ультрафиолетового диапазона при двух режимах старения: стандартном при плотности тока 80 А/см^2 и подогреве до $80 \text{ }^\circ\text{C}$, и ускоренном в импульсном режиме при плотности тока до 3 кА/см^2 .

Анализ экспериментальных данных, полученных в данной работе и в многочисленных работах других авторов, позволил выявить две характерные стадии снижения ВКЭ в светоизлучающих приборах на основе нитридов под действием инжекционных токов. Они наблюдаются как при стандартных методах старения, так и при ускоренных испытаниях в импульсном режиме.

Начальная стадия снижения ВКЭ в максимуме развивается в квантовых ямах, находящихся в области объемного заряда (ООЗ) р-п перехода, в результате взаимодействия инжектируемых носителей с дефектами, локализованными на гетерограницах. Об этом свидетельствуют экспериментально наблюдаемые изменения ВАХ и распределений значений ВКЭ по длинам волн светодиодов: рост величины туннельных токов, ухудшение выпрямляющих свойств р-п перехода, снижение величины латерального флуктуационного потенциала. Предполагается, что наблюдаемые изменения вызваны не столько генерацией новых дефектов, сколько трансформацией дефектов, имеющихся на гетерограницах, путем конфигурационной перестройки в результате электрон-фононного взаимодействия. Эти изменения приводят к смене механизма транспорта носителей заряда от туннельного к диффузионному, от латерального к вертикальному по проводящим каналам вне ООЗ. Неоднородное протекание тока подтверждается экспериментальными распределениями мощностных и спектральных характеристик по излучающей поверхности.

Неоднородное протекание тока приводит ко второй характерной стадии снижения ВКЭ под действием инжекционного тока. На этой стадии повышается локальная плотность тока в проводящих каналах, таких как дефекты упаковки, границы зерен, дислокации. В результате становится возможным процесс многофононной рекомбинации носителей на дефектах с локальной передачей энергии, достаточной для его миграции. Этот механизм приводит не только

к снижению значений ВКЭ, но и к выходу из строя светоизлучающих приборов. Экспериментальным подтверждением является локальное выделение галлия или индия в полностью деградировавших приборах.

Список литературы

1. Renso N., De Santi C., Caria A., Dalla Torre F., Zecchin L., Meneghesso G., Zanoni E. and Meneghini M., Degradation of InGaN-based LEDs: Demonstration of a recombination dependent defect-generation process, J. Appl. Phys. 127, 185701 (2020); <https://doi.org/10.1063/1.5135633>

Выходные характеристики линеек лазерных диодов на основе квантоворазмерных гетероструктур (Al)GaAs/AlGaAs/GaAs и GaAsP/GaInP/GaAs

Гультиков Н.В.¹, Старынин М.Ю.², Шестак Л.И.², Панарин В.А.², Мармалюк А.А.¹, Ладугин М.А.¹

¹ООО «Сигм Плюс»

²ООО «НПП «Инжект»

e-mail: *nv.guljtikov@physics.msu.ru*

Мощные полупроводниковые линейки лазерных диодов (ЛЛД), работающие в спектральном диапазоне 800 – 810 нм, актуальны в таких практических приложениях, как накачка твердотельных лазеров, обработка материалов и медицина [1]. Для изготовления данных приборов в настоящее время широко используются полупроводниковые гетероструктуры AlGaAs/GaAs (Al-содержащая гетероструктура) и GaAsP/GaInP (Al-free гетероструктура), конструкция и технология которых требует постоянного совершенствования.

В настоящей работе исследовались ЛЛД длиной 5 мм и 10 мм на основе (Al)GaAs/AlGaAs/GaAs и GaAsP/GaInP/GaAs гетероструктур с одной квантовой ямой и расширенными волноводами, а также приводится сравнение технологических особенностей получения и материальные параметры исследуемых гетероструктур. Рост гетероструктур осуществлялся методом МОС-гидридной эпитаксии в среде высокочистого водорода при пониженном давлении на подложках GaAs. Реагентами элементов III группы периодической системы являлись TMAI, TMGa и TMIn, а элементов V группы - PH₃ и AsH₃.

Показано, что максимальная выходная мощность ЛЛД на основе GaAsP/GaInP/GaAs больше примерно в 1.5-2 раза по сравнению с линейками на основе (Al)GaAs/AlGaAs/GaAs и составляла 150 Ватт для линеек длиной 5 мм и 380 Ватт для линеек длиной 10 мм. Выходная оптическая мощность Al-содержащих ЛЛД ограничена катастрофической оптической деградацией активного элемента. Приведены расчетные значения электрических и тепловых сопротивлений исследуемых ЛЛД.

Возможной причиной отличия выходных характеристик ЛЛД является разная степень нагрева зеркал резонатора. До порогового тока основным источником тепловой мощности является поверхностная рекомбинация, а по мере увеличения тока накачки начинают увеличиваться два других источника: джоулев нагрев и поглощение [2]. Поглощение при больших токах накачки является главным источником тепла. При достижении определенной критической температуры перегрева (в литературе приводится довольно широкий диапазон температур, около 100-400 °С) процесс нагрева зеркала начинает быть необратимым [3, 4]. Что важнее всего, безызлучательная поверхностная рекомбинация является триггером данного процесса [2]. Чем больше ее скорость, тем раньше будет подключаться главный источник тепла – поглощение оптического излучения, тем при меньших токах накачки наступит деградация активной области.

Еще одним существенным недостатком AlGaAs/GaAs ГС является наличие алюминия, который имеет высокое сродство к кислороду. По этой причине на этапах изготовления лазерных излучателей на поверхности могут образовываться дефекты, которые, являясь центрами безызлучательной рекомбинации, увеличивают скорость поверхностной рекомбинации.

Для оценки перегрева выходного зеркала резонатора ЛЛД была создана качественная модель, которая учитывает нагрев грани из-за поверхностной безызлучательной рекомбинации. Показано, что уменьшение скорости поверхностной безызлучательной рекомбинации с 10^6 см/с до 10^5 см/с, уменьшает температуру зеркала в 4-5 раз.

Список литературы

1. Bachmann F., Loosen P., Poprawe R. High Power Diode Lasers: Technology and Applications (NY: Springer New York, 2007)
2. Ziegler M., Talalaev V., Tomm J. W., Elsaesser Th., Ressel P., Sumpf B., Erbert G.. Appl. Phys. Lett. 92, 203506 (2008)
3. Алферов Ж.И., Кацавец Н.И., Петриков В.Д., Тарасов И.С., Халфин В.Б. ФТП, 30, 3, 475-483(1995)
4. Tomm J.W., Ziegler M., Hempel M., Elsaesser T. Laser and photonics reviews. 5, 3, 422-441 (2011)

Поверхностные явления

Температурные зависимости электронно-стимулированной десорбции атомов лития с поверхности интерметаллида Li_xAu_y

Лапушкин М. Н.¹, Ю.А. Кузнецов¹
¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: lapushkin@ms.ioffe.ru

2D-слои интерметаллидов золота со щелочными металлами (ЩМ) Li_xAu_y , Na_xAu_y , K_xAu_y и Cs_xAu_y могут быть полупроводниками. Кристаллы Li_xAu_y , Na_xAu_y , и K_xAu_y являются металлами.

Измерения выполнены *in situ* в высоковакуумной установке «Спектрометр ЭСД» при температуре $T = 300$ К. На поверхность W ленты напыляли Au толщиной 2 монослоя (МС). В дальнейшем на слой Au напыляли покрытие Li толщиной не более 3 МС. Измерения выполнялись в диапазоне T от 160 К до 300 К при энергии бомбардирующих электронов в диапазоне от 0 до 200 эВ. Электронно-стимулированная десорбция (ЭСД) наблюдается только с поверхности полупроводников или диэлектриков.

На зависимости выхода ЭСД от энергии возбуждающих электронов наблюдаются два резонансных пика с максимумами при 64 и 82 эВ, соответствующие энергиям ионизации уровней Au $5p_{3/2}$ и $5p_{1/2}$, как при адсорбции атомов Li на Au.

Не наблюдается ЭСД атомов Li при покрытиях Li меньше 1 МС, что отражает металлический характер интерфейса ЩМ/Au и формирование на поверхности золота субмонслоного покрытия атомов Li. Для покрытий больше 1 МС лития начинает наблюдаться ЭСД атомов Li и формируется полупроводниковое соединение Li_xAu_y . Если предположить что образуется при первом напылении Li равномерно распределенный по пленке интерметаллид Li_{10}Au , который очевидно является металлическим. Поэтому происходит островковое образование полупроводникового Li_xAu_y со стехиометрией близкой к LiAu. По мере увеличения дозы напыления происходит линейный рост выхода ЭСД, что означает увеличение площади занимаемой полупроводниковым Li_xAu_y . Максимум выхода ЭСД атомов Li достигается при напылении 2 МС лития. Это может означать, что при напылении дозы в 2 МС лития происходит формирование полупроводникового соединения LiAu. При более 2 МС лития происходит спад выхода ЭСД атомов Li, что означает формирование второго монослоя адсорбированных атомов Li на поверхности и (или) образование соединений Li_xAu_y с $y > x$, которые являются металлическими.

При уменьшении T образца наблюдается линейный спад выхода ЭСД атомов Li. Понижение температуры с 300 К до 160 К приводит к уменьшению выхода ЭСД атомов Li в 1.55 раза.

Уменьшение выхода ЭСД атомов Li с понижением T можно объяснить в рамках ранее предложенной модели ЭСД атомов ЩМ для Li [1]. Облучение электронами более 55 эВ приводит к возбуждению состояний Au $5p_{3/2}$ в зону локальных состояний ниже дна зоны проводимости с образованием дырки на уровне Au $5p_{3/2}$. Электрон локальном состоянии может быть захвачен в зону проводимости в дальнейшем захватывается на незанятые состояния атома Li с последующей его десорбцией. Вероятность захвата электрона локальном состоянии в зону

проводимости уменьшается с уменьшением T , что приводит к понижению выхода ЭСД атомов Li.

В распределении по кинетическим энергиям слетающих при ЭСД атомов Li наблюдается два пика: низкоэнергетический (НЭ) при энергии 0.11 эВ и высокоэнергетический (ВЭ) при энергии 0.28 эВ. Положение НЭ пика при уменьшении T с 300 К до 160 К не изменяет положения пика, а положение ВЭ пика при уменьшении T незначительно сдвигается в сторону больших энергий и уменьшается ширина пика в 1.2 раза. НЭ пик связан с возбуждением состояний Li в интерметаллиде Li_xAu_y , а ВЭ с возбуждением поверхностных атомов Li.

Были проведены расчеты электронной плотности состояний изолированных 2D-слоев интерметаллида LiAu различной толщины. Валентная зона интерметаллида образована в основном Au $5d$ состояниями. Было показано, что 2D-слои интерметаллида LiAu толщиной 1 и 2 монослоя являются полупроводниками, ширина запрещенной зоны которых уменьшается со значения 2.0 эВ для монослойной пленки до 0.48 эВ для двухслойной пленки. Этот факт подтверждает экспериментальные результаты формирования полупроводниковых интерметаллидов при наблюдении ЭСД атомов Li. Более толстые пленки интерметаллида являются металлическими.

Список литературы

1. Кузнецов Ю.А., Лапушкин М.Н. Энергетические характеристики электронно-стимулированной десорбции атомов лития из слоев лития на поверхности Li_xAu_y . ФТТ, Т.64, В.6, С. 732 – 738, 2022.

Исследование электропроводности полупроводникового газового сенсора на основе SnO_2 при детектировании летучих углеводородов на примере CH_4 , C_3H_8 , C_4H_{10} и $n-C_7H_{16}$ в режиме термоциклирования

Казаков С. А.¹, Гревцев М.А.¹, Соловьев С.М.¹, Жогаль Н.Н.¹, Лакунцова О.Е.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: kazakov59@mail.ioffe.ru

Проведен ряд измерений в рамках исследований резистивных полупроводниковых газовых сенсоров, изготовленных на основе композитных материалов из оксидов металлов, легированных редкоземельными элементами, и работающих в режиме термоциклирования. Получены данные для построения "спектральных" калибровочных характеристик датчиков на ряд исследованных газов CH_4 , C_3H_8 , C_4H_{10} , $n-C_7H_{16}$, содержащихся в атмосферном воздухе. По температурным максимумам калибровочных кривых изменения электропроводности сенсоров за период времени термоциклирования рассчитаны значения энергии активации хемосорбции для детектируемых молекул микропримесей. Выявлено и экспериментально показано, что значения энергии активации хемосорбции детектируемых молекул, полученные в точке мгновенного равновесия, коррелируют со справочными спектрометрическими данными по поглощению ИК-излучения этими молекулами в газовой фазе, а именно, с величинами энергий активации углерод-водородных связей в этих органических молекулах [1]. Такой результат позволяет рассмотреть возможность построения нового класса малогабаритных полупроводниковых ИК-спектрометров для газового анализа с быстрым преобразованием Фурье, по крайней мере, для исследованного семейства летучих углеводородов [2]. В настоящей работе на примере хемосорбции молекул *n*-гептана ($n-C_7H_{16}$) на поверхности диоксида олова (SnO_2), модифицированного атомами благородных и редкоземельных элементов, экспериментально [3,4] получена степенная взаимосвязь между мгновенными значениями проводимости датчика в точке экстремума изменения его электропроводности от температуры поверхности за время одного термоцикла и значениями концентраций *n*-гептана в атмосферном воздухе. Линеаризация полученной взаимосвязи указанных параметров в логарифмических координатах позволяет определить энергию активации хемосорбции заданного анализита на поверхности заданного полупроводника. Оценки показывают, что величина энергии хемосорбции составляет ~ 0.09 эВ, что при переводе в обратные сантиметры даёт значение ~ 730 $см^{-1}$. Эта величина соответствует значению максимального поглощения ИК-излучения молекулами *n*-гептана в газовой фазе, что подтверждается стандартными библиотечными данными спектров поглощения молекул органических соединения в ближней ИК области [1]. Следует отметить, что область в $\sim 720-740$ $см^{-1}$ характерна для активации углерод-водородных связей в цепочке группы $-CH_2-$ в молекуле *n*-гептана. Можно сделать вывод о том, что *n*-гептан на поверхности диоксида олова хемосорбируется преимущественно за счет активации CH_2 -групп, о чем также свидетельствует определенный в эксперименте порядок гетерогенной реакции хемосорбции *n*-гептана, $n \sim 0.224$, оказавшийся близким к теоретически рассматриваемому в литературе показателю степени $n = 0.25$ [5].

Настоящая работа поддержана Фондом Социальных Инвестиций грант СТ-108114, рег. № 122011300301-0, код темы 108114

Список литературы

1. *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*, Last update to data: 2022, DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>, <https://webbook.nist.gov>.
2. *Kazakov S.A., Grevtsev M.A., Khavrov G.D.* Calibration algorithm for semiconductor gas sensors and determination of volatile hydrocarbon concentrations in atmospheric air using Fourier transforms // *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2020, Volume 1697, 1, Art No: #0122434, <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1697/1/012243>
3. *Казиков С.А. и др.* Устройство для анализа многокомпонентных газовых сред. Полезная модель. Патент РФ № 200724 от 9 июля 2020.
4. *Казиков С.А. и др.* Способ анализа многокомпонентных газовых сред и устройство для его осуществления. Патент РФ № 2746390 от 9 июля 2020.
5. Гаман В.И. Физика полупроводниковых газовых сенсоров: монография. – Томск: Изд-во НТЛ, 2012. – 112 с.

Высокостабильный кондуктометрический сенсор на *ppb*-концентрации озона в воздухе на базе тонких плёнок PdO

Чистяков В. В.¹, Рябцев С.В.², Аль-Хабиб А.А.К.², Соловьев С.М.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Воронежский государственный университет

e-mail: v.chistyakov@mail.ioffe.ru

Тонкие (~30 нм) плёнки тетрагональной фазы PdO **впервые** использовались в качестве сенсора на озон [1]. Плёнки получали окислением на воздухе при 550°C слоев термически осаждённого на поликоровые подложки металлического Pd. Последние были снабжены контактами (Pt) для измерения сопротивления R , $\kappa\text{Ом}$ пленок и платиновым же нагревателем, служившим одновременно датчиком температуры.

Анализ спектроскопических данных PdO в диапазоне 300-900 нм (4.1..1.4 эВ) дал ширину запрещенной зоны $E_g \sim 2.3$ эВ.

В работе использовался режим температурной модуляции рабочего слоя PdO по синусоидальному закону от 50 до 350 °C с периодом $T=300$ с и записью сопротивления R одна точка в 5 с. Гармоническая мода выбиралась из соображений обеспечения селективности сенсора [2] через Фурье-анализ отклика. Источником озона служил генератор ГС-024-25, снабженный фильтром для устранения фоновой концентрации O_3 в воздухе.

Длительный опыт измерений на чистом воздухе и при 4-х концентрациях $C = 25, 55, 90$ и 250 *ppb* демонстрировал высокую долговременную стабильность ($\pm 1.5..4\%$) откликов как самой электропроводности (DC) $\sigma(t) = \frac{1}{R(t)}$, мС , так и её изменения в измерительном периоде

$$\Delta\sigma(t) = \frac{1}{R(t)} - \frac{1}{R(0)} \quad (1).$$

Авторы объясняют это устойчивостью стехиометрии оксида, слабой ионной миграцией, стабильностью его структуры и каталитических свойств, а также слабым вкладом в электропроводность тепловых и пр. флуктуаций электрофизических параметров.

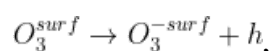
Эта высокая стабильность при идеальном выдерживании температурного режима позволила воспроизводимо от опыта к опыту выделить вклад в общий сигнал от озона (нетто-сигнал) как:

$$\Delta\sigma(t, C_{\text{O}_3}) = \frac{1}{R(t, C_{\text{O}_3})} - \frac{1}{R(t, \text{air})} \quad (2).$$

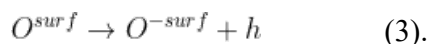
Пересчёт (2) делал эти нетто-отклики чисто акцепторными ($\Delta\sigma > 0$), что подтверждало *p*-тип проводимости, и по характеру более простыми: всего с одним максимумом при неизменной температуре $t_{\text{max}}^{\circ} = 275 \pm 3$ °C, причём в фазе её падения. (Другие экстремумы (1), обусловленные сорбцией атмосферного кислорода и пр. причины исчезали при вычитании.)

Тогда в любой момент времени t прирост $\Delta\sigma = q\mu\Delta n_h$ (q - элементарный заряд, $\mu = \text{const}$ - подвижность) определялся исключительно хемосорбционным (O_3) приростом

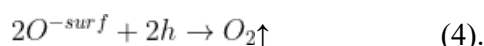
числа дырок Δn_h вследствие захвата валентных электронов на поверхностные состояния (ПС) PdO. Такие ПС связывают с хемосорбированными молекулами O_3



и с более активными продуктами её распада - атомами O



Можно предположить, что максимум чистого отклика (2) на стадии падения $t_s^\circ C$ говорит об усилении рекомбинации накопленных ионов (3) по схеме



В пользу (4) говорит и тот факт, что при УФ-освещении плёнки ($\lambda = 260$ нм, 4.8 эВ) сигнал уменьшался, что можно объяснить ростом n_h и усилением ограниченной числом дырок n_h десорбции при одновременном замедлении процесса зарядки ПС (3).

Отклики (2) подвергались Фурье-анализу (Maple 2018) в области частот $f = 0..10f_0$ ($f_0 = \frac{1}{T} = \frac{1}{300} \text{ с}^{-1}$). В интервале $f=0..2f_0$ амплитуды $A(f)$ сигналов при всех C, ppb быстро убывали с ростом f , не проявляя особенностей, а фазы $\varphi(f)$ для всех четырёх точек C практически сливались, расходясь на больших частотах.

Имела место пропорциональность концентрации C, ppb для нулевой Фурье-амплитуды $A(0) = Q \cdot C$ (adj-R²=0.985) с коэффициентом $Q=0.017\pm 0.002$ ($P=0.95$). В то же время для максимумов $\Delta\sigma_{max}$ на выбранном доверительном уровне P такого не наблюдалось, но хорошо работала (adj-R²=0.99) степенная формула $\Delta\sigma_{max} = WC^n$ с $n=0.625\pm 0.070$. В принципе, этих двух величин вкупе с t_{max}° достаточно для селективной *мультивариантной калибровки* сенсора по образцу [3], что демонстрируется на примере аналитов-дистракторов (NO_2, Cl_2).

В итоге, авторами решены две из 3S-проблемы (sensitivity, selectivity, stability) химических сенсоров, а именно, чувствительность на уровне 0.5 ПДК озона (50 ppb) и стабильность работы.

Список литературы

1. Ievlev V.M., Ryabtsev S.V., Samoylov A.M. et al. Thin and ultrathin films of palladium oxide for oxidizing gases detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2018. V.55, Pt. 2, February, P. 1335-1342. doi.org/10.1016/j.snb.2017.08.121
2. Nakata S., Takahara N. Distinction of gaseous mixtures based on different cyclic temperature modulations. *Sensors Actuators: B*. 2022. V.359, P. 131615-13621. DOI: 10.1016/j.snb.2022.131615
3. Чистяков В.В., Казаков С.А., Гревцев М.А. и др. Нелинейно-регрессионный алгоритм обработки сигналов полупроводниковых химических сенсоров, обеспечивающий селективное детектирование примесей в искусственном воздухе. *Письма в журнал технической физики*. 2021, вып.6, С.15-19. DOI: 10.21883/PJTF.2021.06.50751.18564

Зондовая мессбауэровская диагностика динамических свойств 2D-размерных слоев воды на алюмосиликатной подложке

Залуцкий А. А.¹, Морозов В.В.¹, Соколов А.Ю.¹, Школьников Е.Н.¹

¹Ярославский государственный технический университет

e-mail: zalutskii-2017@mail.ru

В реальном трехмерном (3D) мире всегда имеются поверхности (2D), и в зависимости от внешних условий могут фиксироваться взаимные переходы (2D \leftrightarrow 3D). Цель доклада – продемонстрировать специально созданный на базе зондовой мессбауэровской спектроскопии (МС) подход, потенциально способный на качественном уровне с использованием экспериментальных данных диагностировать физику двух измерений в тонких монопленках воды, адсорбированных в монтмориллоните.

Нами были получены следующие основные результаты:

1. В докладе представлен набор упругих параметров (модуль сдвига, коэффициент Пуассона, параметр Грюнайзена) для двумерного гексагонального льда и обсуждается количественная оценка толщины, плотности, вязкости для квазижидкого слоя воды. Подтверждено отсутствие разницы между мессбауэровскими параметрами спектров для систем, находящихся в двух и трех измерениях [1].
2. Наиболее пригодным для решения наших задач оказался подход модульного дизайна [2] и построенные из тетраэдрических атомов модельные кластерно-стержневые (КС) структуры [3] по своей метрике и топологии удовлетворительно соответствуют системе «поверхностный лед-глинистая подложка». По причине своего напряженного характера КС структуры способны [3] (1) высвободить запасенную упругую энергию, а (2) сама трансформация стержня может сопровождаться его удлинением и раскручиванием. Экспериментальным подтверждением (1) и (2) может служить температурный характер поведения мессбауэровских параметров ($f' \approx S(T)$, $\Delta = 2\varepsilon$) для зондов в форме соединений Fe^{2+} и Fe^{3+} . При этом поведение 2D-льда подобно ауксетике, зарегистрированного нами впервые методом зондовой МС при анализе упругих характеристик поверхностного льда [4].
3. Мессбауэровский эксперимент подтверждает, что плавление в системе происходит с помощью двух фазовых переходов с наличием в ней промежуточной гексатической фазы (ГФ). При этом кристалл переходит в ГФ посредством непрерывного перехода Березинского – Костерлица – Таулеса [5], а ГФ превращается в изотропную жидкость с помощью перехода первого рода.
4. Для исследования стохастических процессов или динамического хаоса разработана методика МС, с помощью которой была диагностирована граница для различных областей шума, реализуемых в изучаемой системе. Так температурное поведение полуширины $\Delta\Gamma(T)$ резонансной линии поглощения достоверно иллюстрировало наличие в системе областей «белого» и «розового» шума, где точка перегиба ($T \approx 220$ К) являлась пограничной между ними. Наряду с фиксацией квантовых точек поведения воды ($\hbar\Omega_{kl} \approx k_B T_m$) (см. сноски в [4]) были проанализированы на качественном уровне возможные сценарии пути установления хаоса в детерминированной системе.
5. Обсуждаемые в докладе подходы открывают новые возможности изучения наряду с классическими видами «объемного» льда (I_c , I_h , и т.п.) его особый тип, который представляет собой метастабильные формы льда низкой плотности (сегнетоэлектрический лёд «0» и лед «i»). Зависимость фрактальной размерности (d_F) поверхностного льда от внешнего давления (P/P_0) можно рассматривать «как лестницу, ведущую в физику двух измерений» [6].

Список литературы

1. Y. Imry and L. Gunther. Physical Review B, **3**, 3939–3945 (1971).
2. N.A. Bulienkov, Biophysics, **50**, 811-831 (2005).
3. E.A. Zheligovskaya and N.A. Bulienkov, Biophysics, **62**, 683-690 (2017).
4. A.A. Zalutskii, Crystallography Reports, **65**, 371-375 (2020).
5. V.N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, Yu. D. Fomin and E. N. Tsiok, Phys. Usp., **60**, 857–885 (2017)

6. J.G. Dash, *Physics Today*, **38**, 26–32 (1985).

Формирование поверхности танталового полевого эмиттера с помощью внешнего термополевого воздействия.

Голубев О. Л.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *O.Golubev@mail.ioffe.ru*

Эмиттеры заряженных частиц, использующие явления полевой электронной эмиссии и полевого испарения ионов (полевые эмиттеры) могут представлять значительный интерес как точечные источники электронов и ионов в основном для целей нанотехнологии, а также для создания электронно-лучевых приборов высокого разрешения и других подобных применений. Особенно интересны для таких целей эмиттеры на основе таких элементов, которые химически инертны и поэтому практически не подвержены воздействию остаточных газов. К подобного рода элементам относятся, например, Au, Pt, Ir, Re, Ta, в данной работе рассматривается полевой эмиттер электронов и ионов из Ta. Использовать полевой эмиттер просто как исходное острие малого радиуса кривизны из проводящего материала как правило мало эффективно, гораздо более эффективным является специальное и направленное формирование поверхности эмиттера с помощью какого-либо внешнего воздействия. Наиболее успешными здесь оказываются, например, эмиттеры, полученные *in situ* в результате одновременного воздействия на них сильного электрического поля и высокой температуры (т. наз. термополевого воздействия). С помощью подобного рода воздействия можно в частности выращивать на поверхности эмиттера-острия микронного и субмикронного радиуса кривизны острые наноразмерные выступы, локализирующие эмиссию заряженных частиц в малом телесном угле и вообще повышающие величину эмиссионного тока. В случае единичного нановыступа это будет эффективный точечный источник электронов или ионов с весьма малым углом эмиссии порядка 1 - 3 стерадиана, а если вырастить на поверхности такого эмиттера много подобного рода нановыступов, то можно создать эмиттер со многими отдельными струями заряженных частиц, т.е. источник типа "лейка".

Работа выполнялась методами полевой электронной микроскопии. С помощью термополевого воздействия были получены эмиттеры из Ta с разным типом поверхности, как эмиттер с единичным нановыступом на вершине (что представляет собой определенные сложности), так и эмиттер, содержащий около 100 подобных нановыступов, расположенных по всей поверхности острия (задача более простая). Эмиттер с единичным нановыступом давал возможности получать электронные токи $I \sim 1$ микроампера, тогда как эмиттер с большим количеством нановыступов позволял фиксировать токи до $I \sim 10 - 20$ микроампер.

Эмиттеры такого типа давали возможность получать также и токи ионов Ta в режиме т. наз. высокотемпературного полевого испарения, в этом случае к эмиттеру прикладывается одновременно и непрерывно электрическое поле напряженностью $F \sim (3-6)$ V/nm и температура $T \sim 1150-1800$ К. Подобного рода воздействие позволяет осуществлять непрерывный диффузионный приток атомов на вершины нановыступов и испарение их оттуда в виде ионов разной зарядности. Величины токов при этом будут естественно гораздо меньше $I \sim 10^{-12}$ А и ионный ток существует непрерывно, но в виде отдельных всплесков разной амплитуды и скважности. Можно получить и постоянный, или во всяком случае стационарный ионный ток, для этого нужно подобрать соответствующие величины воздействующих F и T . При таких величинах F и T поверхность эмиттера становится стабильной, подобная стабильность

и обеспечивает стационарную эмиссию ионов, но при этом величина тока снижается еще до $I \sim 10^{-13}$ А. Такие величины токов однако могут представлять интерес для целей нанотехнологии, но вряд ли интересны для других применений, например, для электронно-лучевых устройств.

Domestic glues for the fabrication of glass microfluidic chips with polymer films

Зубик А.Н.¹, Лукашенко Т.А.¹, Рудницкая Г.Е.¹

¹ИАП РАН

e-mail: *tunix@yandex.ru*

Одной из неотъемлемых стадий изготовления микрофлюидных чипов для биологических и генетических аналитических систем является получение неразъемного соединения двух или более пластин (герметизация) [1-2]. Для изготовления микрофлюидных чипов интерес представляют сочетания стеклянных пластин (с микроструктурами) и полимерных пленок, что упрощает регенерацию стеклянных пластин при многократном использовании.

Ранее [3] было показано, что отечественные акрилатные клеи SM Chemie 301 и SM Chemie 700 подходят для склеивания микрофлюидных чипов из полиметилметакрилата (ПММА) для проведения полимеразной цепной реакции (ПЦР), особенностью которой является циклический режим при повышенных температурах (при этом важно сохранять герметичность микроструктур, чтобы избежать испарения реагентов). Поскольку известно, что многие акрилатные клеи (в том числе SM Chemie 700) также обладают адгезионными свойствами по отношению к силикатному стеклу, было решено проверить работоспособность в условиях термоциклирования клеевых соединений силикатного стекла с силикатным стеклом и силикатного стекла с полимером, изготовленные при помощи клеев SM Chemie 301 и SM Chemie 700. Предварительные эксперименты показали, что образцы клеевых соединений стекло/стекло и стекло/ПММА (марки ТОСН, толщина 1 мм), изготовленные с помощью этих клеев, сохраняли работоспособность после термоциклирования (40 циклов от 60 °С до 95 °С). Признаков старения или разрушения в области их клеевых швов не замечено.

Были изготовлены гибридные микрочипы из силикатного стекла с микроструктурами, герметизированные пленкой ПММА марки Plexiglas® Film 99524 (Германия) толщиной 0,37 мм. Однако образцы микрочипов не выдержали испытаний на герметичность гравиметрическим методом (разгерметизировались). Убыль массы заполненного дистиллированной водой микрочипа после термоциклирования превысила 5 %.

Недостатком пленки из ПММА является то, что температура размягчения материала (95-120 °С) близка к рабочей температуре ПЦР (95 °С, этап денатурации). В качестве альтернативы были рассмотрены прозрачные полиэфирные пленки толщиной 110 мкм. Температура размягчения таких пленок находится в области 200-400 °С, следовательно, в отличие от ПММА, такие пленки не будут размягчаться в условиях ПЦР. Предварительные эксперименты показали, что образцы клеевых соединений из силикатного стекла и полиэфирной пленки, изготовленные с помощью клея SM Chemie 700, сохранили работоспособность в условиях термоциклирования.

Гибридные микрочипы из силикатного стекла, герметизированные полиэфирной пленкой, были изготовлены при помощи клея SM Chemie 700. В нижней стеклянной пластине (размером (25 × 75 × 1) мм) три реакционные камеры (диаметром 12 мм и глубиной 200 мкм, с подводными каналами и лунками) выполнены методом фотолитографии и кислотного травления. Камеры заполняли через входные/выходные отверстия в полимерной пленке. Испытания гравиметрическим методом показали, что микрочипы сохраняют герметичность после циклического нагрева (40 циклов) от 60 °С до 95 °С. Убыль массы заполненных

дистиллированной водой микрочипов не превышает 5 %. Следовательно, микрочипы подходят для проведения ПЦР, а клей SM Chemie 700 можно рекомендовать для герметизации пластин из силикатного стекла (с микроструктурами) полиэфирными пленками.

Список литературы

1. Lu Ch., Lee L.J., Juang Y.J., Packaging of microfluidic chips via interstitial bonding technique, *Microfluidics and Miniaturization*, vol. 29, 1407-1414, 2008
2. Yao Y., Li L., Jiang J., Zhang Y., Chen G., Fan Y., Reversible bonding for microfluidic devices with UV release tape, *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 26, art. 23, 2022
3. Лукашенко Т.А., Зубик А.Н., Буляница А.Л., Рудницкая Г.Е., Отечественные фотоотверждаемые акрилатные клеи для герметизации микрофлюидных чипов из полиметилметакрилата, *Пластические массы*, № 11-12, 47-50, 2022

Лазерная обработка поверхности металлов и сплавов для улучшения их адгезионных свойств

Миколуцкий С. И.¹, Малинский Т. В.¹, Хомич Ю. В.¹, Ямщиков В. А.¹

¹Институт электрофизики и электроэнергетики Российской академии наук (ИЭЭ РАН)

e-mail: *mikolserg@mail.ru*

Решение проблемы соединения разнородных материалов с точки зрения уменьшения количества крепежных элементов и герметичности возможно за счет применения диффузионной сварки [1]. Этот способ сварки широко применяется при изготовлении прецизионных узлов для соединения металлов, сплавов и керамики в таких высокотехнологичных отраслях, как аэрокосмическая и авиационная, а также атомная энергетика. Повышение прочности соединения при диффузионной сварке материалов возможно за счет формирования на свариваемых поверхностях упорядоченных микронных и субмикронных структур с заданными геометрическими параметрами и физико-химическими свойствами [2].

В данной работе предложен и исследован новый подход, основанный на методе прямого лазерного наноструктурирования поверхности, к проблеме соединения однородных и разнородных материалов при диффузионной сварке. Лазерная обработка и сверление в случае тонкой металлической прослойки производились наносекундным УФ-излучением Nd:YAG-лазера (3-я гармоника). Морфологию поверхности облученных материалов изучали с помощью оптического профилометра Zygo NewView 7300, атомно-силового микроскопа Alpha 300 и сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) JEOL JSM 6610LV, оснащенного приставкой для определения элементного состава поверхности. Проведены экспериментальные исследования по диффузионной сварке с предварительной лазерной обработкой свариваемых поверхностей жаропрочных технологических сплавов на основе никеля, а также нержавеющей стали, которые выявили значительное улучшение механических свойств соединений. Например, выявлено увеличение предела прочности более 10 % и деформации растяжения более 20 % по сравнению с необработанными образцами у соединений, полученных диффузионной сваркой в условиях горячего изостатического прессования.

Помимо этого в рамках данной работы разработана методика лазерной перфорации металлического слоя [3, 4], позволяющая решить проблему неравномерности деформации и устранения застойных зон, и тем самым повысить прочность сварных соединений керамика-металл-керамика. Например, лазерное сверление микроотверстий в медных прокладках и обработка поверхности керамических заготовок наносекундным Nd:YAG-лазером перед диффузионной сваркой позволили повысить предел прочности сварных соединений из керамики Si₃N₄ на 40 %, а деформации растяжения – до 50% по сравнению с использованием сплошной прокладки.

Простой и эффективный метод прямого лазерного наноструктурирования с использованием УФ-излучения позволил не только улучшить адгезионные свойства ряда промышленных материалов, но и получить новые структуры поверхности, как в случае субмикронных струй на циркониевой и хромистой бронзе, а также изменить различные физические свойства материалов. Результаты выполненных исследований могут быть использованы для повышения надежности узлов атомной техники, разработки инноваций в аэрокосмической области, энергетике, медицине и получения технологических материалов с новыми физическими свойствами.

Список литературы

1. Люшинский А. В. Современные технологии сварки. Инженерно-физические основы. М.: ИД Интеллект, 2013. 240 с.
2. Миколуцкий С.И., Хомич Ю.В. Влияние лазерного уф излучения наносекундной длительности на структуру и адгезионные свойства металлов и сплавов. Физика металлов и металловедение. 2021. Т. 122, №2, С. 159-165.
3. Tokarev V.N., Cheshev E.A., Bezotosnyi V.V., Khomich V.Yu., Mikolutskiy S.I., Vasil'eva N.V. Optimization of plasma effect in laser drilling of high aspect ratio microvias. Laser Physics. 2015. V. 25. P. 056003 (9pp).
4. Вашуков Ю.А., Еленев В.Д., Железнов Ю.А., Малинский Т.В., Миколуцкий С.И., Хомич Ю.В., Ямщиков В.А. Влияние лазерной перфорации элементов диффузионно-сварного соединения керамика–медь–керамика на его механические свойства. Неорганические материалы. 2021. Т. 57. № 2. С. 214-219.

Перспективы применения прямых эмульсий Пикеринга на основе парафина стабилизированных SiO_2 /МУНТ, для получения супергидрофобных антиобледенительных покрытий

Данилов В. Е.¹, Капустин С.Н.¹

¹САФУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: v.danilov@narfu.ru

Эмульсии Пикеринга представляют собой дисперсии, стабилизированные твердыми частицами, закрепленными на границе масло–вода [1]. В зависимости от материала и формы частиц (коллоидальный диоксид кремния, наночастицы диоксида титана, углеродные нанотрубки, глинистые частицы и др.) возможно получать различные по свойствам высококонцентрированные коллоидные системы отличающиеся стабильностью, устойчивостью к изменению pH среды и введению добавок электролитов [2, 3]. Согласно [4], в случае парафиновых эмульсий с концентрациями до 10 мас. %, температуре получения 70-75°C и введении наночастиц диоксида кремния в качестве стабилизатора, можно получать субмикронные частицы парафина диаметром 450-460 нм. По нашему мнению, подобная по дисперсности эмульсия, стабилизированная многослойными углеродными нанотрубками (МУНТ) поверхность которых декорирована наночастицами кремнезема, по аналогии с работами [5, 6], будет являться подходящей основой для создания супергидрофобных антиобледенительных покрытий. В этом случае частицы SiO_2 закрепившиеся на стенках МУНТ будут повышать их диспергируемость в воде [7]. Супергидрофобность полученного покрытия будет реализована за счет гидрофобной природы самого парафина в сочетании с многомодальной шероховатостью образуемой наличием разветвленных структур SiO_2 /МУНТ на поверхности частиц парафина. Так в ряде источников [8-11] показано, как схожие супергидрофобные покрытия способны снижать адгезию льда к поверхности, а также создавать условия, при которых время скольжения капли по поверхности не достаточно для ее замораживания и образования наледи. Таким образом, целью данной работы стало изучение условий синтеза прямых эмульсий Пикеринга на основе парафина стабилизированных SiO_2 /МУНТ для получения супергидрофобных антиобледенительных покрытий.

Синтез наночастиц кремнезема необходимых для декорирования боковых поверхностей МУНТ (получения SiO_2 /МУНТ) проводили золь-гель методом [12] при комнатной температуре (гидролиз ТЭОС в водно-этанольном растворе с последующим добавлением по каплям гидроксида аммония в качестве катализатора реакции поликонденсации). Соотношения компонентов принимали согласно [12] для образца № 2 (этанол 4 М, бидистиллированная вода 13,4 М, ТЭОС 0,045 М и 14 М NH_3), с той разницей, что ультразвуковая обработка при синтезе не проводилась. В результате через 18 часов созревания образовался золь с массовой концентрацией по SiO_2 порядка 4 мг/мл и средним размером частиц 21 ± 5 нм. Средний размер и дзета-потенциал поверхности частиц кремнезоля определяли на анализаторе размера частиц DelsaNano C методом фотонной корреляционной спектроскопии и электрофоретического рассеяния света, соответственно.

SiO_2 /МУНТ получали путем выдержки 100 мг углеродных трубок (Таунит-М, «НаноТехЦентр») в 5 мл кремнезоля (разбавленного этанолом до концентрации 0,8 мг/мл) в течение 1 суток с последующим выпариванием растворителя.

Прямую эмульсию Пикеринга с массовой концентрацией 5% и субмикронным размером частиц получали диспергированием 25 г расплавленного парафина марки П-2 (ОАО «Славнефть Ярославнефтеоргсинтез») и 50 мг SiO₂/МУНТ в 475 мл бидистиллированной воды на модуле МК коллоидной мельницы ИКА magicLAB (угол настройки 180°, скорость вращения 16000 об/мин, температура воды 70°C) в течение 2 минут. Парафин добавляли в водную среду, уже содержащую в себе предварительно диспергированные в течение 1 минуты SiO₂/МУНТ. Средний размер частиц эмульсии определяли методом лазерной дифракции на анализаторе размера частиц Lasentec D600L.

Эмульсию наносили на подложки из мелкозернистого бетона и древесины сосны распылением краскопультом DEXTER POWER (мощностью 600 Вт, давлением 0,3 Бар, диаметром сопла 2,5 мм) с расстояния в 15 см. Значения краевого угла смачивания покрытий определяли на гониометре DSA-20E. Получены краевые углы смачивания более 150° и углы скатывания менее 10°, что характерно для супергидрофобных покрытий.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-22-20115).

Список литературы

1. Pickering S.U., Emulsions, J. Chem. Soc., Vol. 91, P. 2001-2002, 1907
2. Покидько Б.В., Ботин Д.А., Плетнев М.Ю., Эмульсии Пикеринга и их применение при получении полимерных наноструктурированных материалов, Вестник МИТХТ, т. 8, № 1, 2013
3. Демина П. А., Григорьев Д. О., Кузьмичева Г. М., Букреева Т. В., Создание капсул на основе эмульсий Пикеринга с оболочками из наночастиц диоксида титана и полиэлектролитных слоев, Коллоидный журнал, том. 79, № 2, 142-148, 2017
4. Горбачевский О. С., Королева М. Ю., Юртов Е. В., Получение парафиновых эмульсий, стабилизированных наночастицами диоксида кремния, Успехи в химии и химической технологии, ТОМ XXIX, № 6, 2015
5. Трапезникова Е.С., Макаров Н.А., Способы декорирования углеродных наноструктур с целью связывания с керамической матрицей (обзор), Успехи в химии и химической технологии, ТОМ XXXIV, № 5, 2020
6. Javed M. et al., Amino-functionalized silica anchored to multiwall carbon nanotubes as hybrid electrode material for supercapacitors, Materials Science for Energy Technologies, 1, 70-76, 2018
7. Bharti B. et al., Modulating SWCNT-silica interactions for enhanced dispersibility and hybrid cryogel formation, Colloids and Interface Science Communications, 3, 13-17, 2014
8. Sotoudeh F. et al., Natural and synthetic superhydrophobic surfaces: A review of the fundamentals, structures, and applications, Alexandria Engineering Journal, 68, 587-609, 2023
9. Zhe Li et al., Surface-Embedding of Functional Micro-/ Nanoparticles for Achieving Versatile Superhydrophobic Interfaces, Matter, 1, 661-673, 2019
10. Huang W. et al., Facile preparation and property analyses of L-CNC/SiO₂-based composite superhydrophobic coating, Front. Mater. Sci, 16(4): 220626, 2022
11. Ma Y., Zhang J., Zhu G. et al. Robust photothermal self-healing superhydrophobic coating based on carbon nanosphere/carbon nanotube composite, Materials & Design, 221, 110897, 2022
12. Rao K.S. et al., A novel method for synthesis of silica nanoparticles, Journal of Colloid and Interface Science, 289, 125-131, 2005

Абляция сплава WC—Co при воздействии мощными наносекундными ультрафиолетовыми лазерными импульсами с целью модификации поверхности перед нанесением алмазного покрытия

Рогалин В. Е.¹, Железнов В.Ю.¹, Малинский Т.В.¹, Хомич Ю.В.¹, Ашкинази Е.Е.², Заведеев Е.В.², Литвинов А.П.³

¹ИЭЭ РАН

²ИОФ РАН им. А.М. Прохорова,

³МПУ

e-mail: *v-rogalin@mail.ru*

Развитие промышленных технологий стимулирует использование новых, перспективных материалов. Некоторые из них, труднообрабатываемые, например, усиленные углеродным волокном полимерные материалы; силумин с высоким содержанием кремния (до 20 %). Их механическая обработка весьма сложна, поэтому часто используют инструмент на основе карбида вольфрама (WC-Co), с прочным поликристаллическим алмазным покрытием (АП) [1], где подробно рассмотрены различные методы подготовки поверхности к процессу нанесения АП, вызванные необходимостью изоляции алмаза от контакта с кобальтом, катализирующим образование графитовой фазы. Процесс состоит из нескольких технологических операций. Поиски решения проблемы ведутся в различных направлениях, например, в [2] сообщается об удачном применении ионной имплантации ниобием и цирконием перед нанесением АП, а в [3] в результате воздействия УФ лазерными импульсами в режиме одиночных пятен. Выбран оптимальный режим воздействия. Показано, что в этом случае, эффективная площадь поверхности резко возрастает. Структура поверхности металлов после воздействия УФ лазерными импульсами подробно исследована в [4].

В данной работе сообщается, что с целью улучшения адгезии АП, проведена предварительная модификация WC—Co мощными наносекундными УФ лазерными импульсами.

Поверхности полированных образцов WC—Co были обработаны в сканирующем режиме мощными лазерными импульсами по растровой траектории с обеспечением перекрытия пятен не менее 98 %, причем каждый участок зоны обработки облучался серией из нескольких десятков импульсов (длина волны $\lambda = 355$ нм, длительность импульса 10 нс, частота 100 Гц). Далее, было проведено снижение концентрации Co на поверхности и создание барьерного слоя, препятствующего диффузии Co из объема на поверхность. Это было обеспечено путем химического травления реагентами Мураками и Каро и магнетронного напыления слоя вольфрама толщиной 600 нм.

Каждая стадия обработки контролировалась с помощью оптического профилометра Zygo и сканирующей электронной микроскопии (JSM-7001F, JEOL). Построены зависимости шероховатости поверхности от плотности энергии в диапазоне 0.2 – 2.0 Дж/см². Величина Sa возрастает при увеличении плотности энергии. Выбран оптимальный режим воздействия. Исследования поверхности, обработанной лазером с помощью профилометра Zygo, показали, что она имеет однородный, по площади, характер.

Лазерное воздействие проводилось в ИЭЭ РАН в рамках государственного задания по научной деятельности № 75-03-2022-056.

Список литературы

1. Е.Е. Ашкинази, А.В. Хомич, В.Е. Рогалин, А.П. Большаков, Д.Н. Сovyк, М.А. Мыгарев, И.И. Кошельков, П.М. Васильев, В.И. Конов Алмазный инструмент с повышенной износостойкостью для труднообрабатываемых композиционных материалов // Физика и химия обработки материалов 2019, № 5, с. 42-67.
2. Е.Е. Ашкинази, С.В. Федоров, А.К. Мартьянов, В.С. Седов, О.И. Обрезков, Р.А. Хмельницкий, О.П. Черногорова, В.Е. Рогалин, А.А. Зверев, В.Г. Ральченко, С.Н. Григорьев, В.И. Конов Исследование стойкости к разрушению алмазных покрытий сплава WC—Co, модифицированного ионной имплантацией // Деформация и разрушение материалов. № 5, 2023, с. 14-20.
3. Ю.А. Железнов, Т.В. Малинский, С.И. Миколуцкий, В.Е. Рогалин, Ю.В. Хомич, В.А. Ямщиков, И.А. Каплунов, А.И. Иванова. Модификация поверхности твердого сплава WC—3% Co мощными наносекундными ультрафиолетовыми лазерными импульсами. // Деформация и разрушение материалов. 2020. № 11. С. 11-14.
4. Т.В. Малинский, В.Е. Рогалин, В.А. Ямщиков Пластическая деформация меди и ее сплавов при воздействии наносекундным ультрафиолетовым лазерным импульсом // Физика металлов и металловедение, 2022, том 123, № 2, с. 192–199.

Исследование морфологии поверхности полимера при отсутствии дефектов

Осипов С. В.¹, Максимов А.В.¹, Меньшиков Е.В.¹, Максимова О.Г.¹

¹Череповецкий государственный университет

e-mail: *alan.turing1912@yandex.ru*

Уникальные характеристики морщинистых интерфейсов полимерных пленок играют важную роль при создании гибкой электроники, в качестве подставок с контролируемой смачиваемостью, для биологических применений и др. [1]. Изучение морфологии поверхности полимерных пленок также полезно при измерении общих свойств материала на молекулярном уровне, что иногда трудно получить другими методами [2]. Например, размеры морщин определяют такие практически важные характеристики полимерного покрытия, как прочность и деформируемость. Однако, в причинах возникновения морщин мнения различных исследователей расходятся. Например, в работе [1] основной причиной считается существование дефектов на поверхности полимера, а в работе [2] размер морщин определяется через модуль Юнга, коэффициент Пуассона и другие характеристики полимера.

Для исследования морфологии поверхности полимерной системы использована динамическая модель, являющаяся дискретным аналогом модели персистентной длины, в которой цепи обладают жесткостью на изгиб. Полимерная молекула располагается в среднем молекулярном поле, создаваемом другими цепями в упорядоченном состоянии. Получена формула величины этого поля в зависимости от межмолекулярного расстояния и расстояния между сегментом макромолекулы и поверхностью. Исследование свободной энергии полимерной системы показало, что межмолекулярное расстояние на поверхности больше, чем внутри пленки, что приводит к образованию морщин на поверхности.

Показано, что отношение высоты морщины h к ее ширине λ определяется структурой полимера (характеристиками среднего поля, жесткостью цепи на изгиб, константами в потенциале Леннарда-Джонса) и температурой формирования. Это объясняет, в частности, равномерное распределение морщин по всей поверхности. В тоже время, размеры морщин (h и λ) зависят от существования дефектов на поверхности, что будет представлено позже.

Список литературы

1. Rodriguez-Hernandez, Juan. "Wrinkled interfaces: Taking advantage of surface instabilities to pattern polymer surfaces." *Progress in Polymer Science* 42 (2015): 1-41.
2. Genzer, Jan, and Jan Groenewold. "Soft matter with hard skin: From skin wrinkles to templating and material characterization." *Soft Matter* 2.4 (2006): 310-323.

Технологии ионно-термического распыления с массопереносом поверхностных слоев (структур) конструкционных материалов для ядерной энергетики

Петровская А. С.¹, Цыганов А.Б.¹, Суров С.В.², Блохин Д.А.²

¹ ООО «ИнноПлазмаТех», Санкт-Петербург

² АО «Наука и Инновации», научный дивизион ГК «Росатом», Москва

e-mail: *anita3425@yandex.ru*

Проблемы поиска новых методов дезактивации и переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) сегодня, как никогда, актуальны для развития ядерной энергетики в России и в мире. Мы предлагаем новый подход с использованием плазмы укороченных разрядов большой площади в инертном газе атмосферного давления для движения в данном направлении. Первая задача – поиск эффективной технологии дезактивации облученного реакторного графита и металлоконструкций ядерных энергетических установок, в первую очередь для вывода из эксплуатации реакторов РБМК. В настоящее время мы разрабатываем для этого новую ионно-плазменную технологию, включающую зажигание высокооднородного укороченного разряда в инертном газе (аргон), подаваемом при атмосферном давлении между загрязненной радионуклидами поверхностью (катод) и параллельной ей коллекторной пластиной (анод). При взаимодействии укороченного разряда с дезактивируемой поверхностью распыляемые ионной бомбардировкой радиоактивные загрязнения оседают по всей поверхности анода в процессе массопереноса в диффузионном режиме (при этом ионная бомбардировка позволяет распылить любые атомы и радионуклиды, независимо от энергии их химических связей), а затем удаляются вместе со сменным анодом. Процесс удаления радионуклидов с поверхности проводится в камере, наполненной аргоном, в которую графитовый блок помещается целиком, без нарушения его целостности. За счет регулировки энерговклада в плазму графитовый блок будет целиком прогрет до заданной температуры, часть радионуклидов дополнительно выйдет из объема блока за счет термодиффузии, а вторичные РАО практически не образуются в инертной атмосфере аргона. За счет удаления поверхностного слоя графита, обогащенного основным дозообразующим изотопом ^{14}C , и за счет термодиффузии из объема других радионуклидов графитовый блок будет переведен из 2-го в 3-й класс опасности РАО с соответствующим снижением расходов на захоронение. Нами экспериментально получены рабочие параметры технологии: давление аргона $P \sim 0.01-1$ атм., напряжение на разрядном промежутке $V = (300-1000)\text{В}$, плотность тока разряда $J = (0.001-1)$ А/см², расстояние между обрабатываемой поверхностью и анодом-коллектором $d = (1-5)\text{мм}$. В лабораторных испытаниях методами SEM с X-ray микроанализом подтверждена работоспособность технологии на необлученном реакторном графите марки ГР-280 и на необлученных металлических сплавах. Технология запатентована нами совместно с АО «Концерн Росэнергоатом», ведется международное патентование с ГК «Росатом» [1].

Вторая проблема ядерной энергетики - разработка новых технологий для переработки ОЯТ и создания замкнутого ядерного топливного цикла, что сделает атомную энергетику возобновляемой и решит проблему накопления ОЯТ и радиоактивных отходов [2]. В данном направлении нами разрабатывается технология «Ионное травление – Термическое разделение» (ИТ-ТР) переработки ОЯТ, основанная на применении «укороченного» микроплазменного разряда высокого давления для атомизации таблеток ТВЭЛ ОЯТ и разделения распыленных атомов по элементному составу за счет дифференциации по температурам насыщенных паров

[3]. В отличие от радиохимических технологий переработки ОЯТ, которые требуют набор установок для более чем 15 химических процессов в условиях сильной радиации и приводят к образованию больших объемов вторичных РАО, плазменная технология – одностадийная, проводится в диффузионной трубе простой конструкции и не приводит к образованию вторичных РАО за счет использования в качестве газа-носителя инертного газа аргона.

Проведены расчеты процессов на поверхности таблетки ТВЭЛ ОЯТ при воздействии укороченного разряда, получены значения рабочих теплофизических параметров: распределения температурных полей в зависимости от величины вкладываемой плотности мощности в разряд, скорости потока газа-носителя ~ 0.15 м/с, геометрии и размеров диффузионной трубы.

Список литературы

1. Петровская А.С., Цыганов А.Б., Стахив М.Р. Патент РФ №2711292 \\"Способ дезактивации элемента конструкции ядерного реактора\", Европейская патентная заявка EP 19888171.6, патентные заявки США US 20210272715, Канады CA3105179A1, КНР CN112655056A и др.
2. Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом». Программа создания инфраструктуры и обращения с отработавшим ядерным топливом на 2011-2020 годы и на период до 2030 года. // Безопасность ядерных технологий и окружающей среды. – 2012. – № 2. – С. 43–55
3. A.S. Petrovskaya, A. B. Tsyganov, S.V. Surov, A. Yu. Kladkov, Ion Sputtering – Thermal Separation Technology for Spent Nuclear Fuel Processing // Nuclear Engineering and Design, Volume 386, January 2022, 111561, <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2021.111561>

Кинетика изменения приповерхностного электрического поля в GaP(001) в процессе сульфидной пассивации

Лебедев М. В.¹, Дементьев П. А.,¹ Львова Т. В.,¹ Берковиц В. Л.¹

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе

e-mail: mleb@triat.ioffe.ru

Фосфид галлия (GaP) — это непрямозонный широкозонный полупроводник ($E_g = 2.26$ эВ), активно используемый в детекторах ультрафиолетового излучения, биосенсорах и устройствах фотоэлектрохимического разложения воды. Вследствие наличия ловушек носителей заряда в приповерхностной области полупроводника формируется изгиб зон, электрическое поле которого приводит к разделению носителей заряда. В частности, приповерхностное электрическое поле может оказывать существенное влияние на фотокаталитические процессы на границе с растворами электролитов. В этой связи модификация приповерхностного электрического поля полупроводника является одной из актуальных задач физики и технологии полупроводников.

Одним из подходов к модификации электронных свойств поверхностей полупроводников АЗВ5 является сульфидная пассивация, заключающаяся в обработке поверхности растворами сульфидов. Такая обработка приводит к удалению с поверхности полупроводника слоя естественного окисла и к формированию на ней пассивирующего покрытия, состоящего, в общем случае, из сульфидов атомов 3-й и 5-й групп. При этом эффективность электронной пассивации поверхности зависит от химического состава раствора и длительности сульфидной обработки.

В данной работе рассматривалась кинетика изменения электрического поля в приповерхностной области n- и p-GaP(001) при контакте с различными сульфидными растворами. Исследования проводились методом спектроскопии анизотропного отражения с использованием данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и атомно-силовой микроскопии.

Было показано, что обработка поверхности n-GaP(001) сульфидными растворами приводит к уменьшению приповерхностного электрического поля, а обработка поверхности p-GaP(001) к существенному увеличению [1]. Сульфидные растворы на основе изопропилового спирта показывают большую эффективность, чем аналогичные водные растворы. При этом эти эффекты проявляются сильнее при увеличении времени обработки.

Наблюдаемое изменение приповерхностного электрического поля объясняется формированием поверхностного диполя, обусловленного химическими связями, входящими в состав пассивирующего покрытия. Направление этого диполя одинаково на поверхностях n- и p-GaP(001). Варьирование дипольного момента поверхности при обработке в различных сульфидных растворах связано с изменением химического состава сульфидированной поверхности.

Список литературы

1. Lebedev M. V., Dementev P. A., Lvova T. V., Berkovits V. L., Chemical modification of the GaP(001) surface electric field with sulfide solutions, *Materials Science and Engineering: B* vol. 291, 116370, 2023

Положительный поверхностный заряд гидрированного детонационного наноалмаза

Куулар В. И.^{1,2}, Тудупова Б.Б.¹, Швидченко А.В.²,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²СПбГТИ

e-mail: *kdm-333@mail.ru*

Возможность однородной функционализации поверхности детонационных наноалмазов позволяет расширить области его практического применения. Гидрирование поверхности наноалмаза представляет особый интерес за счет появления у алмазных наночастиц ряда свойств, например, фотокаталитическое восстановление CO_2 до CO [1]. Гидрированный детонационный наноалмаз обладает положительным поверхностным зарядом и, как следствие, положительным электрокинетическим потенциалом (ζ -потенциалом), однако механизм формирования положительного поверхностного заряда частиц является предметом дискуссий.

Задачами данного исследования являлись: изучение химического состава поверхности гидрированного детонационного наноалмаза, анализ ионообменных процессов на поверхности алмазных наночастиц в водных растворах электролитов и определение значения поверхностного заряда гидрированного детонационного наноалмаза.

Гидрирование проводилось путем отжига очищенного промышленного детонационного наноалмаза в потоке молекулярного водорода при температуре 600°C в течение 3 часов.

Методом ИК-спектроскопии обнаружено наличие гидратированных карбонат- и гидрокарбонат-ионов на поверхности наноалмаза. Показано, что положительный поверхностный заряд частиц наноалмаза формируется уже в порошке. Формирование заряда сопровождается образованием карбонат- и гидрокарбонат-ионов в адсорбционных слоях воды.

Методами ИК-спектроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС) установлено, что карбонат- и гидрокарбонат-ионы замещаются анионами солей и кислот из водных растворов. На основе данных, полученных методами ЭДРС и кислотно-основного потенциометрического титрования, рассчитанное значение удельного поверхностного заряда исследуемых частиц составляет 86 ± 7 мКл/м².

Полученные результаты позволяют по-новому взглянуть на исследование поверхности гидрированных детонационных наноалмазов ввиду их способности адсорбировать анионы различных водорастворимых электролитов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № FFUG-2022-0012.

Список литературы

1. L. Zhang, R.J. Hamers. *Diamond and Related Materials*, 2017, 78, 24-30.

Изучение эффекта локального повышения ионной проводимости в наноразмерных трехмерных каналах Т-образной формы

Жуков М. В.¹, Горбенко О.М.¹, Лукашенко С.Ю.¹, Сапожников И.Д.¹, Фельштын М.Л.¹, Пичахчи С.В.¹, Голубок А.О.¹
¹ИАП РАН

e-mail: cloudjyk@yandex.ru

Исследование особенностей протекания ионного тока в заостренных и узких наноразмерных каналах, заполненных жидким электролитом, представляет интерес как в связи с изучением физико-химических основ переноса электрического заряда в микрофлюидных устройствах, развитием микро- и нанофлюидики, наноионики, а также в связи с созданием приборов ДНК анализа нового поколения [1]. В работе исследовалась проводимость стеклянной нанопипетки (НП), заполненной жидким электролитом с размерами апертуры менее 100 нм. Подобные зонды применяются для измерения ионных токов ($\sim 10^{-9}$ - 10^{-12} А), протекающих через ионные каналы в клеточных мембранах, методом «patch-clamp», неинвазивной визуализации топографии биообъектов методом сканирующей микроскопии ионной проводимости (СМИП), являющимся одним из разновидностей метода сканирующей зондовой микроскопии [2], ДНК-литографии [3], и т.п. Мы исследовали протекание ионного тока через НП, приближенную к плоской поверхности полимера на расстояния, соизмеримые с диаметром апертуры НП и менее. Для стабилизации ионного тока в исследуемом «жидком наноконтакте» использовалась техника СМИП. При такой конфигурации можно говорить об адаптивном трехмерном наноразмерном канале, имеющем в сечении Т-образную форму.

В работе изучены кривые ток-расстояние (I-Z) и вольт-амперные характеристики (I-V) Т-образного канала в диапазоне ионных токов $I \sim (1 - 9)$ нА и напряжений $U \sim (0,3 - 1)$ В при различных концентрациях буфера NaCl (17, 154 и 1831 мМоль/л). Вообще говоря, при приближении НП к плоской поверхности на расстояния меньше, чем размер её апертуры, должно наблюдаться плавное уменьшение ионного тока вследствие экранирования апертуры плоскостью. Однако, при определённых условиях было обнаружено локальное повышение вплоть до 300% ионной проводимости (по сравнению с проводимостью пипетки, удаленной от плоской поверхности на расстояния, превышающие размер апертуры) при сближении на малые расстояния ≤ 100 нм между торцом НП и образцом, что может объясняться наличием двойного электрического слоя (ДЭС) и перекрытием Дебаевских длин на границе раздела двух фаз. При дальнейшем сближении НП с плоскостью ионный ток уменьшался.

В работе исследованы особенности локального повышения проводимости при различных условиях эксперимента, а также проведено моделирование данного явления, условно названного нами «пик-эффектом». С использованием программного пакета Comsol (мультифизика) решались самосогласованные уравнения Пуансона-Нернста-Планка. Показано, что «пик-эффект» имеет место только при определенном знаке заряда на поверхности.

Отметим, что с точки зрения СМИП «пик-эффект» может быть причиной нестабильной работы системы слежения микроскопа. Однако, потенциально «пик-эффект» может быть использован как сенсор ионных потоков (например, ионов водорода, определения pH буфера) или для определения локального заряда поверхности.

Список литературы

1. Paolo Cadinu et al., *Nano Lett.*, 18, 2738–2745, 2018.
2. P. K. Hansma et al., *Science*, 243, 641–643, 1989.
3. Kit T. Rodolfa et al., *Angewandte Chemie.*, 117, 7014-7019, 2005.

Приборы и материалы ТГц и СВЧ диапазона

Разработка модели элемента нелинейной магنونной логики «исключающее или-не»

Гапончик Р. В.¹, Устинов А.Б.¹

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: *ferumno33@gmail.com*

В настоящее время одним из развивающихся направлений в разработке спин-волновых (СВ) приборов и устройств является магنونная логика [1] и физические резервуарные компьютеры [2-4]. На данном этапе предложено множество различных типов СВ логических элементов, принцип действия которых основан на управлении фазовым набегом СВ с помощью электрического тока [5]. К последним достижениям этой области можно отнести разработку нелинейных СВ логических элементов [6-7]. В этих работах показана возможность управления фазовым набегом СВ за счёт увеличения их амплитуды. Не так давно был предложен новый способ управления фазовым сдвигом СВ в нелинейном фазовращателе на основе плёнки железиттриевого граната (ЖИГ), который заключается в управлении нелинейным сдвигом фазы рабочей СВ с помощью СВ накачки [8]. Также был исследован аналогичный способ управления, но уже в магنونном кристалле (МК) [9].

Целью настоящей работы является разработка модели элемента нелинейной магنونной логики «исключающее или-не» на базе нелинейного магنونного фазовращателя, принцип действия которого основан на эффекте наведенного нелинейного сдвига фазы СВ, распространяющихся в одномерном МК.

Модель магنونного логического элемента разрабатывалась для схемы нелинейного СВ интерферометра типа Маха-Цендера. Интерферометром называют устройство, в котором основным рабочим эффектом является интерференция двух или нескольких волн. Отличительной чертой нелинейного интерферометра от его линейного воплощения является наличие в одном или двух его плечах нелинейных элементов, то есть таких, характеристики которых зависят от величины мощности сигнала, проходящего через них. В нашем случае в плечах нелинейного интерферометра находятся два нелинейных магنونных фазовращателя (НМФВ), фаза СВЧ-сигнала на выходе которых зависит от мощности подаваемого на них СВЧ-сигнала накачки.

Работа нелинейного СВ интерферометра заключается в прохождении сигнала через разные плечи и приобретении некоторого фазового сдвига. Далее два этих сигнала суммируются и интерферируют. Величина приобретенных в НМФВ фазовых сдвигов изменяется в зависимости от величины мощности волны накачки. В результате сложения сигналов с разными фазами происходит изменение уровня мощности выходного сигнала нелинейного интерферометра.

Используя данный принцип возможно реализовать несколько элементов магنونной логики, которые в последствии могут стать основой для построения логических схем. В данной работе продемонстрирована модель нелинейного магنونного логического элемента «исключающее или-не» (эквиваленция) на основе наведенного нелинейного сдвига фазы СВ в НМФВ.

Операция «исключающее или-не» реализуется путём подачи на НМФВ в обоих плечах интерферометра мощностей накачки $P_{н1}$ и $P_{н2}$ согласно с таблицей истинности данного элемента. Когда на первый НМФВ подаётся мощность равная 0.028 отн.ед. на нём реализуется

логическая «1», когда подаётся мощность равная 0 отн.ед. – реализуется логический «0». Второй НМФВ работает по аналогичному принципу. Рабочий сигнал, проходя плечи интерферометра, будет приобретать дополнительный нелинейный фазовый сдвиг, регулируемый уровнем мощности накачки, падающей на НМФВ. Далее два сигнала с измененными фазами будут складываться в сумматоре и на выходе мы будем получать либо отсутствие мощности – логический «0», либо сигнал с определенным уровнем мощности – логическая «1».

Параметры, использованные в расчётах НМФВ: величина внешнего магнитного поля $H = 1094$ Э, намагничённость насыщения МК $M = 1980$ Э, толщина толстого участка МК $L = 5.5$ мкм, толщина тонкого участка МК $l = 5$ мкм, период МК $\Lambda = 300$ мкм, протяжённость тонкого участка $b_1 = 250$ мкм, протяжённость толстого участка МК $b_2 = 50$ мкм, расстояние между антеннами $d = 3$ мм.

Разработанная модель демонстрирует возможность построения магنونного логического элемента «исключающее или-не», работающего на рабочей частоте 5.15 ГГц.

Работа поддержана министерством науки и высшего образования Российской Федерации ("Госзадание", грант № FSEE-2020-0005).

Список литературы

1. A. V. Chumak, "Magnon spintronics: Fundamentals of magnon-based computing," in *Spintronics Handbook: Spin Transport and Magnetism*, 2nd ed. (CRC Press, 2019), pp. 247–302.
2. S. Watt, M. Kostylev, *Physical Review Applied*. Vol. 13, pp. 034057 (2020).
3. S. Watt, M. Kostylev, A. B. Ustinov, *Journal of Applied Physics*. Vol. 129, pp. 044902 (2021).
4. S. Watt *et. al.* *Physical Review Applied*. Vol. 15, pp. 064060 (2021).
5. T. Schneider, A. A. Serga, B. Leven, B. Hillebrands, R. L. Stamps, and M. P. Kostylev, *Applied Physics Letters*. Vol. **92**, pp. 022505 (2008).
6. A.B. Ustinov, E. Lähderanta, M. Inoue, B.A. Kalinikos, *IEEE Magnetics Letters*. Vol. 10, pp. 5508204 (2019).
7. Q. Wang, M. Kewenig, M. Schneider *et al.*, *Nature Electronics*. Vol. **3**, pp. 765 (2020).
8. A. B. Ustinov, N. A. Kuznetsov, R. V. Haponchyk, E. Lähderanta, T. Goto, M. Inoue, *Applied Physics Letters*. Vol. 119, pp 192405 (2021).
9. Гапончик Р.В., Гото Т., Устинов А.Б. Тезисы докладов международной конференции Физика А.СПб, Стр. 342-343 (2022).

Магнитные свойства тонких пленок гексаферрита $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$, выращенных методом лазерной молекулярно-лучевой эпитаксии.

Кричевцов Б. Б.¹, Коровин А.М.¹, Левин А.А.¹, Бадалян А.Г.¹, Соколов Н.С.¹, Телегин А.В.², Лобов И.Д.²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²ИФМ им. М.Н. Михеева УрО РАН

e-mail: *boris@mail.ioffe.ru*

Гексаферриты – это большой класс ферромагнитных материалов, обладающих уникальными магнитными свойствами, благодаря которым они нашли широкое применение для создания различных СВЧ-устройств передачи и обработки информации (частота ФМР ~ 50 ГГц [1]), создания высококоэрцитивных магнитов, датчиков магнитного поля и т.п. Гексаферрит типа ВаМ ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) обладает высокими значениями намагниченности насыщения ($4\mu\text{m}_s = 4,7$ кГ) и поля одноосной анизотропии ($H_a = 17$ кОе), стремящейся ориентировать намагниченность вдоль оси шестого порядка. Это делает его перспективным материалом для создания тонкопленочных структур, в которых намагниченность может ориентироваться нормально плоскости без приложения магнитного поля. Предыдущие исследования тонких пленок гексаферрита ВаМ, выращенных на подложках Al_2O_3 методом лазерной молекулярно-лучевой эпитаксии, проведенные в ФТИ им. А.Ф. Иоффе, показали, что гексагональная ВаМ структура может реализоваться при температуре роста $700 - 800$ °С с последующим отжигом на воздухе при 1000 °С.

В данной работе представлены результаты изучения пленок гексаферрита ВаМ толщиной 50 нм, выращенных на подложках $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$, с помощью методов рентгеновской дифрактометрии (XRD), вибрационной магнитометрии (VSM), полярного эффекта Керра (РМОКЕ) в диапазоне энергий фотонов $1,5 - 4$ эВ. Также, приводятся результаты исследования спектров магновов и динамики намагниченности, полученные с помощью ФМР и Бриллюэновского рассеяния света.

Рентгеноструктурный анализ показал, что в неотожженных пленках проявляется только фаза BaFe_2O_4 , состоящая из сильно напряженных нанокристаллитов. После отжига фаза BaFe_2O_4 исчезает и появляется фаза $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$, причем отжиг в течение 10 мин практически снимает микродеформации. Кривые намагничивания пленок существенным образом зависят от ориентации магнитного поля (in-plane или out-of-plane) в соответствие с тем, что наблюдается в объемных образцах $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$. Величина намагниченности пленок близка к объемным образцам $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$. Как показали исследования VSM и РМОКЕ ($l = 405$ нм), в полученных пленках петли гистерезиса практически прямоугольные, величина остаточной намагниченности совпадает с намагниченностью насыщения. Вид спектральных зависимостей РМОКЕ и величина эффекта Керра также соответствует известным данным [2], что подтверждает формирование гексаферрита ВаМ. Спектры ФМР состоят из набора узких линий с резонансными полями в диапазоне $5,6 - 5,8$ кЭ. Рассчитанные резонансное поле и ширина основной линии ФМР составили $H_{\text{рез}} = 5,6 - 5,8$ кЭ, $\Delta H_{\text{рез}} = 20$ Э.

Полученные результаты демонстрируют перспективность синтеза тонких пленок гексаферритов для разработки новых функциональных материалов СВЧ-электроники.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00768, <https://rscf.ru/project/22-22-00768/>.

Список литературы

1. Robert C. Pullar. Hexagonal ferrites: A review of the synthesis, properties and applications of hexaferrite ceramics. *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1191–1334.
2. R. Atkinson, P. Papakonstantinou, I.W. Salter, R. Gerber. Optical and magneto-optical properties of Co-Ti-substituted barium hexaferrite single crystals and thin films produced by laser ablation deposition. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **138** (1994) 222-231.

Коллапсирующие домены Ганна как механизм субнаносекундного переключения высоковольтных импульсных GaAs диодов

Иванов М. С.¹, Рожков А. В., Родин П. Б.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *lygeon@gmail.com*

Быстронарастающий импульс обратного напряжения, приложенный к высоковольтному диоду и последовательной нагрузке, инициирует субнаносекундное переключение диода в проводящее состояние. Такое переключение возможно для высоковольтных диодов на основе как кремния [1], так и арсенида галлия [2,3]. Основанные на этом эффекте Si диоды – диодные обострители – способны формировать в нагрузке киловольтные перепады напряжения с фронтом нарастания менее 100 пс и имеют широкий спектр практических применений [4,5]. Механизм переключения Si структур связан с лавинной ионизацией, которая может иметь как волновой, так и неволновой характер [6, 7], и развиваться на части площади структуры [5]. По сравнению с Si диодами переключение GaAs диодов менее изучено. В нашей работе показано, что переключение в арсениде галлия имеет качественно иной механизм в сравнении с кремнием.

Основные особенности переключения GaAs диодов таковы. Во-первых, остаточные напряжения после 100-пс переключения на порядок меньше, чем для Si диодов, и практически не зависят от протекающего через диод тока [8,9,10]. Во-вторых, имеется возможность снизить амплитуду запускающего импульса с типичных для Si диодов величин, превышающих удвоенное напряжение U_b , до величин, лишь незначительно больших U_b . Субнаносекундное время переключения при этом сохраняется, однако появляется аномально длительная (несколько нс) задержка переключения. Во время задержки напряжение на GaAs диоде постоянно и больше U_b , а ток на два порядка меньше тока в проводящем состоянии. Переключение с аномальной задержкой впервые наблюдалось уже в пионерской работе [2], но до сих пор не получило объяснения.

Нами проведены экспериментальные исследования и численное моделирование переключения GaAs $p^+-p-n-p^+$ диода с напряжением стационарного лавинного пробоя $U_b \sim 500$ В и диаметром 1 мм. Квазипрямоугольный запускающий импульс (амплитуда до 800 В, передний фронт ~ 200 ps) накладывался на регулируемое постоянное смещение с величиной 50, 75 и 100 В. Задержка включения составляла соответственно 6, 3 и 2 нс. Джиттер был меньше точности измерений. Регистрируемое с помощью инфракрасной камеры рекомбинационное излучение свидетельствует, что ток протекает в узких каналах, совокупное поперечное сечение которых S_a порядка одной сотой площади прибора. Численное моделирование показывает, что сверхбыстрое переключение GaAs диода и последующее поддержание его проводимости связаны с биполярным эффектом Ганна [11] в электронно-дырочной плазме. Этот эффект обусловлен отрицательной дифференциальной подвижностью электронов при электрических полях $E > 3.5$ кВ/см и приводит к формированию узких ионизирующих доменов, поле в которых 400 кВ/см и более. Такие домены известны как коллапсирующие домены Ганна [11]. Сразу после подъема напряжения выше U_b лавинная ионизация в проводящих каналах создает концентрацию неравновесных носителей $\sim 10^{16}$ см⁻³. Эта концентрация недостаточна для переключения, поскольку максимальный ток в канале ограничен величиной $2qnv_s S_a < 1$ А. Затем на стадии задержки в электронно-дырочной плазме возникают множественные домены

ионизирующего электрического поля, которые генерируют электронно-дырочную плазму. Количество и амплитуда этих доменов растут вместе с концентрацией неравновесных носителей, достигающей $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ в конце процесса переключения. Время переключения составляет около 200 пс. Таким образом, обычный ударно-ионизационный пробой представляет лишь первую стадию лавинного переключения GaAs диода. Переключение прибора в проводящее состояние с низким остаточным напряжением обеспечивается генерацией носителей в коллапсирующих доменах Ганна.

Работа поддержана грантом РФФИ № 23-22-00239.

Список литературы

1. И.В. Грехов, А.Ф. Кардо-Сысоев. Письма в ЖТФ 5 (15), 950 (1979).
2. Ж.И. Алферов, И.В. Грехов, В.М. Ефанов, А.Ф. Кардо-Сысоев, В.И. Корольков, М.Н. Степанова. Письма в ЖТФ 13 (18), 1089 (1987).
3. С.Н. Вайнштейн, Ю.В. Жилиев, М.Е. Левинштейн. Письма в ЖТФ 14 (16), 1526 (1988).
4. V. Brylevskiy, I. Smirnova, A. Gutkin, P. Brunkov, P. Rodin, I. Grekhov. J. Appl. Phys. 122, 185701 (2017).
5. M. Ivanov, V. Brylevskiy, I. Smirnova, P. Rodin. J. Appl. Phys. 131(1), 014502 (2022).
6. P. Rodin, M. Ivanov. J. Appl. Phys. 127, 044504 (2020).
7. A. S. Kesar, A. Raizman, G. Atar, S. Zoran, S. Gleizer, Y. Krasik, D. Cohen-Elias. Appl. Phys. Lett. 117(1), 013501 (2020).
8. V.I. Brylevskiy, I.A. Smirnova, A.V. Rozhkov, P.N. Brunkov, P.B. Rodin, I.V. Grekhov. IEEE Trans. Plasma Sci. 44(10), 1941 (2016).
9. A. Rozhkov, M. Ivanov, P. Rodin. Solid State Commun. 354, 114895 (2022).
10. М.С. Иванов, А.В. Рожков, П.Б. Родин. Письма в ЖТФ 48(20), 31-34 (2022).
11. S.N. Vainshtein, V.S. Yuferev, J.T. Kostamovaara. J. Appl. Phys. 97, 024502 (2005).

Исследование соотношения активных и реактивных потерь в дрейфовых диодах с резким восстановлением в зависимости от их режима работы.

Черенёв М. Н.¹, Кардо-Сысоев А.Ф.², Люблинский А.Г.²

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *max50055@icloud.com*

Импульсы высокого напряжения наносекундной и субнаносекундной длительности применяются в сверхширокополосных (СШП) системах радиолокации и связи [1]. Основными требованиями, предъявляемыми к генераторам для СШП систем являются: амплитуда импульсов от нескольких десятков вольт до десятков киловольт, частота повторения до единиц МГц и выше, высокий КПД, а также низкий джиттер. Эти требования, в совокупности с компактными размерами и длительным сроком эксплуатации, могут быть достигнуты только путем применения полупроводниковых приборов. Существующие в настоящее время трёхэлектродные полупроводниковые ключи, такие как MOSFET, IGBT и тиристоры являются слишком медленными для непосредственного формирования высоковольтных наносекундных импульсов и требуют дополнительных каскадов сжатия. Поэтому для решения этих задач было разработано несколько новых типов быстродействующих высоковольтных двухэлектродных полупроводниковых переключателей. В настоящей работе рассматриваются приборы размыкающего типа, представленные дрейфовыми диодами с резким восстановлением (ДДРВ) [2,3].

К настоящему моменту уже разработаны физические принципы работы ДДРВ [1,4], проведено компьютерное моделирование процессов резкого обрыва тока [5], опубликовано множество практических схем генераторов импульсов на их основе [6,7], однако вопрос потерь энергии в ДДРВ при переключении освещен явно недостаточно. В работе [8] дана количественная оценка потерь энергии на этапе рассасывания в зависимости от параметров рабочего цикла. Эти потери являются активными, приводят к разогреву структуры, что накладывает ограничение на максимальную частоту следования, вызывает нестабильность амплитуды и формы импульсов, а также тепловой дрейф задержки формирования выходного импульса относительно импульса запуска. В настоящей работе впервые рассмотрена реактивная составляющая потерь – т.е. энергия, которая проходит через ДДРВ структуру в процессе формирования фронта выходного импульса, но которая накапливается в виде заряда барьерной ёмкости р-п-перехода, а затем возвращается обратно в систему при формировании спада импульса. Информация о зависимости реактивных потерь от режима работы ДДРВ, их величины и соотношении с активной составляющей важны как для отработки схемотехнических решений при построении генераторов, так и для оптимизации структуры ДДРВ под заданный режим работы.

В работе проведены экспериментальные исследования зависимости потерь энергии в ДДРВ от плотности тока. В качестве исследуемого образца была выбрана кремниевая эпитаксиальная структура с рабочим напряжением 500 В, однако полученные рекомендации могут быть применены и к ДДРВ структурам других типов. Проведена серия измерений при плотностях тока 100, 140 и 370 А/см², найдены полные потери энергии, а также отдельно активная и реактивная составляющие. Показано, что с ростом плотности тока доля активных потерь увеличивается, и обратно в систему возвращается все меньшая часть энергии. Было проведено

численное моделирование в TCAD SILVACO для указанных плотностей тока и сравнение полученных результатов с экспериментом. Отличие между экспериментом и моделированием составило не более 10%, что подтверждает достоверность используемой модели. С помощью моделирования получены распределения электронно-дырочной плазмы, напряжённости электрического поля, тока проводимости и рассеиваемой мощности в различные моменты времени. На основе этих данных даны рекомендации по оптимизации ДДРВ структуры. Также показано, что универсального решения, оптимального для всех случаев, не существует. Для каждого приложения необходимо искать компромисс в зависимости от поставленных задач, используя предложенные в работе рекомендации.

Работа поддержана Минобрнауки РФ, проект № 075-15-2020-790

Список литературы

1. A. F. Kardo-Sysoev, "New Power Semiconductor Devices for Generation of Nano- and Subnanosecond Pulses," in *Ultra-Wideband Radar Technology*, J. D. Taylor, Ed. CRC Press Boca Raton, London, New York, Washington, 2001, pp. 214–299.
2. I. V. Grekhov, V. M. Efanov, A. F. Kardo-Sysoev, and S. V. Shenderey, "Power drift step recovery diodes (DSRD)," *Solid State Electron.*, vol. 28, no. 6, pp. 597–599, 1985, doi: 10.1016/0038-1101(85)90130-3.
3. V. A. Ilyin, A. V. Afanasyev, Yu. S. Demin, B. V. Ivanov, A. F. Kardo-Sysoev, V. V. Luchinin, S. A. Reshanov, A. Schöner, K. A. Sergushichev, and A. A. Smirnov, "30 kV pulse diode stack based on 4H-SiC," *Mater. Sci. Forum*, vol. 924 MSF, pp. 841–844, 2018, doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.924.841.
4. I. V. Grekhov and G. A. Mesyats, "Nanosecond semiconductor diodes for pulsed power switching," *Physics-Uspekhi*, vol. 48, no. 7, pp. 703–712, 2005, doi: 10.1070/pu2005v048n07abeh002471.
5. X. Yang, Y. Li, H. Wang, Z. Li, and Z. Ding, "Numerical investigation of the nanosecond opening-mechanism of drift step recovery diodes," *J. Appl. Phys.*, vol. 109, no. 1, 2011, doi: 10.1063/1.3531624.
6. A. G. Lyublinsky, S. V. Korotkov, Y. V. Aristov, and D. A. Korotkov, "Pulse power nanosecond-range dsrd-based generators for electric discharge technologies," *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 41, no. 10, pp. 2625–2629, 2013, doi: 10.1109/TPS.2013.2264328.
7. Y. Sharabani, I. Shafir, S. Zoran, A. Raizman, A. Sher, Y. Rosenwaks, and D. Eger, "Validation of fast current interruption mechanism in sub-nanosecond high-voltage switching diodes," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 37, no. 8, pp. 1041–1044, 2016, doi: 10.1109/LED.2016.2584541
8. A. G. Lyublinsky, A. F. Kardo-Sysoev, M. N. Cherenev, and M. I. Vexler, "Influence of DSRD operation cycle on the output pulse parameters," *IEEE Transaction on Power Electronics.*, vol. 37, no. 6, pp. 6271–6274, 2022, doi: 10.1109/TPEL.2021.3139536

Компактные фильтры С-диапазона на цилиндрических диэлектрических резонаторах с повышенной термостабильностью

Мартынов М. И.¹

¹ОАО "Завод Магнетон"

e-mail: *nitrogeniumfirst@gmail.com*

Коаксиальные фильтры на основе металлических и диэлектрических резонаторов являются самыми доступными способами реализации высокодобротных полос пропускания в СВЧ диапазоне. Простота конструкции обеспечивает высокую надежность и простоту настройки. Однако, фильтры на металлических резонаторах, при большей добротности, имеют существенный недостаток в виде нестабильности центральной полосы. И чем добротнее фильтр - тем сильнее девиация частоты по отношению к ширине полосы пропускания. Использование сплавов с минимальным коэффициентом линейного расширения позволяет бороться с данной проблемой, но линейные размеры таких фильтров сложно назвать компактными. Компромиссом является использование диэлектрических резонаторов с высокой диэлектрической проницаемостью (более 40). Потери в таких фильтрах определяются качеством керамики резонатора и размером резонансной камеры. Комбинирование свойств металла и керамики позволяет достичь крайне высоких показателей стабильности центральной частоты во всем диапазоне температур.

В работе представлены результаты макетирования компактных узкополосных фильтров С-диапазона частот. В основе фильтров использована керамика марки ТК-80 и ТК-70 производства ОАО "Завод Магнетон".

Основным требованием, на этапе макетирования, являлось получение узкополосных термостабильных фильтров в минимальных габаритах. Также было необходимо сохранить уровень потерь на адекватном уровне. С учетом величины тангенса угла диэлектрических потерь керамик ТК-70 и ТК-80 ($7 \cdot 10^{-4}$), полосы пропускания в 0,5%, имели потери в пределах 3,2-3,8 дБ в трехзвенном исполнении. Требование к прямоугольности к полосе пропускания ($2\Delta f/3\Delta f$ на $-13/-23$ дБ от уровня минимальных потерь) накладывало ограничение на нагруженную добротность звеньев фильтра, что увеличивало минимальные потери.

Термостабилизация фильтров произведена за счет конструкции и была достигнута величина дрейфа частоты в $1,4\% \Delta f$ (0,5 МГц) при охлаждении до минус 60 °С и $3,6\% \Delta f$ (1,3 МГц) при нагреве до плюс 70 °С. Центральные частоты фильтров располагались в диапазоне 6,5-7 ГГц.

Линейные размеры фильтров с такими параметрами составили не более 41,5x13,5x12 мм с учетом высоты подстроечных винтов.

Совместно с такими фильтрами, в едином корпусе, были применены вентили ФПВН2-385 производства ОАО "Завод Магнетон". Вентили устанавливались на вход и выход фильтра, что позволило получить развязку более 33 дБ во всем интервале температур. При этом, существенного влияния на минимальные потери фильтра, пара вентелей не оказала. При полосе в 39 МГц на частоте ~7 ГГц, потери фильтра не превысили 3,5 дБ. наибольший линейный размер составил всего 46 мм.

Классическая конструкция фильтров на диэлектрических резонаторах обеспечивает не только качественную характеристику полосы пропускания, но и паразитное возбуждение, близко стоящих, высших мод. Наличие паразитных полос пропускания выше фундаментальной, ограничивает свободный диапазон частот справа и ухудшает электромагнитную совместимость фильтра. Поэтому было реализовано подавление высших мод в трехзвенном фильтре, что привело к увеличению потерь второй и третьей мод до минус 50 дБ, 4 и 5 мод до минус 30 дБ. В итоге, свободный частотный диапазон (50 дБ) был расширен вплоть до 12 ГГц.

Список литературы

1. Ильченко М. и др. Диэлектрические резонаторы. – РиС, 1989.

Оценка неоднородности распределения плотности тока и температуры в структурах биполярных и гетеробиполярных СВЧ транзисторов по рекомбинационному излучению

Сергеев В.А.¹, Фролов И.В.¹, Казанков А.А.²

¹УФирЭ им.В.А.Котельникова РАН

²Ульяновский государственный технический университет

e-mail: *ilya-frolov88@mail.ru*

Мощные биполярные (БТ) и гетеробиполярные (ГБТ) ВЧ и СВЧ транзисторы широко применяются в современной радиоэлектронной аппаратуре и работают, как правило, в тепловых и электрических режимах, близких к предельным, при которых распределение температуры и плотности тока в гребенчатых структурах таких приборов становится существенно неоднородным в результате падения напряжения на токоведущей металлизации [1-3]. Прямое измерение распределения плотности тока и температуры в структурах полупроводниковых приборов (ППП) невозможно. Способ косвенной оценки неоднородности распределения плотности тока по падению напряжения на дорожках металлизации [1] является разрушающим и трудоемким. Эффективным инструментом для этих целей может служить регистрация рекомбинационного излучения (РИ), поскольку интенсивность РИ пропорциональна плотности тока в локальной области структуры и в структурах ГБТ практически линейно спадает с ростом температуры [4,5]. Однако в известных работах по исследованию РИ ГБТ [4,5] оценки неоднородности распределения плотности тока и температуры по площади структуры и характеристики пространственного разрешения используемых экспериментальных установок и методик не приводятся.

Современные многоэлементные фотоприемники позволяют уверенно регистрировать слабое РИ ППП в широком оптическом диапазоне с высоким пространственным разрешением. Для регистрации распределения РИ по площади приборных структур с пространственным разрешением порядка 1 мкм нами разработана экспериментальная установка с фотоприемником на основе монохромной КМОП камеры FL-20BW с максимальным разрешением 5472×3648 пикселей [6]. Для фокусировки изображения на поверхности КМОП-матрицы используется объектив микроскопа Levenhuk D320L. Изображение с КМОП-матрицы передается на ПЭВМ для визуального наблюдения, сохранения и последующего анализа. Интегральное РИ структуры регистрируется фотодиодом ФД256. Для измерения спектра РИ предусмотрена регистрация РИ локальных областей структуры спектрометром Ocean Optic USB2000 с оптоволоконным входом.

Установка апробирована на структурах БТ СВЧ транзисторов нескольких типов в различных схемах включения в импульсном и стационарном режимах работы. Получены яркостные профили распределения РИ структуры при включении БТ в диодном режиме, позволяющие оценить неоднородность распределения плотности тока вдоль дорожек металлизации. При этом яркостные профили РИ эмиттерного перехода транзисторов КТ504А в диодном включении хорошо описываются выражениями для распределения плотности тока вдоль дорожек металлизации, полученными в [1,2], и определяются падением напряжения на более узких по сравнению с эмиттерными дорожках металлизации. При включении транзистора в активном режиме характер токораспределения вдоль дорожек металлизации и, соответственно, яркостного профиля РИ, существенно изменяется и определяется падением напряжения на дорожке эмиттерной металлизации.

Токовая зависимость интенсивности интегрального РИ структуры транзистора КТ504А близка к линейной с уменьшением крутизны при токах, близких к предельным, что объясняется эффектом температурного гашения РИ. Зависимость интенсивности РИ эмиттерного перехода от температуры близка к линейной с относительным температурным коэффициентом в пределах 0,7–0,8 %/К, что позволяет определять температуру локальных областей структуры с погрешностью не более 2 К.

Установка может быть использована для оперативной неразрушающей диагностики неоднородности распределения плотности тока и температуры в структурах БТ и ГБТ СВЧ транзисторов на разных стадиях разработки и производства.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 22-29-01134. <http://rscf.ru/project/22-29-01134>.

Список литературы

1. Сергеев В.А., Аналитическая модель неизотермического распределения плотности мощности в структурах биполярных транзисторов, Известия вузов. Электроника, №3, 22-28, 2005.
2. Сергеев В.А., Неизотермическое токораспределение в гребенчатых структурах мощных ВЧ и СВЧ биполярных транзисторов, Известия Самарского научного центра Российской академии наук, №2, 344–351, 2005.
3. Sergeev V. A. and Khodakov A. M., Two-Section Model of the Current Distribution in Strip Layouts of Bipolar and Hetero-Bipolar Microwave Transistors, Journal of Communications Technology and Electronics, Vol. 67, No. 11, 1400–1405, 2022.
4. Harris M. et al., Full two-dimensional electroluminescent (EL) analysis of GaAs-AlGaAs HBTs, 1999 IEEE International Reliability Physics Symposium Proceedings. 37th Annual (Cat. No.99CH36296), 121-127, 1999.
5. Schuermeyer F. et al. Thermal studies on heterostructure bipolar transistors using electroluminescence, Proceedings 2000 IEEE/ Cornell Conference on High Performance Devices (Cat. No.00CH37122), 45-50, 2000.
6. Sergeev V., Frolov I. and Radaev O., Measurement of the Overheating Temperature Profile of the Surface of the Light-Emitting Heterostructure by the Temperature Droop of the Luminescence Brightness, 2022 VIII International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT), 1-4, 2022.

Оптические и электрические свойства гетероструктур (Al,Ga)N легированных глубокими примесями

Сахаров А. В.¹, Д.С. Артеев¹, Е.Е. Заварин¹, А.Е. Николаев¹, В.В.Лундин¹, А.Ф. Цацульников²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²НТЦ Микроэлектроники РАН

e-mail: val.beam@mail.ioffe.ru

Транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе III-N соединений на данный момент активно замещают традиционные приборы на основе кремния за счет комбинации их уникальных свойств, таких как большая ширина запрещенной зоны, высокая теплопроводность и большая насыщенная скорость электронов позволяющей создавать как мощные, так и высокочастотные транзисторы [1]. При формировании гетероструктур для HEMT одной из ключевых задач является создание изолирующих буферных слоев для обеспечения работы при высоких напряжениях. При отсутствии коммерчески доступных подложек GaN большого размера, рост производится на инородных подложках, таких как SiC и Si, что приводит к высокой плотности дефектов в растущем материале и возникновению паразитной проводимости. Единственным адекватным способом подавления проводимости в буферных слоях GaN является введение глубоких центров или за счет легирования соответствующими примесями (углерод, железо, марганец) [2]; углерод может встраиваться из используемых при газофазной эпитаксии прекурсоров (металлорганических соединений) но путем ухода от оптимальных условий роста но все же более перспективным представляется использование отдельных источников для легирования. Концентрация введенных примесей обычно определяется методом вторично-ионной масс-спектропии, что является достаточно затратным методом. При разработке и исследовании структур желательно иметь возможность оперативно оценивать уровень легирования, например оптическими методами.

В данной работе представлены данные по исследованию фотолуминесцентных (ФЛ) и электрических свойств как транзисторных HEMT структур, так и слоев GaN легированных железом и углеродом. Продемонстрировано, что использование легирующих примесей железа и углерода позволяет создать изолирующие слои с высоким пробивным напряжением. Для структур легированных углеродом присутствующие в спектре ФЛ полосы являются типичными для GaN, в то время как при легировании железом возникает новая полоса связанная с внутрицентровыми переходами в железе. Показано, что по данным ФЛ возможна количественная оценка концентрации железа в слое GaN; однако для легирования углеродом такая оценка крайне затруднена. Обнаружено, что при легировании Fe интенсивность полосы ФЛ связанной с примесью Fe коррелирует с концентрацией нескомпенсированной примеси. Проведено сопоставление интенсивностей различных полос ФЛ при изменении уровня легирования с электронными свойствами HEMT структур AlGaIn/GaN. Данные исследований могут быть использованы для контроля свойств структур для полевых транзисторов.

Список литературы

1. M. Haziq *et al.*, Challenges and Opportunities for High-Power and High-Frequency AlGaIn/GaN High-Electron-Mobility Transistor (HEMT) Applications: A Review, *Micromachines* **13**, 2133, (2022).
2. D. Tanaka, K. Iso, J. Suda, Comparative study of electrical properties of semi-insulating GaN substrates grown by hydride vapor phase epitaxy and doped with Fe, C, or Mn, *J. Appl. Phys.* **133**, 055701, (2023).

Комплекс СВЧ диагностики холодных атмосферных плазменных струй

Астафьев А. М.¹, Альтмарк А.М.¹, Лесив Н.А.¹, Чирцов А.С.¹

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: *astafev-aleksandr@yandex.ru*

В течение последних двух десятилетий активно внедряются и развиваются технологии, связанные с использованием атмосферных плазменных струй с низкой (около 300 К) газовой температурой. Так, например, они могут быть использованы для обработки различных полимеров с целью повышения адгезии наносимого на их поверхность лакокрасочного покрытия [1]. Кроме того, низкотемпературные плазменные струи могут применяться для нетермической дезинфекции как различных поверхностей медицинских изделий, так и живых тканей [2]. В основе применяемых на практике устройств используется газоразрядная ячейка, на выходе из которой формируется плазменная струя длиной несколько сантиметров и диаметром несколько миллиметров. Для генерации таких плазменных струй используются различные типы разрядов, которые чаще всего не являются стационарными. При создании новых источников низкотемпературной плазмы и выбора режимов работы этих устройств для конкретных приложений возникает необходимость в измерении динамических процессов в таких разрядах с высоким временным разрешением. Одной из наиболее важных характеристик плазмы является электронная концентрация, которая для плазмы атмосферного давления с низкой температурой газа может быть очень небольшой (менее 10^{13} см⁻³). И хотя в настоящее время имеется большое множество методов измерения электронной концентрации газоразрядной плазмы, однако доступные в настоящее время методы либо обладают недостаточной чувствительностью для диагностики плазменных струй, либо не позволяют отслеживать динамические процессы.

Предложенная и реализованная система СВЧ диагностики низкотемпературных атмосферных плазменных струй основана на известном способе измерения сдвига частоты и добротности собственных мод СВЧ резонатора. Основным элементом предложенной системы является цилиндрический СВЧ резонатор диаметром 192 мм и высотой 105 мм, в котором возбуждалась единственная ТМ₀₁₀ мода на частоте 1,19 ГГц с помощью небольшой рамочной антенны, расположенной у боковой стенки резонатора и подключенной к трекинг-генератору анализатора спектра. Напротив возбуждающей антенны расположена такая же небольшая рамочная антенна, которая подключена ко входу анализатора спектра. В центре одного из оснований цилиндрического резонатора имеется отверстие диаметром 10 мм для ввода плазменной струи. Другое основание резонатора имеет окно диаметром 50 мм с тонкой металлической сеткой, которое позволяет наблюдать и контролировать плазменную струю внутри резонатора, не изменяя при этом структуры поля возбуждаемой моды. Электронная концентрация определялась по изменению добротности ТМ₀₁₀ моды с использованием известной теории возмущения, а также известных выражений для диэлектрической проницаемости и проводимости плазмы [3].

С помощью предложенной системы были выполнены измерения временных зависимостей электронной концентрации плазменной струи барьерного разряда в потоке гелия, которая зажигалась от высоковольтного источника частотой 9 кГц. В отличие от ранее исследованного случая [4], такая низкая частота источника позволила четко разрешить отдельные пробои барьерного разряда, поскольку за такой большой период питающего напряжения плазма от отдельных пробоев полностью успевает рекомбинировать до возникновения следующих.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №22-22-20065) и Санкт-Петербургского научного фонда (проект №17/2022).

Список литературы

1. Z. Fang, J. et al. "Surface Treatment of Polyethylene Terephthalate to Improving Hydrophilicity Using Atmospheric Pressure Plasma Jet" in IEEE TPS, v. 41, no. 6, pp. 1627-1634, June 2013.
2. A. Fridman and G. Friedman, Plasma Medicine. John Wiley & Sons Limited, Chichester, UK, 2013.
3. В. Е. Голант. Сверхвысокочастотные методы исследования плазмы, М., «Наука», 1968, 327 с.
4. Astafiev, Aleksandr M. et al. "Development of a Complex for Microwave Diagnostics of Low-Temperature Atmospheric Plasma Jets." 2022 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech) (2022): 203-206.

Туннельный эффект в гетероструктурах на основе нитевидных нанокристаллов GaN на кремнии

Шугуров К. Ю.¹, Можаров А. М.¹, Мухин И. С.¹, Барыкин Д.А.¹

¹СПБАУ РАН

e-mail: shugurov17@mail.ru

Сегодня трудно переоценить роль электроники и связанных с ней технологий в повседневной жизни человека. Она внедрена практически в любое направление его деятельности, начиная от простейших бытовых вещей и заканчивая освоением космического пространства. Одной из наиболее значимых отраслей является сверхвысокочастотная (СВЧ) электроника, поскольку обеспечивает функционирование беспроводных систем связи, передачи и обработки информации, а также лежит в основе различных лабораторных комплексов и медицинского оборудования. За последние 70 лет были разработаны различные полупроводниковые приборы СВЧ диапазона, в частности, *p-i-n* диоды, диоды Шоттки, Ганна, а также туннельные и обращенные диоды, работа которых основана на эффекте туннелирования. Данный класс элементов занимает очень важную нишу, поскольку широко используется в цепях детектирования, смещения, усиления и генерации высокочастотных сигналов [1]. Используемые сегодня в промышленности полупроводники для изготовления туннельных/обращенных диодов (GaAs, Ge, GaSb, Si) существенно ограничивают возможности таких приборов, следовательно необходимо внедрение новых материальных систем.

Перспективной системой материалов, еще не получившей широкого распространения в электронной индустрии, являются гетероструктуры GaN/Si, которые позволяют совместить преимущества нитрида галлия (широкозонный материал, прямозонная структура, высокая термическая, химическая и радиационная стойкость) с развитостью и доступностью кремниевой технологии. Однако, данные полупроводники плохо совместимы из-за существенного рассогласования по параметру кристаллической решетки и коэффициенту теплового расширения. Поэтому получение высококачественных планарных слоев GaN на Si до сих пор стоит на повестке дня [2]. Альтернативным подходом является использование нитевидных нанокристаллов (ННК), главным преимуществом которых является высокое кристаллическое совершенство практически вне зависимости от выбора ростовой подложки, что значительно расширяет возможности интеграции GaN с другими материалами. Более того, исследования ННК GaN показывают, что данные объекты хорошо подходят для создания различных полупроводниковых компонентов, в том числе быстродействующих [3].

Работа посвящена исследованию туннельного эффекта в гетероструктурах GaN ННК/Si. Таким образом, затрагивается сразу два актуальных аспекта: проблема кристаллического качества планарных слоев GaN и изучение GaN/Si гетероструктур для совершенствования электронной компонентной базы. В ходе исследований при помощи различных постростовых методик были изготовлены прототипы диодных структур с туннельным эффектом на основе вертикально ориентированного массива ННК GaN на Si, а также изучены их вольт-амперные характеристики.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01279 (<https://rscf.ru/project/23-79-01279/>)

Список литературы

1. Clinton E. A. et al. Negative differential resistance in GaN homojunction tunnel diodes and low voltage loss tunnel contacts //Applied Physics Letters. – 2018. – T. 112. – №. 25. – C. 252103.
2. Zhong Y. et al. A review on the GaN-on-Si power electronic devices //Fundamental Research. – 2022. – T. 2. – №. 3. – C. 462-475.
3. Takahashi T. et al. Highly sensitive p-GaAsSb/n-InAs nanowire backward diodes for low-power microwaves //ESSDERC 2019-49th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC). – IEEE, 2019. – C. 214-217.

Примеси и дефекты в твердом теле

Создание однородного поля температурного градиента для реализации метода термомиграции в кремнии

Середин Б. М.¹, Попов В.П.¹, Заиченко А.Н.¹, Малибашев А.В.¹, Гаврус И.В.¹, Минцев А.А.¹, Скиданов А.А.²
¹ЮРГПУ (НПИ), ²АО «ВЗПП-Микрон».

e-mail: *seredinboris@gmail.com*

Метод термомиграции (ТМ) жидких включений (зон) дает уникальную возможность формировать сквозные кристаллически совершенные эпитаксиальные каналы в пластине кремния [1]. Однако практическое использование метода ТМ в полупроводниковой технологии невозможно без обеспечения строго однородного поля температурного градиента, нормального пластине. Это необходимо для сохранения топологии системы дискретных зон (точечной или линейной форм), заданной на стартовой поверхности пластин. Искажение формы зон или траекторий их движения делают невозможным проведение последующих операций при изготовлении структур полупроводниковых приборов [2–4].

Создание однородного градиента температуры, обеспечиваемого нагревательным устройством, решалась в настоящей работе как с помощью математического моделирования с использованием программного обеспечения ANSYS Mechanical [5], так и экспериментальной проверкой полученных выводов. Процесс моделирования состоял в построении трехмерной модели нагревательного устройства, задании соответствующих характеристик используемых материалов, настройке расчетной сетки модели, задании граничных условий и расчете распределения температуры и ее градиента в пластине кремния при разных вариантах взаимного расположения пластины, кассеты и нагревателя. Использовали плоский резистивный нагреватель площадью 3,2 дм² в виде зигзагообразной графитовой спирали толщиной 5 мм. Ширина ламелей составляла 10 мм, а зазоров между ними 1 мм. Пластину кремния с ориентацией кристаллографической плоскости (100), диаметром 100 мм и толщиной 0,5 мм располагали в отверстии графитовой кассеты толщиной 5 мм параллельно нагревателю. Контроль конфигурации температурного поля проводили с помощью ТМ системы дискретных зон на основе алюминия. Металлографический анализ траекторий движения зон в объеме и на поверхности пластины кремния позволял судить об искажениях температурного поля и адекватности нагревательного устройства.

Математическое моделирование выявило два вида типичных искажений температурного поля в пластине кремния: монотонное радиальное изменение температуры и периодическое с шагом 11 мм, перпендикулярное ламелям нагревателя и максимальной амплитудой 10 К при средней температуре пластины в диапазоне 1300–1500 К. Монотонное изменение температуры зависело от расстояния между пластиной и нагревателем, которое меняли от 6 до 11 мм. При минимальном расстоянии температура на краях пластины была выше на ~ 20 К, чем в центре, а при максимальном – ниже на ~25 К. При средних значениях расстояний (8–9 мм) отклонения температуры на краях пластины не превышали нескольких градусов. Эта зависимость объясняется влиянием различия температур между стенками кассеты и краем пластины кремния. Периодические неоднородности температуры, очевидно, вызваны дискретностью нагревателя. Увеличение расстояния между пластиной и нагревателем от 6 до 10 мм уменьшало амплитуду температурных колебания в ~ 7 раз.

Радиальные отклонения от нормали траекторий движения системы дискретных зон, выявленные экспериментально, подтвердили монотонные изменения температуры в пластине кремния.

Наблюдали также и периодические отклонения траекторий линейных зон от нормали в обе стороны на угол $5-7^\circ$, которые были расположены параллельно ламелям нагревателя. Эти отклонения траекторий от нормали количественно соответствовали результатам моделирования.

Полученные результаты использовали для формирования в пластиках кремния диаметром 100 мм сквозных замкнутых квадратных ячеек p -типа шириной 100 мкм и стороной 2,3 мм, пригодных для силовой электроники. При удельном сопротивлении кремния величиной 4,5 Ом*см эпитаксиальные каналы имели удельное сопротивление $\sim 0,01$ Ом*см, а напряжение пробоя p - n -переходов составляло 280–300 В.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания Южно-Российскому государственному политехническому университету (НПИ) имени Платова по программе FENN-2023-0005 с использованием пластин кремния, подготовленных АО «ВЗПП-Микрон».

Список литературы

1. В.Н. Лозовский [и др.]. Зонная перекристаллизация градиентом температуры полупроводниковых материалов. Изд-во Металлургия (1987) 233.
2. B. Lu [et all.] Microelectronic Engineering 149 (2016) 97–105.
3. О. С. Полухин [и др.] Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 5–6 (2021) 33–40.
4. A. A. Lomov [et all.] Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering: 14 (2022) 1215703.
5. Ansys, сайт. URL: <https://www.ansys.com>.

Диэлектрические свойства нитрата рубидия, внедренного в пористые пленки оксида алюминия

Барышников С.В.¹, Милинский А.Ю.¹, Стукова Е.В.²
¹БГПУ, ²АМГУ

e-mail: *svbar2003@list.ru*

Один из способов получения нанокompозитов, обладающих полярными свойствами, заключается в заполнении нанопористых матриц сегнетоэлектрическими материалами. В качестве таких матриц используются пористые стекла, опалы, пористые окисные пленки алюминия и других металлов. Исследования полярных наноструктур, полученных на основе пористого оксида алюминия, были проведены для TGS, $SC(NH_2)_2$, $NaNO_2$, KNO_3 , KIO_3 , $C_6H_{16}NBr$ и ряда других сегнетоэлектриков.

В данной работе приводятся результаты исследований диэлектрических свойств нанокompозитов на основе нитрата рубидия $RbNO_3$, внедренного в пленки Al_2O_3 с диаметром пор 100 нм.

Нитрат рубидия может существовать в четырех устойчивых формах. При комнатной температуре $RbNO_3$ находится в тригональной фазе (фаза IV), которая остается устойчивой до температуры 437 К. Эта фаза является пироэлектрической с образованием 180-градусных пироэлектрических доменов [1]. В диапазоне температур от 437 до 492 К нитрат рубидия переходит в кубическую параэлектрическую фазу (фаза III), при этом проводимость $RbNO_3$, согласно источнику [2], увеличивается на два порядка, а фаза обладает суперионной проводимостью. В интервале от 492 до 558 К $RbNO_3$ пребывает в ромбоэдрической фазе (фаза II), которая определяется как антисегнетоэлектрическая [3]. При температурах выше 558 К нитрат рубидия снова переходит в кубическую фазу (фаза I), которая существует до температуры плавления, равной 587 К.

Для получения нанокompозитов использовался химически чистый $RbNO_3$ и оксидные пленки Al_2O_3 , произведенные компанией "TopMembranes Technology" с ячейками размером 125 nm, порами диаметром 100 nm и толщиной 10 μm . Внедрение нитрата рубидия в поры производилось из нагретого насыщенного раствора. В качестве эталонных образцов использовались таблетки $RbNO_3$ диаметром 10 mm и толщиной 1.5 mm, полученные прессованием при давлении $8 \cdot 10^3$ kg/cm². Измерение комплексной диэлектрической проницаемости проводилось с использованием измерителя иммитанса E7-25. Electroдами служила In-Ga паста. Температура определялась с помощью термометра TC-6621 с хромель-алюмелевой термопарой. Наличие полярной фазы $RbNO_3$ определялось по генерации высших гармоники при подаче на образец переменного электрического поля [4].

В поликристаллическом нитрате рубидия фазовый переход между тригональной и кубической фазами наблюдается в процессе нагрева при температуре 439 К и в ходе охлаждения – при 436 К. Проводимость нитрата рубидия при фазовом переходе 439 К увеличивается почти на два порядка. Коэффициент третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ для объемного образца составляет порядка 0.01 и имеет минимум на фазовом переходе, вероятно, обусловленный обращением в ноль пироэлектрической поляризации.

Из температурной зависимости $\epsilon'(T)$ для нанокompозита $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ следует, что температуры фазовых переходов между тригональной и кубической фазами снижаются до 433 К при нагреве и до 427 К при охлаждении. График $R(T)$ показывает, что скачок сопротивления на фазовом переходе уменьшается, а область фазового перехода размывается. Коэффициент третьей гармоники при этом имеет аномалию, увеличиваясь примерно в 2,5-3 раза вблизи фазового перехода. Кроме того, наблюдается более сильная зависимость диэлектрической проницаемости и тангенса диэлектрических потерь от частоты, чем для объемного нитрата рубидия. Вероятно, это связано с наличием поляризации Максвелла-Вагнера.

Исследования, проведенные на нанопористых матрицах Al_2O_3 , заполненных нитратом рубидия с размером каналов-пор 100 нм, показали размытие и смещение фазового перехода в низкотемпературную область. Увеличение коэффициента третьей гармоники для нанокompозита $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ может указывать на переход нитрата рубидия из состояния пироэлектрика в сегнетоэлектрическое состояние в результате ограничения размеров частиц RbNO_3 до нанометрового диапазона.

Список литературы

1. P. C. Bury, A. C. McLaren. Phys. Stat. Sol. **31**, 799 (1969).
2. P. P. Salhotrae, A. C. Subbarao, P. Venkateswarlu. Phys. Stat. Sol. **31**, 233 (1969).
3. Ya. Dantsiger. Soviet Phys. - Solid State **7**, 1845 (1966).
4. S. Ikeda, H. Kominami, K. Koyama, Y. Wada J. Appl. Phys. **62**, 3339 (1987)

Электрические свойства кристаллов твердого раствора $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$ и структур металл-полупроводник на их основе

Алиева Т. Д.¹, Н.М.Ахундова², Г.Д. Абдинова¹, Г.З. Багиева¹, Д.Ш.Абдинов¹

¹Азербайджанский государственный экономический университет, Азербайджанская Республика

e-mail: mahbuba.i.valiyeva@gmail.com

Твердый раствор $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te$ является среднетемпературным термоэлектриком и фоточувствительным материалом в инфракрасной области спектра. Как и соединения $PbTe$ и $SnTe$ этот твердый раствор кристаллизуется с отклонением от стехиометрии и содержит электрически активные вакансии в подрешетке катионов с концентрацией до $10^{19} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$, что создает определенные затруднения для их практического приложения. Выяснено, что в кристаллах теллурида свинца и олова концентрацией электроактивных вакансий можно управлять введением в них атомов катионов сверхстехиометрии. Аналогичного эффекта можно ожидать и в кристаллах твердого раствора $Pb_{1-x}Sn_xTe$.

В настоящей работе выращены монокристаллы твердого раствора $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te$ со сверхстехиометричным оловом $0 \div 1,0$ ат.%, созданы структуры (мас.%95In+4Ag+1Au)- $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$ и изучены их электрические свойства в интервале температур 77-300К. Опыты проводились в неотожженных и отожженных при 773К в течение 120 часов кристаллах и структурах на их основе.

Выяснено, что зависимости электропроводности s от температуры кристаллов $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$, непрошедших и прошедших отжиг имеют металлический характер. Однако s отожженных образцов со сверхстехиометричным (избыточным) оловом при $\sim 77\text{К}$ в ~ 3 раза превышает электропроводности соответствующих неотожженных образцов. В случае же кристалла без избыточного олова, с отжигом s в $\sim 1,7$ раза уменьшается. Во всех случаях зависимости $s(T)$ кристаллов выше $\sim 170\text{К}$ несколько усиливаются.

Для неотожженных образцов с 0,01-0,1 ат.% избытком олова выше $\sim 200\text{К}$, а для остальных образцов, также для отожженного образца без избытка олова, во всем интервале температур знаки коэффициента термоэдс a положительные и a с температурой растут. Знаки a отожженных образцов с избытком олова отрицательные в интервале 77-300К.

Сопротивление контакта r_k структур (In-Ag-Au) - $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te <0,05 \text{ ат.} \% \text{ Sn}>$ при 77К равно $2,0 \cdot 10^{-5} \text{ Ом} \times \text{см}^2$, что в ~ 12 раз ниже, чем r_k структуры на основе кристалла, не содержащего избыточного олова. При больших содержаниях избыточного олова r_k увеличивается до значения $2,6 \times 10^{-4} \text{ Ом} \times \text{см}^2$. Для всех исследованных структур контактное сопротивление с увеличением температуры растет.

Показано, что в неотожженных образцах кристаллов $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te<Sn>$ существуют различные структурные дефекты, возникающие при выращивании кристаллов и изготовлении из них образцов для экспериментов, определяющие концентрацию и тип носителей тока. Отжигом образцов происходит залечивание этих дефектов, а их электрические свойства определяются, в первую очередь, электроактивными катионными и анионными вакансиями в них, а также особенностями валентной зоны данного твердого раствора. Избыточно введенные атомы олова в

кристаллах $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te$, создавая донорные центры, увеличивают концентрацию свободных электронов, в результате чего электропроводность растет, а знак коэффициента термоэдс становится отрицательным.

Малое значение ($\sim 2 \times 10^{-5} \text{ Ом} \times \text{см}^2$) контактного сопротивления структур вызвано диффузией компонентов контактного сплава (In-Ag-Au), в основном, акцепторных атомов Ag в приконтактной области кристаллов $Pb_{0.75}Sn_{0.25}Te\langle Sn \rangle$, приводящих к росту концентрации носителей тока, а также образованием в контакте структур низкоомных промежуточных фаз (типа Ag_2Te). В контактах исследованных структур ток проходит по металлическим шунтам, образовавшимся в результате осаждения атомов компонентов контактного сплава по линиям несовершенств кристалла в приконтактной области.

Влияние легирования РЗЭ на роль случайных макроскопических дефектов в характеристиках гетеропереходов p-GaSe/n-InSe

Абдинов А. Ш.¹, Р.Ф.Бабаева², С.И.Амирова¹, Н.А.Рагимова¹, Э.А.Расулов¹

¹БГУ

²Азербайджанский Государственный Экономический Университет (UNEC)

e-mail: *abdinov-axmed@yandex.ru*

С целью выявления возможностей улучшения качеств фотоприемников света на основе гетеропереходов p-GaSe/n-InSe, исследовано влияние легирования контактирующих пар редкоземельными элементами (РЗЭ) на их основные характеристики. Исследуемые гетеропереходы были созданы методом прямой посадки на оптический контакт [1] чистых, а также легированных гадолинием, гольмием и эрбием с различным содержанием ($N_{PЗЭ} \approx 10^{-5} \div 10^{-1}$ ат.%) тонких пластинок монокристаллов слоистых полупроводников p-GaSe и n-InSe [2]. При измерениях ток, протекающий через исследуемый гетеропереход и падающий на него пучок света, были направлены перпендикулярно плоскостям (001) обоих кристаллов и гетеропереходов. В фото-вольтаическом режиме [3, 4] при $77 \leq T \leq 350$ К, $E \approx 2 \cdot 10^2 \div 1.5 \cdot 10^3$ В/см, длине волны $\lambda_c = 0.20 \div 2.00$ мкм и интенсивности $\Phi_c \approx 5 \cdot 10^0 \div 5 \cdot 10^2$ Лк света снимались основные характеристики исследуемых гетеропереходов.

Установлено, что все исследуемые гетеропереходы имеют диодный характер [3], с прямым направлением при положительной полярности приложенного напряжения на слое p-GaSe. Коэффициент выпрямления (κ) при падении напряжения на исследуемых гетеропереходах $U_{ГК} \approx 3$ В достигает до ~ 30 В и зависит от толщины, величины исходного (имеющего при 77 К) темнового удельного сопротивления (ρ_{77}), уровня легирования ($N_{PЗЭ}$) контактирующих пар. При $U_{ГК} \geq 0.50$ В экспоненциальный ход прямой ВАХ заменяется линейным. При $T \geq 300$ К величина напряжения отсечки (U_{0T}) [3, 4] соответствует высоте потенциального барьера на контакте ($\sim 0.80 \div 1.10$ В), а остаточное сопротивление (R_0) составляет $\sim 5 \cdot 10^4 \div 6 \cdot 10^5$ Ом для различных образцов. С увеличением $N_{PЗЭ}$ до 10^{-3} ат.% величина R_0 сначала возрастает на порядок, далее (при $N_{PЗЭ} > 10^{-3}$ ат.%) уменьшается и при $N_{PЗЭ} \geq 10^{-2}$ ат.% становится даже меньше, чем имеющийся в гетеропереходах, созданных на основе наиболее низкоомных чистых кристаллов. При освещении слой p-GaSe заряжается отрицательно относительно слоя n-InSe. При освещении со стороны p-GaSe наблюдается максимальное значение фотонапряжения (U_ϕ), а спектр фото-э.д.с. состоит из двух: соответствующих поглощению света в слое p-GaSe и n-InSe коротковольного и длинновольного, участков соответственно. При освещении со стороны n-InSe слоя спектр фоточувствительности полностью определяется поглощением в n-InSe. При оптимальных условиях напряжение холостого хода ($U_{хх}$) и ток короткого замыкания ($i_{к.з.}$) [3] в исследуемых гетеропереходах составляют ~ 0.35 В и ~ 45 мкА/см², соответственно. При $N_{PЗЭ} \approx 10^{-1}$ ат.% величина U_ϕ , а также ширина ее спектра совпадают с имеющимися в гетеропереходах на основе чистых кристаллов с наименьшим ρ_{77} и наблюдаются максимальная стабильность и воспроизводимость характеристик. Установлено, что с уменьшением толщины контактирующих пластин их гибкость увеличивается, что придает созданному на их основе фотоэлементу чрезвычайные возможности при эксплуатации.

Показано, что в исследуемых гетеропереходах доминирует туннельный механизм токопрохождения. Однако при этом необходимо учитывать также наличие различного типа локальных уровней [4] в запрещенной зоне контактирующих пар. Расширение спектральной характеристики при освещении их со стороны p-GaSe связано с «эффектом окна» [3], а нестабильность, низкая воспроизводимость и зависимость от $N_{P3Э}$ характеристик, обусловлены наличием в кристаллах контактирующих пар случайных макроскопических дефектов (СМД) [5-7]. Предполагается, что при легировании, имеющие очень низкую растворимость в полупроводниках ионы РЗЭ скапливаясь на СМД, увеличивают их размеры. При малых $N_{P3Э}$, области пространственного заряда (ОПЗ) соседних СМД еще не перекрываются и случайный потенциал (СП) велик по сравнению с имеющим место в чистых кристаллах. Поэтому, с ростом $N_{P3Э}$, в исследуемых гетеропереходах увеличиваются связанные с СП особенности фотоэлектрических явлений. С дальнейшим ростом $N_{P3Э}$, начинают перекрываться ОПЗ соседних СМД. Вследствие чего, СП и его влияние на фотопроводимость уменьшается [8], а воспроизводимость и стабильность характеристик гетеропереходов увеличивается.

Список литературы

1. Бакуменко В.Л., Ковалюк З.Д., Курбатов Л.Н., Тагаев В.Г., Чишко В.Ф. // ФТП, 1980, Т. 14, в. 6, с. 1115-1118.
2. Медведева З.С. Халькогениды элементов III Б подгруппы периодической системы. М., Наука, 1968, - 216 с.
3. Шарма Б.Л., Пурохит Р.К. Полупроводниковые гетеропереходы. М., Советское радио, 1979, - 228с.
4. Milutinovic A., Lazarevic Z.Z., Jakovljevic M., Hadzis B., Petrovic M., Gilic M., Dobrowolski W.D., Romcevic N.Z. // Journal of physics and chemistry of solids, 2016, Vol. 89, p. 120-127.
5. Шик А.Я. // ЖЭТФ, 1972, Т. 15, с. 408-410.
6. Абдинов А.Ш., Бабаева Р.Ф. // Изв. ВУЗов. Физика, 2019, № 9, с. 132 -138.
7. Абдинов А.Ш., Бабаева Р.Ф. // ФТП, 2018, Т. 52, № 13, с. 1563-1569.
8. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979, - 416 с.

Проблемы ионной имплантации оксида галлия

Никольская А. А.¹, Д.С. Королев¹, А.Н. Михайлов¹, А.И. Белов¹, В.Н. Трушин¹, М.Н. Дроздов², П.А. Юнин², А.В. Кудрин¹, Д.Е. Николичев¹, А.А. Ревин¹, А.А. Конаков¹, Е.В. Окулич^{1,3}, В.И. Окулич³, А.В. Степанов⁴, Д.И. Тетельбаум¹

¹ННГУ

²ИФМ РАН

³НИУ филиал РАНХиГС

⁴Чувашский ГАУ

e-mail: nikolskaya@nifti.unn.ru

Оксид галлия Ga₂O₃ относится к классу сверхширокозонных полупроводников, спрос на которые возник в последние десятилетия в связи с выросшими потребностями таких отраслей, как электротранспорт, «зеленая» энергетика, экология, медицина и др. [1]. Большая ширина запрещенной зоны (~ 5 эВ) Ga₂O₃, радиационная, химическая и термическая стойкость в совокупности с большим диапазоном электронной проводимости и возможностью выращивания слитков большого диаметра позволили ему занять лидирующие положение среди других широкозонных материалов будущей полупроводниковой индустрии для указанных областей. Как известно, в традиционной полупроводниковой микроэлектронике для придания материалам требуемых свойств и формирования топологии приборов используется ионная имплантация с ее уникальными возможностями локального легирования примесными атомами и «инженерии дефектов». В случае Ga₂O₃ этот метод также применяется, но разработка его физических основ находится ещё в зачаточном состоянии [2].

Основные специфические для Ga₂O₃ проблемы в области ионной имплантации, которые предстоит решить, заключаются в следующем.

- 1) Исследование закономерностей ионного легирования донорными и акцепторными примесями; установление предельных концентраций электронов и проводимости при легировании мелкими донорными примесями в зависимости от параметров имплантации и постимплантационного отжига, способа получения исходного материала, кристаллографической ориентации образцов (с учетом анизотропии структуры, особенно выраженной для стабильного поли типа β-Ga₂O₃), установление возможности амфотерного поведения этих примесей.
- 2) Исследование возможности получения низкоомного Ga₂O₃ p-типа, чего не удалось до сих пор надежно установить при неимплантационных способах легирования. Неравновесный характер процессов при ионной имплантации предоставляет дополнительные шансы решения этой чрезвычайно важной для применений Ga₂O₃ задачи.
- 3) Установление характера и закономерностей полиморфных превращений Ga₂O₃ при ионном облучении, а также ионного легирования метастабильных фаз. Это существенно расширило бы фундаментальность Ga₂O₃, в частности открыло бы путь к ионно-лучевому синтезу гетерофазных структур на основе двух и более полиморфных фаз.
- 4) Компьютерное моделирование процессов при ионной имплантации Ga₂O₃ и расчет электронной структуры получаемых этим методом слоев.

В настоящем сообщении излагаются некоторые результаты проведенных авторами исследований. В частности, изучены изменения кристаллического совершенства β -Ga₂O₃ при облучении ионами B⁺, Si⁺ и последующих отжигах; установлена зависимость степени структурного совершенства и активации донорной примеси (Si) от ориентации поверхности; установлен аномальный характер распределения имплантированного бора при постимплантационном отжиге. Проведены первопринципные расчёты энергетических параметров при изменении позиций бора в решетке и расчёты зонной структуры Ga₂O₃, легированного бором слоев. Расчеты подвижности дырок в сильно легированных Si слоях β -Ga₂O₃.

Полученные результаты обсуждаются с точки зрения перспектив дальнейших исследований и их применения для создания приборов нового поколения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-00052, <https://rscf.ru/project/23-79-00052/>.

Список литературы

1. S. J. Pearton, J. Yang, P.H. Cary *et al.* // Appl. Phys. Rev, V. 5, 011301 (2018).
2. A. Nikolskaya, E. Okulich, D. Korolev *et al.* // Journal of Vacuum Science & Technology A, V. 39, 030802 (2021).

Фотолюминесценция эпитаксиальных слоев $\text{Hg}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$

Ружевич М. С.¹, Баженов Н. Л.², Мынбаев К. Д.², Михайлов Н. Н.³, Ремесник В. Г.³

¹Университет ИТМО

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН

e-mail: max.ruzhevich@niuitmo.ru

Теллуриды кадмия и ртути образуют непрерывный ряд твердых растворов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (КРТ), на основе которых возможно изготовление приборов фото- и оптоэлектроники, работающих в диапазоне длин волн λ от 1 до 14 мкм. Для изготовления фотоприемных устройств на основе КРТ используется как материал с малым содержанием теллурида кадмия $x \approx 0.2-0.3$, так и более широкозонный материал состава $x \approx 0.7$. Средневолновые фотоприемники ИК излучения на основе КРТ с $x \approx 0.3$ используются для определения концентрации некоторых газов в атмосфере, что необходимо в экологии, промышленности и медицине. Коротковолновые фотоприемники ИК излучения на основе КРТ с $x \approx 0.7$ необходимы для астрономических измерений.

В силу значительной степени ионности химической связи, твердые растворы КРТ обладают значительным разупорядочением, проявляющимся, в том числе, в масштабных флуктуациях химического состава. Для стохастических флуктуаций максимум разупорядочения должен проявляться при $x \approx 0.5$, и их масштаб для составов $x \approx 0.3$ и $x \approx 0.7$ должен быть близок. В данной работе метод фотолюминесценции (ФЛ) был применен для проведения сравнительного исследования разупорядочения твердого раствора в $\text{Hg}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$.

В работе были исследованы свойства материала, полученного различными методами, однако акцент делался на эпитаксиальных пленках, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Такие пленки выращивались в ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН на подложках из Si и GaAs. Для сравнения исследовались эпитаксиальные пленки, выращенные методом жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) на подложках Cd(Zn)Te, а также объемные кристаллы, выращенные методом вертикально-направленной кристаллизации (ВНК). Спектры ФЛ записывались в диапазоне температур $T=4.2-300$ К при импульсном возбуждении. В качестве вспомогательных методов исследования использовались методы оптического пропускания (ОП) и фотопроводимости. Также были проведены структурные исследования образцов методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии с использованием энерго-дисперсионной рентгеновской спектроскопии для контроля химического состава.

Состав, определенный по краю пропускания на спектрах ОП, хорошо согласовался с данными *in situ* эллипсометрии для образцов, выращенных МПЭ. При этом спектры ОП образцов, выращенных МПЭ, имели более резкий край пропускания, чем спектры образцов, выращенных ЖФЭ, но менее резкий, чем спектры для монокристаллов. Спектры ФЛ МПЭ образцов КРТ малого состава ($x \approx 0.3$) при $T=4.2$ К состояли из одиночного пика с полушириной $\sim 6-9$ мэВ. Для большого состава ($x \approx 0.7$) характерные полуширины краевого пика составили $\sim 17-27$ мэВ, при этом наблюдалась низкоэнергетическая полоса с глубиной залегания $\sim 15-20$ мэВ, свидетельствующая о присутствии мелких акцепторных состояний. Образцы, выращенные МПЭ, независимо от состава, обладали характерными температурными зависимостями краевого пика ФЛ: при низких температурах экспериментальные значения лежали ниже расчетной

ширины запрещенной зоны, разница достигала ~ 50 мэВ при $T=4.2$ К. При повышении температуры экспериментальные данные приближались к расчетным значениям. Для образцов состава $x \approx 0.7$ на температурной зависимости имелся характерный минимум на ~ 50 К.

Таким образом, в образцах $\text{Hg}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$, выращенных МПЭ, было обнаружено разупорядочение твердого раствора, отражавшееся в положении пиков ФЛ, а также в ходе их температурной зависимости. При этом структурные и микроскопические исследования выявили высокое качество материала, так что явление разупорядочения, обнаруженное с помощью оптических методов, не было напрямую подтверждено этими измерениями. В работе будет обсуждена причина рассогласования результатов ФЛ с данными структурных и микроскопических исследований и пути оптимизации технологического процесса выращивания $\text{Hg}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$.

Структура и рекомбинационные свойства двойниковых границ в к-фазе оксида галлия

Вывенко О. Ф.¹, Бондаренко А.С.¹, Убийвовк Е.В.¹, Шапенков С.В.^{1,2}, Николаев В.И.², Степанов С. И.², Печников А. И.², Чикиряка А. В.², Щеглов М. П.²

¹СПбГУ, ²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: vyvenko@gmail.com

В последние годы оксид галлия приобрел стремительно возрастающий интерес в связи с перспективами его широких применений в силовой и высоковольтной электронике, а также в оптоэлектронике, в частности, для создания фотоприемников «слепых» для солнечного излучения. Указанные приложения базируются на уникальных свойствах этого полупроводникового соединения: большой величине запрещенной зоны и высокой оптической прозрачности вплоть до длин волн около 250 нм, возможности вариации электронной проводимости в широких пределах, высоким напряжением пробоя и сравнительно низкой стоимостью получения кристаллов и эпитаксиальных слоев [1].

Оксид галлия может кристаллизоваться в 5 полиморфных модификациях. На сегодняшний день большинство исследований по данному материалу выполнено на моноклинном бета-Ga₂O₃ вследствие его термической стабильности и возможности получения больших монокристаллов. Однако низкая симметрия моноклинной решетки бета-фазы трудно совместима с индустриально доступными подложками и склонность к растрескиванию по плоскостям спайности сдерживает ее использование в приложениях. Другие полиморфы - альфа- и к(эпсилон)-фазы являются метастабильными, которые переходят в бета-фазу при высоких температурах, но по симметрии и параметрам решетки эпитаксиально совместимы с распространенными полупроводниковыми подложками. Так к(эпсилон)-фаза хорошо сопрягается с тринитридами и карбидом кремния, а ее важным отличительным свойством является ее рекордно высокая спонтанная поляризация, открывающая возможность создания квантовых ям с рекордно высокой двумерной плотностью электронов.

К-фаза согласно последним данным просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [3] является орторомбической ($Pna2_1$), а получаемые ее слои состоят из совокупности поворотных доменов [3,4], которые в совокупности формируют псевдогексагональную структуру. Атомная структура границ доменов и других дефектов кристаллического строения, как и характер и степень их влияния на электронные свойства материала остаются пока практически неизученными.

В настоящей работе впервые представлены результаты детального изучения атомной структуры и люминесцентных свойств указанных дефектов кристаллического строения в ориентированных одиночных микромонокристаллах к-фазы оксида галлия, выращенных на ориентирующую подложку из нитрида галлия. Детальное описание метода их выращивания, данные рентгеноструктурного анализа и исследования люминесцентных свойств на макроуровне можно найти в работе [2]. Образцами служили тонкие фольги, изготовленные из микрокристаллов к-оксида галлия фокусированным ионным пучком, которые исследовались методами ПЭМ высокого разрешения, дифракции обратно-отраженных и проходящих электронов, а также и катодоллюминесценции в сканирующем электронном микроскопе.

Основными полученными результатами являются:

Доменные границы не являются атомно идеально гладкими и прямолинейными в теоретически ожидаемом направлении $\{130\}$, а имеют зигзагообразную конфигурацию, составленную из многочисленных коротких прямолинейных участков, преимущественно параллельных плоскостям антифазных границ $\{100\}$.

Атомная структура самих доменных областей также неидельна, а состоит из совокупности близко расположенных антифазных границ, вытянутых для каждого из доменов в своем направлении.

Интенсивность люминесценции вблизи доменных и антифазных границ понижена, что свидетельствует об их повышенной рекомбинационной активности.

Подробное обсуждение многочисленных полученных результатов будет представлено на конференции.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00202, <https://rscf.ru/project/23-23-00202>.

Список литературы

1. Stepanov V. et al Reviews on advanced materials science 44, 63–86, 2016
2. Shapenkov, S., et al Phys. Status Solidi B 2100331, 2021
3. Cora I., et al, CrystEngComm, 19, 1509, 2017.

Сравнительные исследования свойств толстых слоёв GaN с различным типом кристаллической структуры, выращенных на керамической подложке

Мынбаева М. Г.¹, Смирнов А.Н.¹, Лаврентьев А.А.¹, Давыдов В.Ю.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: mgm@mail.ioffe.ru

Нитрид галлия (GaN) и твёрдые растворы на его основе играют важную роль в различных приложениях силовой электроники и фотоники. Ввиду отсутствия собственных подложек GaN приборы на его основе изготавливаются, в основном, методами гетеро-эпитаксиального роста. Это является причиной того, что приборные характеристики получаемых устройств оказываются намного ниже, чем их теоретические пределы. В настоящее время хлоридгидридная гетероэпитаксия (ХГЭ) и аммоно-термальным методом рассматриваются в качестве основных технологий, способных в перспективе обеспечить возможность массового производства подложек GaN. Однако эти методы имеют ряд существенных ограничений. В частности, при выращивании монокристаллов GaN толщиной порядка 400 микрон длительность процесса аммонотермального роста составляет 27 дней [1]. В методе ХГЭ, обеспечивающем более высокие скорости роста (до 100 мкм/ч), нерешённой остаётся проблема растрескивания толстых слоёв GaN при росте на больших площадях, например, на 2-х дюймовых пластинах из сапфира, вследствие несоответствия коэффициентов температурного расширения. В настоящее время помимо реализации традиционных методов ведётся поиск альтернативных возможностей получения подложечного материала для повышения качества нитридной эпитаксии. Так, вопреки сложившимся представлениям о том, что только монокристаллический материал может служить подложкой для роста GaN, показано, что нитридные слои приборного качества могут быть выращены на пластинах из поликристаллического алмаза или на композитных подложках на его основе, а также на подложках из керамики [2, 3]. Ранее мы сообщали о том, что на основе керамических подложек из нитрида бора могут быть получены свободно отделяющиеся пластины квазиобъёмного GaN большой площади с различным типом кристаллической структуры. Было установлено, что теплофизические, механические и оптические свойства материала соответствуют свойствам GaN, получаемого традиционными методами эпитаксиального и объёмного роста. В настоящей работе приводятся результаты сравнительного исследования электрических свойств полученного материала с различными типами кристаллической структуры. Концентрация свободных носителей заряда оценивалась методом микрорамановской спектроскопии по положению связанных плазмон-LO-фононных мод. Согласно выполненным оценкам, концентрация свободных электронов варьируется в пределах $10^{17} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$ в зависимости от типа структуры выращенных образцов. С учётом данных структурной характеристики и исследований примесного состава образцов были сделаны следующие выводы: увеличение концентрации свободных носителей в квазиобъёмном GaN определяется уровнем концентрации примеси кислорода. Концентрация внедрённых примесей зависит от кристаллографической ориентации полученных образцов. Отметим, что эти результаты и выводы находятся в согласии с данными изучения ориентационной зависимости внедрения примесей в объёмных кристаллах GaN, полученных аммоно-термальным методом [1].

Работа выполнена в рамках Гос. заданий ФТИ им. А. Ф. Иоффе (0040-2019-0014 и 0040-2019-0006)

Список литературы

1. Lei X., Study of lateral growth regions in ammonothermal c-plane GaN, *J. Cryst. Growth*, 556, 125987, 2021.
2. Cho J., Improved thermal interfaces of GaN–diamond composite substrates for HEMT applications, *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 3, 79–85, 2013.
3. Tsai, M.L., High-voltage thin-film GaN LEDs fabricated on ceramic substrates: the alleviated droop effect, *Optics Express*, 21, 27102–27110, 2013.

Оценка влияния электронного и протонного облучений на параметры высоковольтных SiC диодов Шоттки

Кузьмин Р. А.¹, А. А. Лебедев¹, В. В. Козловский², М. Е. Левинштейн¹

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе

²СПбПУ

e-mail: kuzminra@mail.ioffe.ru

Все более активное использование устройств карбид-кремниевой силовой электроники в технических комплексах становится одной из ведущих тенденций во многих отраслях промышленности. Высоковольтные 4H-SiC диоды Шоттки интенсивно внедряются в ракетно-космической, ядерной и автомобильной промышленности, где требуются высокотемпературные и радиационно-стабильные устройства [1-5].

На основе работ [6-14], описывающих влияние облучения электронами на параметры 4H-SiC диодов Шоттки, и работ [15-19], в которых исследовано влияние облучения протонами, было проведено изучение характеристик диодов Шоттки при различных температурах, дозах облучения и параметрах отжига. Кроме этого, исследованы вольт-амперные зависимости и DLTS-спектры рассматриваемых диодов Шоттки при электронном облучении.

В настоящей работе анализировались структуры, широко используемые в промышленности: высоковольтные 4H-SiC JBS-структуры производства Wolfspread/CREE: CPW3-1700-S010B-WP (блокирующее напряжение $U_b = 1700$ В) и GW3-S06010 ($U_b = 600$ В). Исследовалось влияние протонного (энергия 15 МэВ), и электронного (энергией 0,9 МэВ) облучения. Исходные параметры образцов: диоды с n-базой, с повторяющимся импульсным обратным напряжением $U_b = 1700$ В с заявленной (начальной) концентрацией некомпенсированной примеси $(N_d - N_a) = 3,4 \times 10^{15}$ см⁻³; и $(N_d - N_a) = 10^{16}$ см⁻³ для диодов с $U_b = 600$ В [20,21]. Оптимальные (базовые) параметры отжига облученных структур установлены экспериментально: отжиг проводился при температуре 200-300 °С в течение 60 минут в атмосфере сухого азота.

На основе экспериментов выяснено, что при протонном облучении, можно увеличить радиационную стойкость 4H-SiC JBS-приборов при повышении температуры облучения. При относительно малых флюенсах Φ (3×10^{13} см⁻² для приборов с $U_b = 1700$ В и 5×10^{13} см⁻² для диодов с $U_b = 600$ В) даже относительно «щадящий» отжиг при температуре 300 °С (в 1,7 раза большей предельной рабочей температуры диодов) после облучения позволяет существенно уменьшить дифференциальное сопротивление базы диодов R_d . Если значения флюенса Φ относительно большие, выше или даже немного ниже $\Phi_0 = 6 \times 10^{13}$ см⁻² (когда концентрация электронов в базе диода формально равна нулю), то отжиг практически не оказывает влияния.

Электронное облучение с флюенсом $\Phi = 1 \times 10^{16}$ см⁻², которое приводит к значительному изменению сопротивления базы при комнатной температуре, почти не оказывает влияния на сопротивление базы при облучении тем же флюенсом при максимальной рабочей температуре (175 °С). Однако, измерения DLTS-спектров показывают значительный рост максимумов пиков дефектов, соответствующих акцепторным центрам, введенным облучением. Было установлено, что в случае, когда наиболее важна радиационная стабильность приборов,

увеличение температуры во время облучения до относительно невысокой температуры (ниже предельной рабочей), может существенно повысить радиационную стойкость приборов.

Для подтверждения достоверности результатов исследования необходимо более узконаправленно изучить характеристики энергетических уровней внутри материала, которые могут влиять на его электрические свойства, а также природу радиационных комплексов, которые возникают при облучениях с высокими значениями флюенса.

Список литературы

1. R. Singh, Reliability and performance limitations in SiC power devices, *Microelectron. Rel.*, **46**(5–6), 713–730 (2006)
2. Q. Zhang, R. Callanan, M.K. Das, S. Ryu, A.K. Agarwal and J.W. Palmour. SiC Power Devices for Microgrids, *IEEE Trans. on Power Electron.*, **25**(12), 2889–2896 (2010)
3. Q. Xun, B. Xun, Z. Li, P. Wang, Z. Cai, Application of SiC power electronic devices in secondary power source for aircraft, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **70**, 1336–1342 (2017).
4. B. J. Baliga, Silicon Carbide Power Devices: A 35 Year Journey from Conception to Commercialization, **2018** 76th Device Research Conference (DRC), Santa Barbara (2018), doi:10.1109/drc.2018.8442172.
5. Лебедев А.А., Иванов П.А., Левинштейн М.Е., Мохов Е.Н., Нагалюк С.С., Анисимов А.Н., Баранов П.Г. «Электроника на основе SiC» УФН 189(8), 803–848 (2019)
6. Vobecký, J.; Hazdra, P.; Popelka, S.; Sharma, R.K. Impact of Electron Irradiation on the ON-State Characteristics of a 4H–SiC JBS Diode. *IEEE Trans. Electron Dev.* **2015**, *62*, 1964 – 1969
7. E. Omotoso, W.E. Meyer, F.D. Auret, A.T. Paradzah, M. Diale, S.M.M. Coelho, P.J. Janse van Rensburg “The influence of high energy electron irradiation on the Schottky barrier height and the Richardson constant of Ni/4H–SiC Schottky diodes” *Materials Science in Semiconductor Processing* **39**, 112–118 (2015)
8. V. V. Kozlovski, A. A. Lebedev, M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, J. W. Palmour “Impact of high energy electron irradiation on high voltage Ni/4H–SiC Schottky diodes” *Appl. Phys. Lett.* **110**, 083503 (2017)
9. A. M. Strel’chuk, V. V. Kozlovski, A. A. Lebedev. “Radiation-Induced Damage of Silicon-Carbide Diodes by High-Energy Particles”, *Semiconductors* **52**, 1758–1762 (2018)
10. Heyi Li, Chaoming Liu, Yanqing Zhang, Chunhua Qi, Yidan Wei, Jiaming Zhou, Tianqi Wang, Guoliang Ma, Zujun Wang, Shangli Dong, and Mingxue Huo “Irradiation effect of primary knock-on atoms on conductivity compensation in N-type 4H–SiC Schottky diode under various irradiations” *Semicond. Sci. Technol.* **34** (2019) 095010
11. A A Lebedev, V V Kozlovski, M E Levinshtein, A E Ivanov, K S Davydovskaya, V S Yuferev, A V Zubov “Impact of high temperature electron irradiation on characteristics of power SiC Schottky diodes.” *Radiation Physics and Chemistry* 185, 109514 (2021)
12. A. Castaldini, A. Cavallini, L. Rigutti, and F. Nava “Low temperature annealing of electron irradiation induced defects in 4H–SiC” *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3780 (2004)
13. Hazdra, P.; Vobecký, Jan. “Radiation Defects Created in n-Type 4H–SiC by Electron Irradiation in the Energy Range of 1–10 MeV”. *Phys. Status Solidi A.* **2019**, *216*, 1900312.
14. Lebedev, A.A., Kozlovski, V.V., Levinshtein, M.E. *et al.* Annealing High-Voltage 4H–SiC Schottky Diodes Irradiated with Electrons at a High Temperature. *Semiconductors* **56**, 189–194 (2022). <https://doi.org/10.1134/S1063782622020099>
15. Sh. Ji, Zh. Zhang, Fei Wang. *CES Trqans. on Electic. Machines and Systems* **1**, 254 – 264 (2017)
16. [https://www.researchgate.net/deref/%23L.F.Zakharenkov,V.V.Kozlovski,B.A.Shustrov.Phys.Stat.Sol.A.,117,85\(1990\)](https://www.researchgate.net/deref/%23L.F.Zakharenkov,V.V.Kozlovski,B.A.Shustrov.Phys.Stat.Sol.A.,117,85(1990))
17. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Matter*. Pergamon Press, New York; 1985
18. P. Hazdra, J. Vobecký. *Phys. Stat. Solidi A* **216**, 1900312 (2019)
19. A. A. Lebedev, V. V. Kozlovski, K. S. Davydovskaya, M. E. Levinshtein *Materials* **14**, 4976 (2021) <https://doi.org/10.3390/ma14174976>
20. <https://datasheetspdf.com/datasheet/CPW3-0600S002>
21. <https://datasheetspdf.com/datasheet/CPW3-1700S010>

Теоретический и экспериментальный анализ энергии активационных носителей заряда в монокристаллическом алмазе *p*-типа

Соломникова А. В., Р.А. Двоглазов, Н.Н. Жогаль, В.И. Зубков
СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: zubann@yandex.ru

Разрабатываемые приборы высокочастотной и нанoeлектроники на монокристаллическом легированном бором алмазе будут иметь существенно улучшенные параметры (широкая область рабочих температур, высокие значения пробивных напряжений, радиационная стойкость, сверхвысокие рабочие частоты и т.п.), чем приборы на традиционных полупроводниках (кремний, GaAs и др.). Однако степень ионизации примеси бора в алмазе при комнатной температуре составляет менее 1%, что означает, что для создания полупроводниковых слоев с приемлемой концентрацией носителей заряда (10^{16} – 10^{17} см⁻³) в алмазе необходимо повышать на несколько порядков концентрацию вводимых примесных атомов по сравнению со стандартными кремниевыми или арсенидгаллиевыми приборами. Это вызывает ряд специфических особенностей технологии алмаза [1] и затрудняет применение стандартных подходов к диагностике его электрофизических свойств. В данной работе впервые детально теоретически и экспериментально исследованы особенности сильнолегированного монокристаллического алмаза: высокотемпературная прыжковая проводимость по примесной зоне и катастрофическое уменьшение энергии активации носителей заряда с примесного центра бора E_a при увеличении степени легирования.

В работе изучался набор многосекторных пластин, вырезанных из монокристаллов алмаза, выращенных методом HPHT. Легирование бором проводилось непосредственно в процессе роста в камере высокого давления. Для проведения электрических измерений на образцах формировались платиновые омические и шоттковские контакты в вертикальной геометрии. Исследования образцов проводились с помощью автоматизированного комплекса спектроскопии адмиттанса, включающего криогенную зондовую станцию Janis CCR-10 и измеритель иммитанса Agilent E4980A. Измерения ВАХ, ВФХ, частотных и температурных спектров проводимости, а также сопротивления на постоянном токе образцов проводились в диапазоне температур 22–475 К и частот тестового сигнала 1–1000 кГц. В теоретической части работы аналитически и численно исследуется эффект уменьшения термической энергии ионизации примеси бора при увеличении степени легирования, обсуждаются причины этого явления. Рассчитывается зависимость E_a акцептора бора от его концентрации при умеренной степени компенсации $K < 0.5$ по аналогии с подходом, описанным в [2]; полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными.

Расчет параметров прыжковой проводимости для сильнолегированного алмаза с концентрацией бора $> 10^{18}$ см⁻³ выполнен для моделей с переменной длиной прыжка Мотта и Эфроса-Шкловского [3]. Механизм возникновения прыжковой проводимости, ее энергетические и динамические характеристики (скорость эмиссии носителей заряда при различных температурах, сечение захвата носителей заряда на примесный центр) изучены динамическими методами адмиттансной спектроскопии, что существенно расширяет объем и качество получаемой информации, в отличие от традиционных измерений проводимости или сопротивления в алмазе методом Холла на постоянном токе.

Список литературы

1. В.И. Зубков, А.В. Соломникова, А.В. Соломонов, А.В. Колядин, J.E. Butler. Журнал технической физики, т. 93, в. 1, 5-28 (2023).
2. Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Н. Дервяго. Журнал Белорусского госуниверситета. Физика, 2, 28-41 (2020).
3. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. –М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1979..

Дефекты с глубокими уровнями в высоковольтных плавных p-i-n гетеропереходах AlGaAsSb/GaAs

Солдатенков Ф. Ю.¹, Соболев М.М.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *f.soldatenkov@mail.ioffe.ru*

Главные тенденции развития современной силовой электроники и импульсной техники – повышение рабочих частот повторения импульсов и рабочих температур, а также радиационной стойкости полупроводниковых приборов, для получения которых требуется освоение более широкозонных, по сравнению с кремнием, полупроводниковых материалов. Применение GaAs и его более широкозонных твердых растворов AlGaAs позволяет изготавливать приборы, способные работать при температурах до 250°C, и выше. В настоящее время для изготовления высоковольтных (сотни вольт) p-i-n-структур на основе GaAs и его твердых растворов в основном используется метод жидкофазной эпитаксии с контролируемым распределением фоновых остаточных примесей и собственных дефектов с глубокими уровнями [1,2]. Ранее нами [1] были опубликованы результаты изучения высоковольтных слаболегированных плавных p^0-i-n^0 -переходов $Al_xGa_{1-x}As$, сохраняющих выпрямляющие свойства до 320°C, и выше. В них было обнаружено существенное, до 6 раз, увеличение эффективного времени жизни неосновных носителей заряда в базовых слоях диодов в диапазоне температур 300-600 К. Было выяснено с помощью метода DLTS, что термический захват дырок на уровень DX^- определяет время релаксации неравновесных носителей в $Al_xGa_{1-x}As$ базовых слоях, а также его температурную зависимость.

В данной работе приведены исследования по повышению быстродействия структур на основе AlGaAs с помощью введения сурьмы в базовые слои диода, за счет контролируемого образования собственных структурных дефектов (центров рекомбинации) при выращивании эпитаксиальных слоев с заданным рассогласованием по параметру решетки гетероструктур. Такой прием был нами успешно реализован ранее в системах GaAsSb/GaAs и InGaAs/GaAs [2]. Одним из результатов создания плавных p^0-i-n^0 -переходов $Al_xGa_{1-x}AsSb_{1-y}$ в данной работе стало существенное, почти на порядок, уменьшение времени обратного восстановления высоковольтных диодов на их основе – от 30-50 нс для диодов с базовыми слоями AlGaAs до 5-8 нс для AlGaAsSb структур с контролируемым содержанием в них дислокаций несоответствия. В работе представлены результаты экспериментальных исследований вольт-фарадных характеристик и спектров нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) $Al_xGa_{1-x}AsSb_{1-y}/GaAs$ гетероструктур с дислокациями несоответствия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00245, <https://rscf.ru/project/23-29-00245/>.

Список литературы

1. M. M. Sobolev, F. Y. Soldatenkov, and V. G. Danil'chenko. Deep-level defects in high-voltage AlGaAs p-i-n diodes and the effect of these defects on the temperature dependence of the minority carrier lifetime. *Journal of Applied Physics*, v. 128, p. 095705 (2020).
2. M. M. Sobolev, F. Yu. Soldatenkov, and I. L. Shul'pina. Misfit dislocation-related deep levels in InGaAs/GaAs and GaAsSb/GaAs p-i-n heterostructures and the effect of these on the relaxation time of nonequilibrium carriers. *Journal*

of Applied Physics, v. 123, p. 161588 (2018).

Влияние прямой ионно-лучевой литографии в диапазоне энергий ионов 12-30 кэВ на фотолюминесценцию гетероструктуры $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}/\text{GaAs}$.

Григоренко И. Н.^{1,2}, Митрофанов М.И.^{2,3}, Лиля А.С.¹, Шальгин В.А.¹, Николаев Д.Н.², Вознюк Г.В.^{1,2}, Евтихийев В.П.^{1,2}

¹ИТМО

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³НТЦ микроэлектроники РАН

e-mail: ingrigorenko@itmo.ru

Введение. Основными областями применения метода прямой литографии сфокусированным ионным пучком (СИП) являются подготовка образцов для просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [1], локальный анализ, травление и напыление материалов [2], а также изготовление зондов для атомно-силовой микроскопии АСМ [3], при изготовлении элементов нанопотоники. [4,5]. Метод позволяет осуществлять безмасочную литографию с субмикронным разрешением [4,5]. Недостатком метода является то, что в процессе литографии образуются радиационные дефекты, являющиеся центрами безызлучательной рекомбинации, которые приводят к тушению люминесценции. В работе [6] показано, что термический отжиг даёт возможность значительно снизить количество радиационных дефектов и практически полностью восстановить люминесцентные свойства светоизлучающих гетероструктур. В тоже время зависимость квантового выхода фотолюминесценции от энергии ионов при литографии СИП мало изучена. В настоящей работе приведены результаты влияния энергии ионов в диапазоне 12-30 кэВ на глубину формирования радиационных дефектов при травлении двойной гетероструктуры $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}/\text{GaAs}$.

Основная часть. В качестве объекта для исследования была выбрана двойная гетероструктура $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}/\text{GaAs}$ с толщинами слоев по 1 мкм каждый. Для оценки влияния энергии ионов на скорость травления гетероструктуры был сформирован массив квадратных отверстий с различными глубинами с энергиями ионов Ga 12-30 кэВ. Сравнение зависимостей глубин отверстий, вытравленных при разных энергиях, от ионной дозы показала, что изменение энергии ионов в диапазоне 15-30 кэВ не приводит к изменению глубины вытравленных отверстий, а энергия ионов 12 кэВ приводит к уменьшению глубины ~ в 1.15 раза и как следствие приводит к снижению скорости травления. Результаты моделирования зависимости коэффициента распыления от энергии ионов в программе SRIM подтверждают экспериментальные результаты. Показано что, зависимость коэффициента распыления слоя $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}$ от энергии ионов Ga^+ приходит в насыщение при энергии ионов более 15 кэВ. Для оценки концентрации и глубины распространения радиационных дефектов использовался метод фотолюминесцентной спектроскопии с подбарьерным возбуждением ($\lambda = 808$ нм). Плотность мощности фотовозбуждения составляла 1.5 кВт/см², диаметр лазерного пучка составлял 80 мкм. Был сформирован набор квадратных отверстий с энергиями ионов 15-30 кэВ. Глубина отверстий составляла 100 нм, ионная доза 10^{17} см⁻². После травления образец отжигался в вакуумной камере при давлении 10^{-5} Па в течение 20 минут при температуре 300 °С. Такой режим отжига позволил удалить аморфизированный поверхностный слой без восстановления радиационных дефектов. Величина сигнала фотолюминесценции с травлёных областей при энергии 15 кэВ в 3 раза больше чем при 30 кэВ. Полученные результаты подтверждаются модельным расчётом в

программе SRIM. Показано, что концентрация и глубина распространения дефектов возрастает с увеличением энергии ионов. Однако глубина распространения дефектов, полученная в SRIM, различается с экспериментальными данными более чем в 10 раз, что связано с ограничениями программного пакета SRIM.

Выводы. Результаты исследования показали, что скорость травления слоев $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}$ практически не зависит от энергии ионов в сфокусированном ионном пучке в диапазоне энергий 15–30 кэВ. При этом глубина формирования радиационных дефектов резко возрастает с ростом энергии ионов Ga^+ . Обнаружено, что при травлении СИП с энергиями ионов более 15 кэВ глубина формирования радиационных дефектов превышает 900 нм, что не соответствует расчетам в программе SRIM. При проведении прямой ионно-лучевой литографии сфокусированным ионным пучком Ga^+ на светоизлучающих структурах целесообразно использовать энергии ионов <15 кэВ, в отличие от традиционно применяемых 20–30 кэВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 21-12-00304, <https://rscf.ru/project/21-12-00304/>

Список литературы

1. Mayer J., Giannuzzi L.A., Kamino T., Michael J., TEM Sample Preparation and FIB-Induced Damage, MRS Bulletin, №32, P. 400 – 407, 2007.
2. Li P., Chen S., Dai H., Yang Z., Chen Z., Wang Y., Chen Y., Shan W., Peng W., Duan H., Recent advances in focused ion beam nanofabrication for nanostructures and devices: fundamentals and applications, Nanoscale, №13, P. 1529 – 1565, 2021.
3. Machalett F., Seidel P., Focused Ion Beams and Some Selected Applications, Digital Encyclopedia of Applied Physics, 2019.
4. Holguin-Lerma J.A., Ng T.K., Ooi B.S., Narrow-line InGaN/GaN green laser diode with high-order distributed-feedback surface grating, Appl. Phys. Express, №12, P. 042007, 2019.
5. Yoshida M., Zoysa M.D., Ishizaki K., Kunishi W., Inque T., Izumi K., Hatsuda R., Noda S., Photonic-crystal lasers with high-quality narrow-divergence symmetric beams and their application to LiDAR, J. Phys. Photonics, №3, P. 022006, 2021.
6. Voznyuk G. V., Grigorenko I. N., Mitrofanov M. I., Nikolaev D. N., Mizerov M. N., Evtikhiev V. P., Photoluminescence Study of AlGaAs/GaAs after Focused Ion Beam Milling, Semiconductors, №54(14), P. 1869-1872, 2020.

Дефектная структура приповерхностного слоя бета-оксида галлия, подвергнутого отжигу и травлению

Шарков М. Д.¹, Бойко М.Е.¹, Бутенко П.Н.¹, Заричный А.А.¹, Крымов В.М.¹, Николаев В.И.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *mischar@mail.ru*

Серия образцов-пластин бета-оксида галлия β -Ga₂O₃, выращенных методом прикраевого роста с подпиткой (Edge-Defined Film-Fed Growth, EFG) и ориентированных по плоскости ($\bar{2}01$), последовательно подвергнута процедурам отжига и химического травления. Отжиг проводился при температуре около 1400 К, травление осуществлялось 85%-ной ортофосфорной кислотой H₃PO₄ при температуре около 500 К.

Исследованы ямки травления тетраэдрической формы, сформировавшиеся на поверхности образцов в результате применения перечисленных методов воздействия. Определены наиболее вероятные варианты кристаллографической ориентации граней ямок травления. На основании гипотезы о соответствии между ямками травления и выходами краевых дислокаций оценена плотность дислокаций в обработанных образцах.

Методами рентгеновской дифрактометрии получены оценки размеров доменов и микродеформаций в направлении $[\bar{2}01]$ β -Ga₂O₃, а также характерный разброс доменов по ориентации нормали вокруг направления $[\bar{2}01]$ β -Ga₂O₃. На основании совокупности полученных результатов оценены размеры доменов в обработанных образцах как в латеральных, так и в нормальном направлении.

Исследование природы примесной ИК люминесценции β -Ga₂O₃

Давыдов В. Ю.¹, Смирнов А. Н.¹, Елисеев И. А.¹, Китаев Ю. Э.¹, Шарофидинов Ш. Ш.¹, Лебедев А. А.¹, Панов Д. Ю.², Спиридонов В. А.², Бауман Д. А.², Романов А. Е.^{1,2}, Козловский В. В.³

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Университет ИТМО

³СПбПУ

e-mail: valery.davydov@mail.ioffe.ru

Политип β -Ga₂O₃ привлекает большое внимание в связи с возможностями его использования в детекторах УФ-излучения, газовых сенсорах при высоких температурах, нанофотонных переключателях и т.д. Изучение природы примесных центров в этом материале является крайне актуальным.

В спектре фотолюминесценции (ФЛ) β -Ga₂O₃:Cr при T=80K в ближнем ИК диапазоне наблюдается широкая полоса с максимумом около 1,75 эВ (710 нм) и двумя резкими пиками. Эти особенности приписываются $^4T_2 \rightarrow ^4A_2$ и $^2E \rightarrow ^4A_2$ переходам в ионе Cr³⁺ для широкой полосы и узких пиков соответственно [1-4]. В литературе за узкими пиками закрепилось обозначение R₁ (1.78 эВ) и R₂ (1.80 эВ) линий. В то же время в работе [5], на основании ФЛ исследований β -Ga₂O₃:Fe, R_{1,2} линии были приписаны внутрицентровым переходам $^4T_1 \rightarrow ^6A_1$ в ионе Fe³⁺. Цель настоящей работы состояла в изучении причин возникшего противоречия.

Исследовались исходно нелегированные и легированные хромом объемные кристаллы β -Ga₂O₃, выращенные методами Чохральского и Степанова в ИТМО; легированный железом объемный кристалл β -Ga₂O₃, выращенный в Kuma Technologies, Japan; а также нелегированные и легированные Cr эпитаксиальные слои a -Ga₂O₃, выращенные на подложке Al₂O₃(0001) методом хлорид-гидридной эпитаксии в ФТИ им А.Ф. Иоффе. Спектры ФЛ в диапазоне температур (80-300K) были измерены с использованием диапазона энергий возбуждающего излучения 2.33 – 5.82 эВ.

Анализ низкотемпературных ИК спектров ФЛ образцов β -Ga₂O₃:Cr и β -Ga₂O₃:Fe выявил их абсолютную идентичность. Энергетическое расстояние между линиями R₁ и R₂ в этих образцах - 18.5 мэВ (~149 см⁻¹), что намного больше расстояния 3.65 мэВ (~30 см⁻¹) между линиями R_{1,2}, связанными с переходами в Cr³⁺ в a -Ga₂O₃:Cr. Как эксперимент, так и теоретические расчеты указывают на то, что Cr³⁺ и Fe³⁺ в β -Ga₂O₃ предпочитают встраиваться в октаэдрически координированный узел Ga_{II} [6,7]. Можно предположить, что увеличение энергетического расстояния между линиями R_{1,2} в моноклинном β -Ga₂O₃ по сравнению с их расстоянием в спектре гексагонального a -Ga₂O₃ возникает вследствие изменения величины локального кристаллического поля. Однако в работе [8] утверждается, что для Cr³⁺ и Fe³⁺ только энергии переходов $^4A_2 \rightarrow ^4T_1$ и $^4A_2 \rightarrow ^4T_2$ существенно зависят от величины локального кристаллического поля, в то время как энергия перехода $^2E \rightarrow ^4A_2$ не зависит от этого параметра. Анализ температурной зависимости отношения интенсивностей изучаемых линий $k=I_{R1}/I_{R2}$ для a -Ga₂O₃:Cr выявил, что $k>1$ во всем температурном диапазоне 80-300 К. Это

согласуется со схемой перехода ${}^2E \rightarrow {}^4A_2$, где R_2 линия возникает при переходе с верхнего, менее заселенного уровня E , на нижний уровень A_2 . Однако для образцов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Cr}$ и $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Fe}$ условие $k > 1$ имеет место только при $T = 80\text{K}$, в то время как для $T = 300\text{K}$ параметр $k < 1$. Такое температурное поведение линий $R_{1,2}$ не согласуется со схемами перехода ${}^2E \rightarrow {}^4A_2$ для $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Cr}^{3+}$ и ${}^4T_1 \rightarrow {}^6A_1$ для $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Fe}^{3+}$ в которых R_2 линия возникает при переходе с верхнего, менее заселенного уровня $E(T_1)$, на нижний уровень $A_2(A_1)$. Малая ширина линий R_1 и R_2 в $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (их $\text{FWHM}_{R1,R2} \sim 0.6\text{-}0.7$ мэВ при $T = 80\text{K}$), которая слабо изменяется с повышением температуры, согласуется с природой внутрицентровых переходов. Однако для $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Fe}$ только линия R_1 имеет малую ширину $\text{FWHM}_{R1} \sim 0.8$ мэВ при $T = 80\text{K}$, в то время как $\text{FWHM}_{R2} \sim 2.7$ мэВ. Более того, ширина обеих линий сильно увеличивается с повышением температуры.

Изложенные выше данные свидетельствуют о необходимости дальнейшего изучения природы линий $R_{1,2}$ в спектрах ФЛ $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. В этом направлении нами были предприняты исследования ФЛ в нелегированном $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ облученном протонами с энергией 15 МэВ дозой $1.0 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, а также выполнены измерения угловой зависимости интенсивности линий $R_{1,2}$ в этом образце и образцах $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Cr}$, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Fe}$ и $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{:Cr}$. Полученные результаты требуют дальнейшего теоретического анализа.

Исследования поддержаны Российским научным фондом (проект № 22-12-00003) и Министерством науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-1349).

Список литературы

1. Y. Tokuda Y.; Adachi S. Photoluminescence spectroscopy and energy-level analysis of metal-organic-deposited $\text{Ga}_2\text{O}_3\text{:Cr}^{3+}$ films. *J. Appl. Phys.* vol. 112, 063522, 2012.
2. Luchechko A.; Vasyltsiv V.; Zhydachevskyy Ya. *et al.* Luminescence spectroscopy of Cr^{3+} ions in bulk single crystalline $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 53, 354001, 2020.
3. Naresh-Kumar G.; MacIntyre H.; Subashchandran S. *et al.* Origin of red emission in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ analyzed by cathodoluminescence and photoluminescence spectroscopy. *Phys. Status Solidi B.*, vol. 258, 2000465, 2021.
4. Remple C.; Huso J.; McCluskey M.D. *et al.* Photoluminescence and Raman mapping of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. *AIP Advances*, vol. 11, 105006, 2021.
5. Polyakov A.Y.; N. B. Smirnov N.B.; Schemerov I.V. *et al.* Electrical Properties, Deep Levels and Luminescence Related to Fe in Bulk Semi-Insulating $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ Doped with Fe. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* vol. 8, Q3091, 2019.
6. Ingebrigtsen M.E.; Varley J.B.; Kuznetsov A.Yu. *et al.* Iron and intrinsic deep level states in Ga_2O_3 . *Appl. Phys. Lett.*, vol. 112, 042104, 2018.
7. Tippins H.H. Optical and Microwave Properties of Trivalent Chromium in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. *Phys.Rev.*, vol. 137, A865, (1965).
8. Sun R.; Ooi Y.K.; Dickens P.T. *et al.*, On the origin of red luminescence from iron-doped $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ bulk crystals. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 117, 052101, 2020.

Анализ структурного состава пленки карбида кремния, полученной методом HT CVD

Шишкин И. А.¹, Шишкина Д.А., Нефедов С.А., Лебедев Д.М., Чепурнов В.И., Артемьев Д.Н.

¹Самарский университет

e-mail: *shishkinivan9@gmail.com*

В большинстве полупроводниковых приложений сегодня используются устройства на основе кремния. Однако кремний имеет много ограничений из-за своих физических свойств: кремний ограничен максимальной рабочей температурой 150 °С и не выдерживает очень высоких напряжений. Следовательно, SiC может быть лучшим выбором благодаря своим превосходным физическим и электрическим свойствам, что делает его очень перспективным для следующего поколения полупроводников для экстремальных условий, где их применение в современной электротехнике имеет важное значение. SiC обладает многими замечательными свойствами, которые делают его очень перспективным полупроводниковым материалом. Некоторые из потенциальных применений карбида кремния относятся к высокотемпературным, высокочастотным и мощным электронным устройствам. Другие используют широкую запрещенную зону: детекторы УФ-излучения и даже лазеры синего света. Светоизлучающие диоды (СИД) уже несколько лет находятся в коммерческом производстве. Также некоторые другие электронные устройства могут стать коммерческими в ближайшем будущем. [1-7]

Существующие методы изготовления пленок карбида кремния не всегда позволяют получать совершенные по структуре пленки как поликристаллические, так и монокристаллические

В данной работе элементный состав структур SiC/Si, полученных высокотемпературным химическим осаждением из газовой фазы, изучался методом рентгенофазового анализа (РФА), а также комбинационного рассеяния.

Структура поверхности с пленкой карбида кремния исследовалась методом качественного рентгенофазового анализа (РФА) с помощью съемки рентгенограмм вращения в камерах РКВ-86 в $\text{CoK}_{\alpha,\beta}$ -излучении. Исходные пластины монокристаллического кремния, использовавшиеся в качестве подложки, имели ориентацию кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$ нормально к плоскости пластины. Из таких пластин со слоем карбида кремния вырезались образцы шириной 1-2 мм и высотой 10-15 мм, которые размещались в гониометрическом держателе камеры.

Спектры возбуждались в ближнем ИК диапазоне с помощью лазерного модуля с центральной длиной волны 532 нм. Объектив LMP1an с увеличением 50х использовался для фокусировки излучения на образце и сбора рассеянного излучения. Диаметр лазерного пятна в фокусе составлял 5 мкм. Спектры регистрировали в спектральном диапазоне 0-2000 см^{-1} со спектральным разрешением 6-8 см^{-1} . Предел допускаемого относительного среднего квадратического отклонения измерения волновых чисел не более 1%. Используемая спектрометрическая система характеризуется отсутствием внешнего охлаждения. Мощность лазера составляла 20 мВт для метода поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии. Время экспозиции составило 5 секунд с 5-кратным усреднением.

Результаты РФА говорят об идентификации на поверхности монокристалла кремния фаз кубического SiC и одной из его гексагональных модификаций (2H с пространственной группой $R\bar{6}3/mmc$). Отражения карбида кремния представлены на рентгенограммах в основном в виде

довольно широких линий, а не отдельных рефлексов, а там, где фиксируются редкие рефлексы, они довольно сильно размыты вдоль дебаевских линий. Это свидетельствует, во-первых, об, в основном, хаотической ориентации кристаллитов карбидной пленки, а во-вторых, о довольно значительном разбросе в размерах этих кристаллитов. Также наблюдаются рефлексы оксида кремния и гексагональной формы углерода.

Подтверждают данные результаты и спектры комбинационного рассеяния. Наблюдаются интенсивные пики, соответствующие как структуре карбида кремния (970 см⁻¹), так и углерода (1300 и 1700 см⁻¹).

Наличие углерода на поверхности пленок карбида кремния можно объяснить несовершенством технологии. При отключении подачи анодного тока индуктора, подложкодержатель остывает неравномерно: сверху и снизу быстрее, чем в середине. Это приводит к тому, что при осаждении на остывшую подложку кремния углерод не встраивается в кристаллическую структуру.

Список литературы

1. Melissa A., Optical parametric oscillation in silicon carbide nanophotonics/ Melissa A. Guidry, Ki Youl Yang, Daniil M. Lukin, Ashot Markosyan, Joshua Yang, Martin M. Fejer, and Jelena Vučković// *Optica*. - 2020. -Vol. 7.– pp. 1139-1142
2. Castelletto S., Boretti A. Silicon carbide color centers for quantum applications//*J. Phys. Photonics*. – 2020. –Vol. 2. - 022001 DOI 10.1088/2515-7647/ab77a2
3. Kharitonov SI, Kazanskiy NL, Volotovskiy SG, Khonina SN. Calculation of quantum characteristics based on the classical solution of the diffraction problem in a resonator with a dielectric plate. *Computer Optics* 2022; 46(5): 741-751. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-1174
4. Silicon carbide: technology, properties, application / O.A. Ageev [and others]; under total ed. A.E. Belyaeva and R.V. Konakova. Kharkov: ISMA, 2010. 532 p.
5. Babkov R.Yu. Prospects for the use of silicon carbide in microelectronics // *Proceedings of the Southern Federal University. Series "Technical Sciences"*. 1998. No. 3(9). S. 89.
6. Problems of creating high-temperature semiconductor devices based on silicon carbide / I.V. Silaev [et al.] // *International Journal of Experimental Education*. 2014. No. 5. P. 62.
7. K. Takahashi, A. Yoshikawa, A. Sandhu. *Wide Bandgap Semiconductors*. Springer, Berlin (2007). 481 p.

Влияние структурных несовершенств пленок карбида кремния на электрофизические параметры

Лебедев Д. М.¹, Чепурнов В.И., Шишкин И.А., Шишкина Д.А., Пузырная Г.В., Нефедов С.А., Услин Д.А., Долгополов М.В.

¹Самарский университет

e-mail: *dima.lebedev1115@gmail.com*

Карбид кремния (SiC), обладая множеством политипов, имеет обширную область применения. Этот материал имеет большой потенциал для создания устройств и интегральных схем, предназначенных для работы в экстремальных условиях: при повышенных температурах окружающей среды, при воздействии агрессивных сред, а также в условиях открытого космоса. Кубический карбид кремния (3C-SiC) может быть потенциальным фотоэлектрическим материалом для тонкопленочных солнечных элементов из-за его широкой запрещенной зоны и нетоксичности. Также карбид кремния является перспективным материалом для реализации технологий квантовой и нелинейной фотоники.

Контроль и управление дефектообразованием в полупроводниковых структурах определяет потенциал ее прикладного применения [1-3]. При получении структур SiC/Si различными методами, в том числе и методом высокотемпературного осаждения из газовой фазы, покрытия карбида кремния могут обладать недостаточным структурным совершенством, что в свою очередь, могут приводить к неожиданным изменениям свойств структуры. Так при образовании большого количества дефектов или сетки дислокаций в SiC на локальных областях может меняться тип проводимости.

В данной работе формирование пленок карбида кремния происходило методом HTCVD. Химический транспорт углерода водородом на монокристаллическую подложку кремния осуществлялся при температуре 1360-1380°C в двухзонном реакторе.

Несоответствие параметров решетки сопрягаемых фаз (20%) вызывают критические механические напряжения, которые релаксируют до остаточных посредством сетки дислокаций, сосредоточенной в Si-фазе [4].

При длительном проведении HTCVD процесса ниже границы SiC/Si возникает сетка дислокаций, которая уходит дальше вглубь подложки [5]. Последние теоретические и экспериментальные разработки института физики микроструктур РАН (Нижний Новгород) и института физики твердого тела РАН (Черноголовка) в области роли дефектов в механизме электропроводности подтвердили влияние протяженных дефектов, дефектов несоответствия параметров решеток и критических напряжений, вызываемых температурными коэффициентами расширения. В работе [3] описывается возможность дислокационной электропроводности. Это предполагает причину плохой воспроизводимости электрофизических характеристик гетероструктур SiC/Si.

Изучение зонных энергетических диаграмм гетеропереходов и вольт-амперных характеристик структур показало, что барьерные свойства в основном определяются не разрывом зон в ОПЗ гетероперехода SiC/Si, а зарядовым состоянием в области 3-х мерной сетки дислокаций. Если учитывать их сочетание, то протяженная дислокация имеет свою ОПЗ между ядром и локализованным окружением с соответствующими зарядовыми состояниями.

Список литературы

1. М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. М.6
Металлургия. 1985. С.159.
2. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. Лен-д.: Наука. 1972.С.384.
3. Шевченко С.А. Дислокационная электропроводность в германии и кремнии. Диссертация. Черноголовка.
2004. С.203
4. Л.К. Орлов и др. Электрические характеристики зонная энергетическая диаграмма изотипного n-Si_{1-x}Ge_x
/n-Si – гетероперехода в релаксированных структурах./ФТТ,2004. Т46, В 11, с.2069-2075
5. Зи С. Технология СБИС. М.: Мир.1986. С.453

Физика и технология преобразования энергии

Improving the electron transpiration cooling efficiency via fine-tuning self-synchronization of collective atomic vibrations in multilayered carbyne-enriched nano-enhanced interfaces

Lukin A.N.¹, Gulseren O.²

¹Western-Caucasus Research Center, Russia

²Bilkent University, Turkey

e-mail: *lukin@werc.ru*

Development of advanced thermal protection systems is extremely important for space exploration as well as for aerospace and launch vehicles. Electron transpiration cooling is an active heat protection technique that uses thermionic emission to emit electrons to remove heat from hot aerospace surfaces after the thermal energy overcomes the binding potential (work function) of the material. The most efficient and promising implementation of this technology is the combination of the electron transpiration cooling with thermionic energy conversion within one system, which also acts as an onboard source of electrical energy. Efficient cooling using this technological scheme requires electrically conductive surfaces and the ability of emissive materials to emit electrons after heating, preferably with a low work function. Since the emitter work function is directly connected to the atomic configuration on the surface and their vibrational state, the choice of suitable material is critical. The "holy grail" of low-dimensional carbon allotropes, carbyne, represents a one-dimensional chain of carbon atoms. The advantage of carbyne for field emission applications is the high mobility of charge carriers and strong anisotropy of the electrical resistance along the chains of carbon atoms and between the chains. Relatively recently, an original route to compensate for the high reactivity of the carbon chains was found. In particular, a technique to encapsulate the oriented linear chains of carbon atoms - the monatomic carbon filaments into the matrix of amorphous carbon during the ion-assisted pulse-plasma deposition, were developed. In accordance with the features of the obtained spatial topology, the grown nano-matrix was named as an 2D-ordered linear-chain carbon. This new nanomaterial behaves as an excellent electron-field emitter owing to its exceptional properties and offers several benefits compared to traditional cathodes. Based on recently discovered fundamental phenomenon, known as collective atomic vibrations, manifested within transition domains of multilayer nanostructures, we developed a game-changing approach for improving the efficiency of the combined electron transpiration cooling with thermionic energy conversion by predictive unlocking new functionalities of the 2D-ordered linear-chain carbon-based multilayer emitters via excitation and fine-tuning self-synchronization of collective atomic vibrations and phonon waves propagation in transition interfacial layers. In particular, we propose using 2D-ordered linear-chain carbon-based multilayered nano-enhanced interfaces as well as their synergistic effects. For predictive excitation and adjustment of the nano-interface-based and synergistic effects such as self-synchronization of collective atomic vibrations, phonon waves propagation and energy exchange within the multilayer nano-enhanced interfaces we developed several tool-kits. In particular, these tool-kits include combination of a set of techniques: the energy-driven initiation of the allotropic phase transformations, the surface acoustic waves-assisted micro/nano- manipulation during the ion-assisted pulse-plasma functionalizing, the heteroatom doping, initiating directed self-assembly through application external high-frequency electromagnetic fields as well as using the data-driven digital twins-based nanoscale manufacturing approach. The developed approach opens up the possibility of creating the combined electron transpiration cooling and thermionic energy conversion systems of a new type, the energy efficiency of which can significantly (by orders of magnitude) exceed the efficiency of existing electron transpiration cooling systems.

Acknowledgments: This research work is jointly supported and funded by the Scientific and Technological Research Council of Turkey (TÜBİTAK) and the Russian Foundation for Basic Research (RFBR) according to the research project № 20-58-46014.

Электрические свойства твёрдых растворов халькогенидов самария в среднетемпературном интервале

Соловьёв С. М.¹, Каменская Г.А., Шаренкова Н.В., Гревцев М.А.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: serge.soloviev@mail.ioffe.ru

Исследование термовольтаического эффекта (ТВЭ) в сульфиде самария (SmS) [1] выявило, что данный эффект проявляется при наличии градиента концентрации донорных уровней N_i по объёму, что описывается формулой (1) [2].

$$E = K \times grad N_i \quad (1)$$

где E – напряженность генерируемого электрического поля, K – коэффициент эффекта, сложным образом зависящий от температуры и параметров полупроводника.

Также изучение эффекта на образцах SmS показало, что генерация ЭДС в SmS происходит при нагреве до температуры $\sim 470\text{K}$. При дальнейшем нагреве образцов SmS происходит истощение примесных уровней. Одним из путей решения увеличения величины выходного сигнала, исходя из формулы (2) эдс эффекта [3], является заглупление примесных донорных уровней на одной из сторон образца. В работах [4] и [5] заглупление примесных уровней происходило путём легирования образцов SmS ионами Ln (Eu, Yb) и халькогенов X (Se, Te) и создание структур типа SmS/Sm_{1-x}Ln_xS и SmS/SmS_{1-x}X_x. И в том и другом случае эффект был исследован до 800K. В данной работе проведены более подробные исследования твёрдых растворов системы SmS-SmSe. Эти исследования направлены на определение наиболее оптимального состава для создания гетероструктуры с наибольшим сигналом ТВЭ.

Образцы SmX (где X=S, Se) изготавливались методом синтеза из простых веществ Sm и X [5]. Твёрдые растворы SmS_{1-x}Se_x были созданы из смешения порошков SmS и SmX, которые затем брикетировались и отжигались в вакууме при $T=1600\text{ }^\circ\text{C}$. По результатам рентгенофазового анализа и закону Вегарда мы получили следующие составы SmS_{1-x}Se_x (0.1, 0.2, 0.25, 0.3, 0.5, 0.68, 0.7). Исследование температурных зависимостей электропроводности данных составов показало, что глубина залегания примесных уровней увеличивается от 0,045 эВ для $x=0.1$ до 0,171 эВ для $x=0.7$. Однако, также видно, что с увеличением x нелинейно увеличивается удельное сопротивление. С точки зрения основ электроники, идеальный источник ЭДС – это источник, внутреннее сопротивление которого принято считать бесконечно малым. Основываясь на данном постулате и проведённых исследованиях мы приходим к выводу, что наиболее оптимальным составом для создания гетероструктур является состав с $x=0.25$.

Список литературы

1. В.В. Каминский, С.М. Соловьёв. Возникновение электродвижущей силы при изменении валентности ионов самария в процессе фазового перехода в монокристаллах SmS. ФТТ, т.43, в.3, с.423-426, 2001
2. В.В.Каминский, А.В.Голубков, Л.Н.Васильев. Дефектные ионы самария и эффект генерации электродвижущей силы в SmS. ФТТ, т.44, в.8, с.1501-1505, 2002.
3. В.В. Каминский, С.М. Соловьёв, Н.В. Шаренкова, Shinji Hirai, Yohei Kubota. Термовольтаический эффект в полупроводнике сульфиде церия. Письма в ЖТФ, т.44, вып.23, с.85-89, 2018
4. V V Kaminskii, S M Soloviev, N M Sudak, M I Zaldastanishvili, N V Sharenkova and M M Kazanin. Studies of the thermovoltaic effect in semiconductors in the medium temperature range. Journal of Physics: Conference Series, 1400

(2019) 066056

5. С.М. Соловьёв, Н.В. Шаренкова, Г.А. Каменская, С.Г. Шульман. Исследования термольтайического эффекта в твёрдых растворах на основе халькогенидов самария в среднетемпературном интервале. Тезисы докладов международной конференции Физика.СПб/2022, 17-21 октября 2022 года, с.38

Тройной критерия Лоусона для термоядерных реакторов на основе D-³He топлива

Годес А. И.¹, Шаблов В. Л.
¹ИАТЭ НИЯУ МИФИ

e-mail: godes.ai@yandex.ru

Настоящая работа посвящена определению критерия Лоусона ($\eta\tau$) [1] и тройного критерия Лоусона ($\eta\tau T$), а также концентрации ядер, образующихся в ходе стационарного режима работы термоядерного реактора, использующего D-³He топливо. При этом используется уточненная температурная зависимость скорости реакции D-³He → p-⁴He, рассчитанная в приближении эффективного радиуса [2-3], которая хорошо согласуется с экспериментальными данными работ [4-6] по поведению астрофизического S-фактора рассеяния:

$$S(E) = \frac{9.11}{(1 - e^{-2\pi\eta})} \frac{\beta(k)}{(\alpha(k) - 2h(k))^2 + (\beta(k) + D(k))^2} \text{ (МэВ.б)},$$

$$\alpha(k) = \alpha_0 + \alpha_1(ka_c)^2 + \alpha_2(ka_c)^4 \quad \beta(k) = \beta_0 + \beta_1(ka_c)^2 + \beta_2(ka_c)^4,$$

(1)

(η - кулоновский параметр реакции, a_c - боровский радиус пары D-³He, $h(k) = \text{Re}\psi(i\eta) - \ln(\eta) = \text{Re}\psi\left(\frac{i}{ka_c}\right) + \ln(ka_c)$, $\psi(z)$ - логарифмическая производная гамма-функции) в диапазоне энергий от 0 и до 1000 кэВ. Параметры данной модели таковы:

$$\alpha_0 = 0.117002 \quad \alpha_1 = 0.191855 \quad \alpha_2 = -0.01225 \quad \beta_0 = 0.00937 \quad \beta_1 = 0.006658 \quad \beta_2 = 0.000582$$

(2)

Рассчитанные значения скорости термоядерного синтеза $\langle \sigma v \rangle$ хорошо согласуются с данными базы NACRE II [7]. Проведенное рассмотрение является уточнением результатов предшествующей работы [3], основывавшейся на экспериментальных данных [4,5], в частности, лучше описываются данные по упругому D-³He рассеянию [8].

В данной работе рассматривается 3 сценария работы термоядерного реактора: а) реактор с самообеспечением ³He, б) полностью катализированный D-D цикл и в) некатализированный D-D цикл. Расчеты проводились для различных значений параметра Q-коэффициента усиления, т.е. отношения удельной мощности полного термоядерного энерговыделения к удельной мощности

внешнего нагрева $Q = \frac{W_{fus}}{W_{ext}}$. В частности, было установлено, что в случае полностью катализированного D-D цикла при $Q = \infty$ тройной критерий Лоусона отвечает эквивалентному D-³He – топливу $\frac{n_d}{n} = \frac{n_{He}}{n} = 0.46$ со следующими параметрами: $n\tau T = 5.99 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с} \cdot \text{кэВ}$, $T = 60$ кэВ. и характеризуется наименьшей относительной концентрацией ядерной золы (7.7%). Если же принять $\frac{n_d}{n} = 0.5$ то относительная концентрация ядерной золы составит 18.3% при $n\tau T = 8.14 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с} \cdot \text{кэВ}$, $T = 60$ кэВ.

Полученные результаты в дальнейшем предполагается применить для определения характеристик различных режимов работы конкретных термоядерных устройств, использующих D-³He топливо.

Список литературы

1. Lawson J.D. Some criteria for a power producing thermonuclear reactor. Proceedings of the Physical Society. Section B. 1957. Vol.70(1):6. DOI:<https://doi.org/10.1088/0370-1301/70/1/303>
2. Карнаков Б.М., Мур В.Д., Поздняков С.Г., Попов В.С. Полоса и резонансы в низкоэнергетическом рассеянии заряженных частиц. // Ядерная физика. 1991. Том. 54. вып. 2(8). С.400-403
3. Alper I.B., Godes A. I., Shablov V.L. New parametrization for the ³He(d,p) ⁴He fusion reaction rate and refinement of the Lawson criterion for d-³He thermonuclear reactors //Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol.2103. 012197 doi:10.1088/1742-6596/2103/1/012197
4. Moller W., Besenbaher F. A note on the ³He + D nuclear-reaction cross section. // Nuclear instruments and methods. 1980. Vol.168. PP. 111-114.
5. Krauss A., Becker H.W., Trautvetter H.P., Rolfs C., Brand K. Low-energy fusion cross sections of D+D and D+ ³He reactions//Nuclear Physics. 1987. Vol.A465. P.150-172.
6. Geist W.H., Brune C.R., Karwowski H.J., Ludwig E.J., Veal K.D., Hale G.M. The ³He(d,p)⁴He reaction at low energies //Phys.Rev.C. 1999. v.60, pp.054003-1-054003-9.
7. Xua Y., Takahashia K., Gorielya S., Arnoulda M., Ohtac M., Utsunomiyad H. NACRE II: an update of the NACRE compilation of charged-particle-induced thermonuclear reaction rates for nuclei with mass number A < 16// Astronomy&Astrophysics. 2013. V.549. A106. 120p.;DOI:<https://doi.org/10.1051/0004-6361/201220537>.
8. Балашко Ю.Г. Исследования упругого рассеяния заряженных частиц на некоторых легких ядрах при низких энергиях. // Труды физического института им. П.Н. Лебедева академии наук СССР. 1965. Том 33. С. 66-126.
9. Khvesyuk V.I., Chirkov A. Yu. Low-radioactivity D-³He fusion fuel cycles with 3He production// Plasma Phys. Control. Fusion.-2002.-V.44. PP.263-260.
10. Stott P.E. The feasibility of using d - ³He and d - d fusion fuels // Plasma Phys. Control. Fusion. 2005. Vol.47. P.1305-1338.

Исследование характеристик гибридных фотоэлектрических модулей в условиях локальной неравномерности освещенности и частичного затенения

Емельянов В. М.¹, Нахимович М.В.¹, Шварц М.З.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: vm.emelyanov@mail.ioffe.ru

Гибридные фотоэлектрические модули, построенные на основе многопереходных гетероструктурных III-V солнечных элементов (СЭ), оптических концентраторов, а также фотопреобразователей Si-HJT (HeteroJunction Technology – кремниевая гетеропереходная технология) структур, являются эффективными источниками энергии как в условиях ясной, так и пасмурной погоды, обеспечивая преобразование как прямого солнечного излучения концентраторными фотоэлектрическими ячейками, так и диффузного (рассеянного) планарными солнечными элементами [1].

Существенной проблемой фотоэнергетических установок является устойчивость к эффектам локальной неравномерности освещенности поверхности СЭ, которые приводят к снижению КПД, а также в некоторых случаях – возникновению или развитию дефектов структуры фотопреобразователя, таких как локальные шунты, термическое повреждение p-n перехода [2].

Соответствующие эффекты актуальны для планарных СЭ в составе гибридных модулей, однако гораздо меньше изучены. Особенностью проявления этих эффектов для гибридных модулей являются:

- 1) меньшие номинальные значения фототоков как в режиме преобразования прямого излучения, когда на поверхность планарного СЭ приходит только рассеянное концентратором излучение;
- 2) влияние рассеянного излучения от подстилающей поверхности для СЭ с двусторонней чувствительностью, которое по интенсивности может превосходить излучение, приходящее с лицевой стороны, при этом обладая существенной неравномерностью вследствие затенения элементами конструкции фотоэнергетической установки;
- 3) возможность формирования на поверхности планарного СЭ точек сверхвысокой интенсивности излучения в случаях:

– повреждения оптического концентратора;

– отражения солнечного излучения от посторонних предметов с зеркальной поверхностью, приводящего к смещению фокальной точки линзового концентратора с поверхности гетероструктурного III-V СЭ на поверхность планарного СЭ.

Для решения исследовательских задач была разработана специализированная модель планарного СЭ с распределенными параметрами, позволяющая учитывать, что различные зоны СЭ могут функционировать при разной температуре и облученности.

В основе обеих моделей находится базовая фотоэлектрическая ячейка, ВАХ которой описывается формулой:

$$J(V) = J_{ph} - J_{0d} \left(\exp\left(\frac{eV}{kT}\right) - 1 \right) - J_{0r} \left(\exp\left(\frac{eV}{2kT}\right) - 1 \right) - \frac{V}{R_{shunt}},$$

где e – заряд электрона, h – постоянная Планка, c – скорость света, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, R_{shunt} – шунтирующее сопротивление, J_{0d} , J_{0r} – плотности инжекционного и рекомбинационного токов, получаемые решением диффузионно-дрейфовой задачи. Пределы интегрирования соответствуют границам областей фоточувствительности, после перехода которых генерацией носителей заряда в слоях СЭ можно пренебречь. С учётом двусторонней чувствительности СЭ, фототок рассчитывается с использованием формулы:

$$J_{ph} = \frac{e\eta_1}{hc} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \lambda Q_{e1}(\lambda) \Gamma_1(\lambda) d\lambda + \frac{e\eta_2}{hc} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \lambda Q_{e2}(\lambda) \Gamma_2(\lambda) d\lambda,$$

где Q_{e1} , Q_{e2} – внешний квантовый выход фотоответа при падении света с лицевой и тыльной поверхностей, соответственно, η_1 – коэффициент затенения лицевой поверхности планарного СЭ, η_2 – коэффициент затенения тыльной поверхности модуля, Γ_1 , Γ_2 – спектральная плотность энергетической освещенности диффузного излучения для лицевой и тыльной поверхностей, соответственно.

С использованием разработанной модели были исследованы:

- 1) зависимость КПД гибридного фотоэлектрического модуля от характеристик подстилающей поверхности, сравнение КПД СЭ с односторонней и двусторонней чувствительностью;
- 2) особенности вольтамперных характеристик и значения пиковых токов от различного характера неравномерности освещенности планарного СЭ:
 - частичное затенение различной интенсивности;
 - наличие точек сверхвысокой интенсивности излучения (световых бликов) на поверхности планарного СЭ в гибридном фотоэлектрическом модуле.
- 3) величины локальных напряжений в планарном СЭ при различных характерах неравномерности освещенности;
- 4) эффекты локального нагрева СЭ в зависимости от характеристик локальной неравномерности освещенности и её длительности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00158.

Список литературы

1. Шварц М.З., Андреева А.В., Андроников Д.А., Емцев К.В., Ларионов В.Р., Нахимович М.В., Покровский П.В., Садчиков Н.А., Яковлев С.А., Малевский Д.А., Письма в ЖТФ, 49 (4), 15 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.04.54520.19438.
2. Wendlandt S., Drobisch A., Tornow D., Friedrichs M., Krauter S. and Grunow P., Proc. SES Solar World Congress 2011 (Kassel, Germany), 120 (2011). DOI: 10.18086/swc.2011.14.18.

Новый подход к изучению процессов трения

Поздняков А. О.¹, В.А. Преображенский², Л.П. Мясникова¹, О.Ю. Соловьева¹, К.А. Данилова¹, Ю.М. Бойко¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²ООО Коннектор Оптик

e-mail: *ao.pozd@mail.ioffe.ru*

Характер трения и износ трущихся поверхностей твердых тел определяет сферы применения материалов и их долговечность в узлах трения. Изучению процессов, происходящих при трении, посвящено огромное количество исследований, разработаны теоретические модели и написаны монографии [1,2]. В значительно меньшей степени исследована трибология полимеров, особенно для случая трения пары полимер-полимер [3], в отличие от случая полимер-металл. Сдвиговая сила трения в симметричной паре полимер-полимер обычно выше, чем, например, в паре полимер-металл. Причиной этого полагают одинаковый размер атомов и молекул по обе стороны трущихся поверхностей и соразмерности интерфейсов в случае симметричной пары полимер-полимер, что приводит к сильной блокировке скольжения. В паре полимер-металл интерфейсы не соразмерны, а расстояния между атомами на поверхности контртел различны [4].

В настоящей работе впервые проведено сравнительное исследование процессов, происходящих при трении пары полиоксиметилен (ПОМ)-нержавеющая сталь и пары ПОМ-ПОМ при использовании сочетания уникальных исследовательских приборов:

- оригинальной машины трения, помещаемой в вакуумную камеру время-пролетного масс-спектрометра типа рефлектрон, позволяющего анализировать трибоиндуцированные продукты деструкции [5] с одновременной регистрацией силы трения и
- нанолюминографа [6], регистрирующего кривые свечения от приповерхностных нанослоев полимера, подвергавшихся трению, а затем активированных низкочастотной плазмой тлеющего разряда в аргоне при 77К и испускающих кванты света при нагревании.

Анализ положения пиков термолюминесценции на кривых свечения позволяет оценивать изменение в молекулярной подвижности и рассчитывать размеры сегментов, подвижность которых размораживается в температурных интервалах соответствующих релаксационных переходов. Такой анализ будет проведен в связи с реализацией различных режимов сдвиговой деформации слоев при трении. Сопоставление масс-спектров продуктов, образующихся при трении полимеров и их сопоставление со спектрами, образующимися при нагревании, позволяют описать механизм деструкции макромолекул, вызванный относительным сдвигом контртел. Анализ спектров термодеструкции полимерных слоев подвергнутых трению позволяет получать богатую информацию о трибоиндуцированном дефектном состоянии макромолекул.

ПОМ был выбран в качестве объекта исследования как перспективный полимерный материал, обладающий превосходными физическими и механическими характеристиками, широко используемый в электронике, автомобилестроении, ортопедии, а также в качестве дешевого заменителя таких металлов, как медь, цинк и др. Кроме этого, ПОМ находится в высокоэластическом состоянии при температурах трения, что позволило выявить дополнительные интересные эффекты, обусловленные макромолекулярной подвижностью в симметричной паре ПОМ-ПОМ.

В докладе будет представлен анализ оригинальных трибологических, масс-спектрометрических и термолюминесцентных данных, позволивших описать процессы, происходящие при трении на молекулярном уровне. Будет обсуждена общность подхода к изучению более широкого спектра полимерных пар трения.

Список литературы

1. Persson B.N.J., Sliding Friction: Physical Principles and Applications, 2nd edition (Springer, Heidelberg, 2000).
2. Dowson D. History of Tribology, 2nd edition (Professional Engineering Publishing, London and Bury St Edmunds, UK, 1998).
3. Yamaguchi Y., Tribology of Plastic Materials: Their Characteristics and Applications to Sliding Components (Elsevier, Amsterdam, 1990).
4. Sivebaek, I.M., Samoilov, V.N., Persson, B.N.J.// Eur. Phys. J. 2008. E 27, 37–46
5. Поздняков А. О., Чернышов М. И., Семенча А. В., Николаев В. И., Кобычно И. А., Фадин Ю. А.// Изв. Вузов. Приборостроение. 2020. Т. 63, № 10. С. 950-955
6. Патент РФ 2212650, М-ва, 20.09, 2003

Поиск оптимального решения для оптической системы «micro-CPV» модуля

Левина С. А.¹, А.А. Солюянов, М.З. Шварц

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: levina@mail.ioffe.ru

Тенденции в современной концентраторной фотовольтаике последнего времени связаны с постепенным переходом ко все более компактным модулям, которые сформируются на основе малоразмерных короткофокусных микроконцентраторов и фотопреобразователей (солнечных элементов – СЭ) субмиллиметровых размеров [1-3]. Подход, называемый «micro-CPV», помимо сокращения габаритов модуля, позволяет существенно снизить тепловую нагрузку в каждой ячейке модуля при сохранении высокой средней концентрации солнечного излучения. Более однородное распределение тепла на единой теплоотводящей панели уменьшает влияние механических напряжений из-за несоответствия температурных коэффициентов расширения материалов полупроводника и теплоотвода и, как результат, повышается надёжность модуля [2-3]. Кроме того, может подавляться влияние латеральных токов на вольтамперные характеристики [4], вызванное неоднородностью засветки СЭ. За счет снижения резистивных потерь от латеральных токов открывается путь к использованию альтернативных более дешевых электрических контактов, например, таких как прозрачные проводящие слои. Негативное влияние «периферии» характерное для стандартных модулей [5], также оказывается слабее в случае концептуальных решений micro-CPV.

Следует отметить, что простая миниатюризация традиционных концентраторных модулей, оптимизированных под трехпереходные СЭ с площадью фоточувствительной поверхности равной десяткам квадратных миллиметров, не всегда является приемлемым решением для реализации micro-CPV [6]. Уменьшение размеров компонентов модуля накладывает существенно больше ограничений и требований: изготовление прецизионной микрооптики, манипулирование множеством взаимосвязанных элементов в модуле, интеграция микрочипов на больших площадях, позиционирование и оптическое согласование различных элементов с микрометрической точностью, так как даже малые отклонения способны значительно повлиять на выходные характеристики модуля

Данная работа посвящена исследованию оптико-энергетических характеристик (ОЭХ) оптической части micro-CPV модуля и поиску оптимального дизайна по критерию «максимум средней концентрации солнечного света в фокальном пятне минимального радиуса». При моделировании ОЭХ использовался метод прослеживания световых лучей в заданном спектральном диапазоне (300-1800 нм) с последующим суммированием их энергетических вкладов в ячейки радиально-кольцевой сетки приемника с учетом углового размера источника и всех видов оптических потерь. На первом этапе были исследованы две конфигурации (ПВЛ – плосковыпуклая и ДВЛ - двояковыпуклая) для первичной концентрирующей системы. Результаты оптимизации линз различных размеров, фокусных расстояний, профилей преломляющих поверхностей, показали, что концентрирующая способность ПВЛ приблизительно в 2 раза ниже, чем у ДВЛ, при одинаковых размерах обеих линз. При этом продольные габариты системы на основе ПВЛ вследствие увеличенного фокусного расстояния примерно на 30% больше, чем у системы с ДВЛ. Таким образом, в качестве наиболее оптимального решения для micro-CPV модуля была выбрана ДВЛ. Для выбранной конфигурации ДВЛ подбирались вторичные концентрирующие оптические элементы для

улучшения однородности сконцентрированного светового потока на фотоприемнике и снижения потерь из-за аберраций. Добавление вторичной оптики также позволило снизить чувствительность к позиционированию СЭ относительно оптической оси концентратора и расширить допустимые (относительно направления на Солнце) углы разориентации модуля без потери генерируемой мощности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00499

Список литературы

1. C. Domínguez, N. Jost, S. Askins, M. Victoria, and I. Anton, "A review of the promises and challenges of micro-concentrator photovoltaics", AIP Conference Proceedings 1881, 080003 (2017) <https://doi.org/10.1063/1.5001441>
2. K. -H. Yang, C. -Y. Chen, Y. -M. Lee, Z. -H. Shih and H. -F. Hong, "Outdoor Performance of Micro-CPV and PV Systems in Different Locations," 2019 IEEE Eurasia Conference on IOT, Communication and Engineering (ECICE), 2019, pp. 394-396, doi: 10.1109/ECICE47484.2019.8942187.
3. J. F. Martinez, M. Steiner, M. Wiesenfarth, S. W. Glunz and F. Dimroth, "Thermal Analysis of Passively Cooled Hybrid CPV Module Using Si Cell as Heat Distributor," in IEEE Journal of Photovoltaics, vol. 9, no. 1, pp. 160-166, Jan. 2019, doi: 10.1109/JPHOTOV.2018.2877004.
4. R. Arnaud, P. Voarino and O. Raccurt, "Does micro-scaling of CPV modules improve efficiency? A cell-to-module performance analysis." Solar Energy (2018): v. 173, pag.789-803
5. P. Espinet, I. García, I. Rey-Stolle, C. Algora, and M. Baudrit, "Distributed Simulation of Real Tunnel Junction Effects in Multi-Junction Solar Cells", AIP Conference Proceedings 1277, 24-27 (2010)
6. Li, D, Li, L, Jared, B, et al. Wafer integrated micro-scale concentrating photovoltaics. Prog Photovolt Res Appl. 2018; 26: 651– 658. <https://doi.org/10.1002/pip.3034>

Управление поляризованностью сегнетоэлектриков для экономии потребления энергии при зарядке аккумуляторов электротранспорта

Зубцов В. И.¹,

¹ПГУ, Белоруссия

e-mail: subcv@rambler.ru

Одним из решений достижения углеродной нейтральности является замена двигателей внутреннего сгорания на электродвигатели в транспорте. К 2035 году многими странами планируется практически полный переход на электромобили. Массовый переход на электромобили потребует большого количества дополнительной электроэнергии и создания сетей зарядных станций.

В этой связи была разработана зарядная установка (ЗУ) для зарядки аккумуляторов с использованием управления поляризованностью сегнетоэлектриков. Технология управления поляризованностью сегнетоэлектриков в основном сводится к изменению их сжимаемости и электроупругости [1-3].

Экономия при зарядке аккумуляторов происходит за счет получения энергии на выходе ЗУ, превышающей (в зависимости от модификации сегнетоэлектрика и схемы включения в электрические цепи) потребляемую энергию от источника переменного электрического напряжения в 1.5 – 3 раза. Это превышение (дополнительная электроэнергия) может быть и больше при использовании более эффективных сегнетоэлектриков с точки зрения их электрических и физических характеристик.

Дополнительная электроэнергия образуется в два этапа: на первом – происходит увеличение поляризованности сегнетоэлектрика, на втором – усиление электрической мощности ЗУ. Зарядная установка состоит из блока управления (электромеханического преобразователя и легко реализуемого устройства для получения механической энергии), электрохимического генератора (ЭХГ) и согласующего устройства. С учетом использования механической энергии, КПД ЗУ составляет примерно 55 - 60% [3, 4] .

Электромеханический преобразователь и ЭХГ изготовлены из многокомпонентной сегнетопьезоактивной керамики, представляющей собой систему твердого раствора. Эти керамики, имеют важные для электромеханических преобразователей характеристики: высокие пьезо- и диэлектрические свойства. Они отвечают также специфическим требованиям: серийной пригодности, компактности, технологичности и др. [5]. Их производство в настоящее время хорошо налажено. Кроме того, сегнетопьезокерамики относительно дешевы в производстве.

Таким образом, используя ЗУ или зарядные станции на основе сегнетопьезокерамики, можно обходиться их меньшим количеством и экономить электроэнергию.

Список литературы

1. Zubtsov V. I., Zubtsova E.V. Segnetoelectrics in improving the efficiency of electric vehicles/ (Europe an Union: LAP LAMBERT Academic Publishing). 76 с (2021)
2. Zubtsov V. I., Zubtsova E.V. Improving the efficiency of electric transport drives by controlling the polarization of segmentelectrics //International Journal of Circuits and Electronics.– 2021. – No. 6. - pp. 55-59.

3. Zbtsov V. I., Zbtsova E.V and Derugin V. V. The technology of increasing the energy density of batteries by controlling the degree of polarization of ferroelectrics. Journal of Physics: Conference Series: 1400, 066061 (2019)
4. Zbtsov V. I. Technology to increase energy density of electric car batteries// International Journal of Electrical Engineering and Computer Science//– 2022. – No. 4. - pp. 40-44.
5. Малов В.В. Пьезорезонансные датчики. (М.: Энергия) 245 с (1978)

Линейные линзы Френеля с уменьшенной хроматической аберрацией для космических солнечных батарей

Садчиков Н. А.¹, Андреева А. В.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *N.A.Sadchikov@mail.ioffe.ru*

Системы концентрации солнечного излучения на основе линз Френеля, работающие в паре с многопереходными солнечными элементами (МПСЭ), имеют реальную перспективу применения в солнечных батареях космических аппаратов. Это связано со снижением расхода полупроводниковых структур на концентраторные МПСЭ и снижением их стоимости пропорционально коэффициенту концентрации солнечного света [1-2]. Кроме того, концентрация солнечного света повышает эффективность и радиационную стойкость солнечных батарей. Это дает возможность использовать концентраторы солнечной энергии не только на околоземных орбитах, но и в дальних космических миссиях, где присутствуют высокие уровни радиации и низкая интенсивность солнечного света. Ведущими научными лабораториями проведен ряд исследовательских проектов с концентраторами на основе линз Френеля [3-4], апробированных в успешном полете в дальний космос.

Исследуемые линейные линзы Френеля представляют собой массив, состоящим из множества преломляющих микропризм, изготовленных из силиконового каучука методом полимеризации на стеклянном основании. Поперечный размер линзы Френеля 25мм, фокусное расстояние 32 мм. Шаг профиля Френеля равен 0.25мм. Геометрическая концентрация такой линзы составляет 8-10 крат. При разработке такого типа концентраторов, задачей было собрать солнечное излучение в центральной части солнечного элемента в узкую полосу с целью обеспечения запаса на точность системы слежения за солнцем и погрешности монтажа солнечных элементов на теплоотводящем основании.

Главным фактором, снижающим эффективность любых линз Френеля в составе концентраторных систем, является хроматическая аберрация. В МПСЭ фоточувствительные р-п-переходы соединены последовательно. Поэтому спектральный дисбаланс в профиле распределения солнечного излучения на поверхности МПСЭ в поддиапазонах, соответствующих спектральной фоточувствительности каждого р-п-перехода в составе МПСЭ, приводит к ограничению суммарного фототока и КПД модулей. Так в исследуемых линейных линзах Френеля [2] с постоянным шагом 0.25мм, в центре фокального пятна солнечного излучения разница при использовании МПСЭ с тремя р-п-переходами, величины в пиковой интенсивности для трех поддиапазонов солнечного спектра составляют 63, 44 и 28 крат относительно стандартного спектра АМ0 (1367 Вт/м²). Такая же пропорциональная разница существует в распределении плотности фототока для МПСЭ. Минимальное значение величины солнечного излучения в центре фокального пятна будет ограничивать суммарный фототок МПСЭ, так как на центральную часть МПСЭ попадает максимальное значение солнечной энергии.

В данной работе предлагается решение этой проблемы путем создания профиля линейной линзы Френеля, где отдельно рассчитывается профиль каждой микропризмы, при этом варьируется и фокусное расстояние, и шаг профиля Френеля. Также моделируется итоговый профиль распределения солнечной энергии на поверхности МПСЭ. Такой подход позволил сформировать профиль распределения с более высокой однородностью. При этом для расчета введен критерий – поперечный размер фокального пятна с коэффициентом перехвата 90-95%. Оптимизируя

распределение солнечной энергии от каждой микропризмы, можно обеспечить существенно более высокую спектральную и пространственную однородность излучения на поверхности МПСЭ. Так, при увеличении размеров центральных микропризм до 1.5мм, и крайних микропризм до 0.3мм, величины пиковой концентрации солнечного излучения для трех спектральных поддиапазонов составляют 17.2, 16.9 и 16.5 крат, что обеспечивает хорошую спектральную равномерность для трех поддиапазонов солнечного излучения, соответствующих спектральной фоточувствительности трех p-n-переходов МПСЭ. Излучение перераспределено из центральной части фокального пятна на периферию.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда в соответствии с соглашением № 22-29-20190 от 23.03.2022, а также за счет гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением № 30/2022 от 14.04.2022

Список литературы

1. Zh.I. Alferov, V. M. Andreev, V.D. Romyantsev, “III-V Solar cells and concentrators arrays”, in Springer series in Optics Sciences, Ed. Petrova-Koch, R. Hezel, Goetzberg, 140, pp. 101-141, (2009);
2. Vitaliy S. Kalinovskii, Evgeniya A. Ionova, Alena V. Andreeva, Evgeny V. Kontrosh, and Vyacheslav M. Andreev. “Development and investigation of linear Fresnel lens for concentrator space solar arrays”. AIP Conference Proceedings 2149, 070007 (2019);
3. D.M. Murphy, “The scarlet solar array: technology validation and flight results, in Deep Space 1 Technology Validation Report, AEC-Able Engineering Co.,Inc.”, pp.1-19, (2001);
4. M. O’Neill, A.J. McDanal, M. Piszczor, M. Myers, P. Sharps, C. McPheeters, J. Steinfeldt, “Line-Focus and Point-Focus Space Photovoltaic Concentrators Using Robust Fresnel Lenses, 4-Junction Cells, & Graphene Radiators”, in Proceeding of IEEE 44th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), (Washington, DC, 2017), pp. 525- 530.

Влияние предварительной химической обработки на эффективность пассивации текстурированных кремниевых пластин

Поздеев В. А.¹, Уваров А.В.¹, Гудовских А.С.¹, Вячеслава Е. А.¹

¹СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова

e-mail: *pozdeev99va@gmail.com*

Актуальной проблемой солнечной энергетики является рекомбинация неравновесных носителей заряда на дефектах в солнечных элементах. Пассивация поверхности кремниевых пластин приводит к снижению рекомбинации носителей заряда на поверхностных состояниях, и, следовательно, увеличению эффективности преобразования солнечного излучения. Также, увеличить эффективность солнечного элемента на основе кристаллического кремния позволяет текстурирование его поверхности, что приводит к уменьшению доли отраженного света, но, с другой стороны, увеличивает эффективную площадь поверхности раздела, на которой возникают дефекты. Оценить степень поверхностной рекомбинации можно определив эффективное время жизни неравновесных носителей заряда в кремниевой пластине (КП).

В работе исследовано влияние химической обработки поверхности текстурированных КП на эффективное время жизни неравновесных носителей заряда, и проведено сравнение с контрольными образцами, не подвергавшимся дополнительной химической очистке. Для настоящей работы был выбран пассивирующий слой $a\text{-Si:H}(i)$, обеспечивающий наименьшую концентрацию дефектов на поверхности кремния. Были выбраны следующие типы КП: не шлифованная КП после этапа распиловки, неполированная КП со снятым дефектным поверхностным слоем и КП двусторонней полировки (Topsil PV-FZ), которые перед пассивацией, в различных комбинациях, подвергались следующим техническим процессам: текстурирование в растворе гидроксида калия (KOH, 80с), реактивное ионное травление с применением источника индуктивно-связанной плазмы при криогенной (cryo-ICP RIE) и близкой к комнатной (ICP RIE) температурах.

В работе использовались КП кристаллографической ориентации (100) с удельным сопротивлением 1–5 $\Omega\cdot\text{см}$. Обработка КП проводилась с помощью 10%-го водного раствора фтороводородной кислоты (HF), а также методом RCA (SC1, SC2) [1] и модифицированным методом Ширази (CCl_4 , HNO_3 + RCA) [2]. После химической обработки проводилась пассивация КП при помощи метода плазмохимического осаждения (PECVD) слоя аморфного кремния ($a\text{-Si:H}$) толщиной 40 нм. Осаждение проводилось при температуре 250 °С, давлении 350 мТорр и мощности ВЧ-плазмы (13,56 МГц) 11 мВт/см² со скоростью 8 нм/мин. В качестве прекурсора для осаждения $a\text{-Si:H}$ использовался моносилан (SiH_4). Эффективное время жизни неравновесных зарядов оценивали по кинетике спада фотолюминесценции с картографированием, однородность и профиль травления оценивались с помощью сканирующей электронной микроскопии.

Было определено, что эффективное времени жизни неравновесных носителей заряда у текстурированных КП после жидкостного химического травления выше, чем у КП с частично снятым дефектным слоем, но ниже, чем у полированных, что согласуется с литературными данными [3]. КП, подвергшиеся реактивному ионному травлению, также показывают хорошее качество пассивации, несмотря на шероховатую поверхность нановолокон. При этом модифицированная процедура очистки Ширази позволяет добиться лучшего качества

пассивации поверхности КП, подвергшихся ионному травлению, по сравнению с RCA. В результате было достигнуто эффективное времени жизни неравновесных носителей заряда $400 \mu\text{s}$ для структур с сильно развитой поверхностью (ICP RIE).

Список литературы

1. Kern W., Puotinen D. A. Cleaning solutions based on hydrogen peroxide for use in silicon semiconductor technology // RCA review. –1970. –Vol. 31. –P. 187–206.
2. Ishizaka A., Shiraki Y. Low temperature surface cleaning of silicon and its application to silicon MBE // *Electrochem. Soc.* –1986, Vol. 133. – P. 666–671.
3. Angermann H., Laades A., Stürzebecher U., Conrad E., Klimm C., Schulze T. F., Jacob K., Lawerenz A., Korte L. Wet-Chemical Preparation of Textured Silicon Solar Cell Substrates: Surface Conditioning and Electronic Interface Properties // *Solid State Phenomena.* – 2012. – Vol. 187. – P. 349–52.

Моделирование гетероструктуры PEDOT:PSS/Si для гибридных солнечных элементов

Уваров А. В.¹, Вячеславова Е. А.¹, Поздеев В. А.¹, Максимова А. А.¹, Баранов А. И.¹, Гудовских А. С.¹

¹СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова

e-mail: lumenlight@mail.ru

Ключевыми показателями, определяющими успешность развития солнечной энергетики, является высокая эффективность и малая стоимость фотоэлектрических преобразователей. На сегодняшний день, для производства солнечных элементов (СЭ) как правило используется пластины кристаллического кремния из-за его доступности и относительно низкой цены. Солнечные элементы на основе кремния составляют более 90% рынка наземной фотовольтаики, что обусловлено доступностью материала, запасы которого в земной коре практически не ограничены, высоким уровнем развития кремниевой технологии, достаточной стойкостью к солнечному излучению и тем фактом, что солнечные элементы на основе кремниевых подложек безопасны с экологической точки зрения и не требуют особых процедур утилизации. Наибольшая эффективностью преобразования была достигнута для СЭ на основе гетероструктур аморфный/кристаллический кремний. В последние несколько лет резко выросло количество исследований по поиску абсолютно новых материалов, которые в перспективе могут заменить аморфный кремний при создании гетероструктурных СЭ на подложках кристаллического кремния. Одним из путей развития может быть создание гибридных СЭ с использованием органического проводящего материала поли (3,4-этилендиокситиофен) полистиренсульфонат (PEDOT: PSS). Среди прочих органических полимерных материалов PEDOT: PSS широко исследовался из-за его очень высокой электрической проводимости, прозрачности и коммерческой доступности. PEDOT:PSS является потенциальным материалом для замены токопроводящих слоев ITO а его полупроводниковые свойства широко используется при создании OLED дисплеев. Пленки этого полимерного материала помимо высокой электрической проводимости обладают высокой прозрачностью в видимом диапазоне, высокой механической гибкостью и возможностью простого получения из водного раствора. PEDOT:PSS зарекомендовал себя в качестве эффективного пассивирующего селективного контакта на подложках кремния, что потенциально позволяет сформировать СЭ с перспективными значениями эффективности [1]. На сегодняшний день рекорд эффективности кремниевых фотоэлектрических преобразователей с использованием слоев PEDOT:PSS составляет 16.2% что далеко от ожидаемого из расчетов значения в 21.30% [2]. Таким образом PEDOT:PSS является привлекательным материалом эмиттера для СЭ на основе кристаллического Si в качестве замены слоя a-Si:H p-типа проводимости [3].

Данная работа посвящена численному моделированию гетероструктуры PEDOT:PSS/Si с целью оптимизации гибридных СЭ на основе кристаллического кремния. Для аналитической оценки оптических и электрических свойств гетероструктуры PEDOT:PSS/Si проведено численное моделирование с использованием программного пакета AFORS-HEТ 2.5, разработанного для моделирования полупроводниковых гетероструктур [4]. Построена зонная диаграмма исследуемой структуры с учетом энергетических и электрофизических свойств отдельных слоев. Проведен расчет фотоэлектрических параметров гибридных СЭ (V_{oc} , I_{sc}) на оптимизированной структуре. Получены расчетные значения вольтамперных характеристик исследуемой структуры и определены оптимальные толщины слоев. Исследовано влияние рекомбинации на интерфейсе PEDOT:PSS/Si на спектральную зависимость квантовой эффективности (EQE) СЭ. В результате

была проведена оптимизация параметров структуры с целью увеличения эффективности преобразования солнечного излучения в гибридных СЭ. Результаты работы могут быть использованы при формировании гибридных СЭ на основе гетероструктуры PEDOT:PSS/Si, а также при численных расчетах аналогичных структур.

Список литературы

1. Nardes A. M. [и др.]. Conductivity, work function, and environmental stability of PEDOT:PSS thin films treated with sorbitol // *Organic Electronics*. 2008. Т. 9. № 5. С. 727–734.
2. Gao P. [и др.]. Dopant-Free and Carrier-Selective Heterocontacts for Silicon Solar Cells: Recent Advances and Perspectives // *Advanced Science*. 2017. Т. 5. № 3. С. 1700547.
3. Sun Z. [и др.]. Strategien zur Steigerung der Leistung von PEDOT:PSS/Si-Hybrid-Solarzellen // *Angewandte Chemie*. 2020. Т. 133. № 10. С. 5092–5112.
4. Varache R. [и др.]. Investigation of selective junctions using a newly developed tunnel current model for solar cell applications // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2015. Т. 141. С. 14–23.

Методика контроля соотношения прямой и диффузной компонент солнечного излучения при измерении фотоэлектрических характеристик гибридного модуля

Березанов Д. Ю., Малевский Д. А., Покровский П. В., Шварц М.З.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *d.berezanov@mail.ioffe.ru*

Современная возобновляемая энергетика строится на базе высокоэффективных планарных кремниевых и концентраторных многопереходных A^3B^5 солнечных элементов с КПД более 26% и 47% [1], соответственно. Модули, разработанные с применением таких элементов, имеют свои преимущества и недостатки.

В условиях переменной облачности, когда доля диффузного и прямого излучения меняется во времени, КПД планарных модулей стабильно держится в пределах одного уровня. Энерговыработка концентраторных модулей максимальна только в условиях преобладания прямого солнечного излучения, а при диффузном стремится к минимуму. Гибридные модули [2-4], разработанные на основе концентраторной и планарной концепций, обладают преимуществами обоих типов модулей.

В натуральных условиях при увеличении доли диффузного излучения в общем световом потоке в гибридном модуле наблюдается размытие (увеличение в размерах) светового пятна с одновременным снижением интегральной облученности концентраторного элемента. Перераспределение энергетической освещенности между фотоэлектрическими контурами ведет к соответствующему изменению вырабатываемой ими электрической мощности: для планарного контура она растёт, а для концентраторного падает.

В лабораторных условиях, при моделировании солнечного излучения на имитаторах [5], именно контроль над динамикой размытия сфокусированного пятна может давать достаточную информацию о корректности воспроизведения требуемых параметров светового потока в части прямой и диффузной компонент.

Для наблюдения за эффектом размытия разработано и создано оптоэлектронное устройство, включающее:

- концентратор излучения типа линза Френеля [6,7];
- полупрозрачный экран, располагаемый в фокальной плоскости линзы Френеля;
- камеру, располагаемую за экраном и регистрирующую изображение светового пятна на экране.

Оптическая система камеры переносит световое изображение с экрана на матрицу. Количество пикселей в изображении, получаемом камерой, составляет 10^6 с размерами пикселя 80 мкм. Образующее коллимированным излучением световое пятно варьируется от 1 до 4 мм в диаметре. На каждый квадратный миллиметр поверхности приходится 156 анализируемых точек. Такого количества достаточно для оценки излучения при переходе от практически полностью прямого к диффузному с энергетической освещенностью общего потока в пределах от 10 мВт/см^2 до 150 мВт/см^2 .

Регистрируемые в натуральных условиях перераспределения облученности на экране сопоставлялось с соответствующими изменениями в соотношении компонент «прямое/диффузное» в световом потоке [3]. Одновременно контролировалась и энерговыработка фотоэлектрических контуров гибридного модуля. Полученные данные применялись в качестве контрольных при моделировании параметров солнечного излучения на имитаторе в лабораторных условиях.

В лабораторных условиях регистрация ВАХ контуров гибридного модуля проводилась с использованием имитатора, формирующего коллимированный (с угловой расходимостью 32 угл. мин) световой поток [5]. При установке в световой поток экранов, рассеивающих излучение, обеспечивался плавный переход от превалирования прямой компоненты (не менее 90% в общем потоке излучения, поступающем на линзовую панель гибридного модуля) к абсолютно диффузной.

Запись и анализ изображений фокального пятна при освещенностях 40 - 100 мВт/см² для полного потока излучения (AM1.5D), создаваемого на имитаторе при разных соотношениях прямой и диффузной компонент, и их сопоставление с полученными в натуральных условиях при близких балансах «прямое/диффузное» показали достаточно высокую эффективность как самого способа формирования диффузной компоненты на имитаторе, так и метода разработанного контроля.

В работе представлены основные варианты моделирования полного потока излучения на имитаторе с оценением энергетических долей для прямой и диффузной компонент и результаты измерений гибридного модуля в лабораторных и натуральных условиях.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00158

Список литературы

1. Martin A. Green, Ewan D. Dunlop, Gerald Siefer, Masahiro Yoshita, Nikos Kopidakis, Karsten Bothe, Xiaojing Hao. Solar cell efficiency tables (Version 61). *Prog Photovolt Res Appl.*2023;31:3–16
2. Juan F. Martínez, Marc Steiner, Maike Wiesenfarth, Frank Dimroth. 4-Terminal CPV Module Capable of Converting Global Normal Irradiance into Electricity. *AIP Conference Proceedings* 2012, 090005 (2018)
3. Шварц М. З., Андреева А. В., Андроников, Д. А., Емцев К. В., Ларионов В. Р., Нахимович М. В., Покровский П. В., Садчиков Н. А., Яковлев С. А., Малевский Д. А. Гибридный концентраторно-планарный фотоэлектрический модуль с гетероструктурными солнечными элементами. *Письма ЖТФ*, т.49, 4, 2023, с. 15 – 19
4. Juan F. Martínez, Marc Steiner, Maike Wiesenfarth, Tobias Fellmeth, Tobias Dörsam, Martin Wiese, Stefan W. Glunz, Frank Dimroth. Development and outdoor characterization of a hybrid bifacial HCPV module. *Prog Photovolt Res Appl.* 2020;28(5):349-357.
5. V. R. Larionov, D. A. Malevskii, P. V. Pokrovskii, V. D. Rumyantsev «Measuring Complex for Studying Cascade Solar Photovoltaic Converters and Concentrator Modules on Their Basis», *Tech. Phys.*, v. 60, № 6, pp. 891-896, 2015.
6. Maxim Z. Shvarts, Viktor M. Emelyanov, Mariia V. Nakhimovich, Andrey A. Soluyanov, Viacheslav M. Andreev. Compromise Solutions for Design and Technology of Fresnel Lenses as Sunlight Concentrators. *AIP Conference Proceedings* 2149, 070011 (2019);
7. W. T. Xie, Y. J. Dai, R. Z. Wanga, K. Sumathy. Concentrated solar energy applications using Fresnel lenses: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 15 (2011) 2588–2606

Влияние дисбаланса фотогенерированных токов на вольт-амперные характеристики многопереходных солнечных элементов

Минтаиров М. А.¹, Евстропова В.В.¹, Минтаирова С.А.¹, Шварца М.З.¹ и Калужного Н.А.¹,
¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: mamint@mail.ioffe.ru

Работа посвящена влиянию эффекта дисбаланса фотогенерированных (ФГ) токов многопереходных (МП) солнечных элементов (СЭ) на световые вольт-амперные характеристики. В работе показано, что наличие эффекта дисбаланса ФГ токов сказывается в том, что зависимость напряжения от тока отклоняется от логарифмической. При последовательном соединении субэлементов суммарная (т.е. для всего МП СЭ) ВАХ получается вольтовым сложением ВАХ субэлементов (сложением напряжений при одинаковом токе). При этом, в случае когда субэлементы генерируют одинаковый ФГ ток (случай баланса ФГ токов), ВАХ всегда состоит из линейных в логарифмическом по току участков (сегментов). Допущение постоянного баланса ФГ токов лежит в основе многих упрощенных моделей, используемых для расчёта и анализа характеристик МП СЭ. [1–6]. В работе, на основании методики описания ВАХ МП СЭ [7] используется моно-экспоненциальное выражение для каждого сегмента ВАХ МП СЭ с дисбалансной вольтовой добавкой, которая обращается в ноль при полном балансе ФГ токов.

$$V(J) = \frac{AkT}{q} \left(\frac{J_g - J}{J_0} \right) + \frac{kT}{q} \left(\left[\frac{\kappa J_g - J}{J_g - J} \right]^{A_i} \right)$$

где, i -номер субэлемента, n -количество субэлементов, A_i - диодный коэффициент субэлемента, $A = \sum A_i$, $J_0 = \sqrt[n]{\prod J_{0,i}^{A_i}}$, - ток насыщения сегмента, $J_{0,i}$ - ток насыщения субэлемента, k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура, q - заряд электрона, κ_i - коэффициент дисбаланса субэлемента (равен отношению ФГ тока субэлемента к ФГ току СЭ), J_g - ФГ ток СЭ.

Модель применена для расчёта ВАХ генераторной части МП СЭ (под генераторной частью подразумевается суммарная ВАХ фотовольтаических р-п переходов, т.е. суммарная ВАХ генерирующих полезную энергию элементов структуры фотопреобразователя). Для простоты анализа расчёт сделан для двух-переходного СЭ. В расчёте токи всех р-п переходов определялись только диффузионным механизмом протекания тока. В качестве субэлементов выбраны GaInP и GaAs, в которых фотогенерированные токи при единичной кратности составляли $J_{g,1}=0.015 \text{ A/cm}^2$ и $J_{g,2}=0.02 \text{ A/cm}^2$. Дисбаланс ФГ токов взят типичным для трёх-переходных СЭ, на практике именно двух-переходные СЭ обычно являются сбалансированными. Диффузионные токи насыщения в расчётах равны $J_{01}=1 \cdot 10^{-25} \text{ A/cm}^2$ и $J_{02}=1 \cdot 10^{-20} \text{ A/cm}^2$ для GaInP и GaAs р-п переходов соответственно.

Расчёт показал, что в случае дисбаланса фотогенерированных токов ВАХ МП СЭ не содержит логарифмических сегментов и не может быть корректно описана распространёнными много-экспоненциальными моделями. Величина отклонения значительно зависит от мощности падающего излучения.

Список литературы

1. Kinsey G S, Hebert P, Barbour K E, Krut D D, Cotal H L and Sherif R A, Concentrator multijunction solar cell characteristics under variable intensity and temperature *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 16 503–8, 2008
2. Mintairov M A, Evstropov V V, Mintairov S A, Shvarts M Z, Kozhukhovskaia S A and Kalyuzhnyy N A, Manifestation of counteracting photovoltaic effect on IV characteristics in multi-junction solar cells *J. Phys.: Conf. Ser.* 917 052034, 2017
3. Andreev V M, Grebenshchikova E A, Dmitriev P A, Ilinskaya N D, Kalinovsky V S, Kontrosh E V, Malevskaya A V and Usikova A A, Effect of postgrowth techniques on the characteristics of triple-junction InGaP/Ga(In)As/Ge solar cells *Semiconductors* 48 1217–21, 2014
4. Adelhelm R and Bücher K, Performance and parameter analysis of tandem solar cells using measurements at multiple spectral conditions *Solar Energy Materials and Solar Cells* 50 185–95, 1998
5. Domínguez C, Antón I and Sala G, Multijunction solar cell model for translating I-V characteristics as a function of irradiance, spectrum, and cell temperature *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 18(4):272 - 284, 2010
6. Fernández E F, Siefer G, Almonacid F, Loureiro A J G and Pérez-Higueras P, A two subcell equivalent solar cell model for III–V triple junction solar cells under spectrum and temperature variations *Solar Energy* 92 221–9, 2013
7. Mintairov M A, Kalyuzhnyy N A, Evstropov V V, Lantratov V M, Mintairov S A, Shvarts M Z, Andreev V M and Luque A, The segmental approximation in multijunction solar cells *IEEE J. Photovoltaics* 5 1229–36, 2015

Гибридные солнечные модули: сравнение результатов лабораторных и натуральных исследований

Малеvский Д. А.¹, Ларионов В.Р.¹, Нахимович М.В.¹, Покровский П.В.¹, Садчиков Н.А.¹, Березанов Д.Ю.¹, Шварц М.З.¹.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: dmalevsky@gmail.com

Существенный прогресс в развитии концептуальных решений для гибридных (концентраторно-планарных) солнечных модулей [1] определяется необходимостью повышения не только общей энергоотдачи фотоэлектрических установок с высокоэффективными концентратными модулями с системами слежения, но и снижением амплитуды колебаний энерговыработки при преобладании в поступающем излучении смешанной «прямое +диффузное» или только диффузной компонент.

Характерной особенностью гибридных солнечных модулей (ГСМ) является наличие двух независимых электрических контуров – концентраторного и планарного, построенных на основе гетероструктурных АЗВ5 [2] и Si (с-Si, НJT, PERC, IBC) [3], соответственно. Для оценки общего энергетического эффекта следует независимо исследовать характеристики и выполнять мониторинг фотоэлектрических параметров контуров.

В работе представлены результаты лабораторных и натуральных исследований ГСМ включающем 2 фотоэлектрические ячейки на базе Si-НJT структур с двухсторонней чувствительностью (планарный контур) и 32 концентраторные ячейки (40 × 40 мм каждая), объединенных в формате 4 × 8 [4].

В натуральных условиях эффективность работы контуров ГСМ оценивалась при продолжительном мониторинге в составе солнечной фотоэнергоустановки с системой слежения [5]. Технические средства системы мониторинга обеспечивали измерение уровня солнечной радиации (общей, прямой, диффузной, альbedo), температур окружающего воздуха и фотоэлектрических преобразователей. Обеспечивалась долговременная работа ГСМ в режиме отбора максимальной мощности (электрическое “охлаждение”) при регулярном измерении вольтамперных характеристик, что повышало точность получаемых оценок для фотоэлектрических параметров и энергопроизводительности. Одновременно контролировалась точность наведения системы в направлении «на Солнце» [6]. Получены данные по эффективности работы контуров модуля: концентраторного относительно прямой компоненты солнечного излучения, для планарного – относительно общего, диффузного и альbedo. Рассмотрены режимы работы гибридного модуля: чистое небо, переменная и полная облачность. При чистом небе добавка по выработке электроэнергии планарным контуром (кпд=18%, AM1.5G, 200 Вт/м²) составила порядка 10% относительно концентраторного (кпд=32%, AM1.5D, 1000 Вт/м²), а при переменной облачности (доля диффузного излучения более 60%) добавка оказывалась сравнимой или превышала энерговыработку концентраторного контура. Получены оценки по увеличению энерговыработки планарным контуром в режиме односторонней и двухсторонней фоточувствительности: фиксировался рост фототока контура более чем в 2 раза.

В лабораторных условиях значительное внимание уделялось моделированию параметров солнечного излучения для его последующего преобразования фотоэлектрическими контурами

ГСМ. При воспроизведении параметров прямого солнечного излучения (1000 Вт/м², AM1.5D, угловая расходимость 32 угл. мин) использовался имитатор [7], функционал которого был доработан в соответствии с особенностями двухконтурной конструкции объекта исследований. Для моделирования диффузной компоненты подбирались экраны с различными рассеивающими свойствами и уровнями прозрачности, которые вводились в световой поток. В соответствии с полученными в натуральных условиях данными проведено моделирование облученности для контуров ГСМ. Концентраторный контур испытывался при засветке коллимированным потоком 500 - 1000 Вт/м² (AM1.5D). Получена (с учетом температурной корректировки) хорошая сходимость результатов измерений концентраторного контура с данными натуральных исследований при сопоставимых освещенностях. Для планарного контура соответствие наблюдалось в варианте «односторонняя фоточувствительность». Моделирование условий работы планарного контура для режима облученности «диффузное + альbedo» требует дальнейшего развития экспериментальной методики и инструментария.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00158.

Список литературы

1. Kyu-Tae Lee, et al., Concentrator photovoltaic module architectures with capabilities for capture and conversion of full global solar radiation, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 113(51), E8210-E8218, 2016, DOI: 10.1073/pnas.1617391113.
2. Zh.I. Alferov, V.M. Andreev, M.Z. Shvarts, "Chapter 8. III-V Solar Cells and Concentrator Arrays", Springer Ser. Opt. Sci. v.140, 2020, pp 133-174, <https://doi.org/10.1007/978-3-030-22864-4>.
3. A.S. Abramov, D.A. Andronikov, S.N. Abolmasov and E.I. Terukov, "Chapter 7. Silicon Heterojunction Technology: a key to high efficiency solar cells at low cost", Springer Ser. Opt. Sci. v.140, 2020, pp. 113 - 132, <https://doi.org/10.1007/978-3-030-22864-4>.
4. Шварц М.З., Андреева А.В., Андроников Д.А., Емцев К.В., Ларионов В.Р., Нахимович М.В., Покровский П.В., Садчиков Н.А., Яковлев С.А., Малевский Д.А., письма ЖТФ, т.49, 4, 2023, с. 15 – 19, DOI: 10.21883/PJTF.2023.04.54520.19438.
5. M. Shvarts, V. Larionov, P. Pokrovskiy, N. Sadchikov, D. Malevskiy, "Monitoring complex for concentrator photovoltaic installation with a tracking system", *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.*, 578, 012054 (2020). DOI: 10.1088/1755-1315/578/1/012054.
6. Malevskiy D.A., Pokrovskiy P.V., Larionov V.R. Malevskaya A.V. Andreev V.M., "Control System of Sun-Tracking Accuracy for Concentration Photovoltaic Installations", *Tech. Phys. Lett.* 46, 523–525 (2020). <https://doi.org/10.1134/S1063785020060073>.
7. V.R.Larionov, D.A.Malevskii, P.V.Pokrovskii, V.D.Rumyantsev «Measuring Complex for Studying Cascade Solar Photovoltaic Converters and Concentrator Modules on Their Basis», *Tech. Phys.*, v. 60, № 6, pp. 891-896, 2015.

Физика квантовых структур

Многофотонный эффект франца-келдыша в ленте графена кресельного типа

Монозон Б.С.¹, Федорова Т.А.¹, Schmelcher P.²

¹Санкт-Петербургский морской технический университет

²Zentrum fur Optische Quanten Technologien, The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging

e-mail: borismonozon@mail.ru

Рассматривается лента графена кресельного типа нанометровой ширины d в электрическом поле $F(t) = F_0 \cos \omega t + F_1$, являющемся суперпозицией периодического во времени поля сильной электромагнитной волны с амплитудой F_0 и частотой ω и слабого постоянного поля $F_1 \ll F_0$. Оба поля поляризованы параллельно оси ленты. Лента характеризуется полупроводниковым, т.е. содержащим запрещенную зону, релятивистским законом дисперсии, в котором скорость света заменена скоростью Ферми $v_F = 10^6$ м/с. В отсутствие полей энергетический спектр носителей представляет собой последовательность одномерных подзон,

ответвляющихся от уровней размерного квантования $\varepsilon_{N_j} = \left| N_j - \frac{1}{3} \right| \frac{\pi \hbar v_F}{d}; N_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ в электронной $j = e$ и дырочной $j = h$ зонах [1]. Разрешенными для данной ориентации полей являются переходы между подзонами с одинаковыми номерами $N_e = N_h = N$ [2]. Аналитически рассчитывается вероятность межподзонного перехода $w_N^{(l)}(F_0, F_1; t)$ с участием $l = 1, 2, \dots$ фотонов. Основное внимание уделяется влиянию постоянного поля F_1 (эффект Франца-Келдыша) на вычисленную в работе [3] вероятность перехода в отсутствие стационарной компоненты.

Основу математического аппарата составляет нестационарное уравнение Дирака для электрона, движущегося в поле $F(t)$ в двух подрешетках графена и в двух долинах вблизи двух неэквивалентных точек Дирака [3]. В дальнейшем это уравнение решается в резонансном приближении, при котором энергия фотонов $l\hbar\omega$, индуцирующих переход, совпадает с квазиэнергией возникшей электрон-дырочной пары. В этом случае вычисления сводятся к решению хорошо известной двухуровневой задачи [4] с модифицированными начальными условиями. В отличие от случая нулевого постоянного поля в них используются не внутризонные плоские волны свободной частицы в периодическом электрическом поле $F_0 \cos \omega t$, а, описываемые функцией Эйри, состояния электрона в однородном поле F_1 , учитывающие межподзонное тунелирование. Полученная вероятность межподзонного перехода

$w_N^{(l)}(F_0, F_1; t) = C \frac{1 - \cos \Omega_{NI}^{(R)} t}{2}$ оказывается гармонической функцией, осциллирующей во времени с частотой Раби $\Omega_{NI}^{(R)}(F_0)$. Вследствие слабости постоянного поля эта частота совпадает с вычисленной ранее при $F_1 = 0$ [3]. Для большого числа фотонов l частота $\Omega_{NI}^{(R)}(F_0)$ представляется в аналитическом виде. При больших значениях параметра Келдыша

$\gamma_N = \frac{\omega \Delta_N}{2eF_0 v_F}$, в котором $\Delta_N = 2\varepsilon_N \simeq l\hbar\omega$ - запрещенный промежуток между N -ми подзонами, переход носит многофотонный характер, с частотой $\Omega_{NI}^{(R)}(F_0) = \frac{2}{3} \omega \exp(l)(4\gamma_N)^{(-l)} (\sin \frac{l\pi}{2})^2; \gamma_N \gg 1$. Явные выражения для частоты Раби позволяют сделать следующие выводы. Многофотонные межподзонные переходы возможны лишь при участии нечетного числа фотонов l . Частота Раби $\Omega_{NI}^{(R)}$ оказывается значительно меньше частоты

световой волны ω . С ростом амплитуды электрического поля F_0 и ширины ленты d частота Раби возрастает [3] причем зависимость от ширины оказывается более сильной, чем от напряженности поля.

Постоянное электрическое поле существенно влияет на амплитуду осцилляций Раби $C(F_1) \sim Ai^2(-\beta_N/W_N)$. Эта амплитуда определяется функцией Эйри, аргумент которой

есть отношение частотного сдвига $\beta_N = \hbar\omega - \Delta_N$ к характерной энергии $W_N = \left(\frac{\hbar^2 e^2 F_1^2}{2\mu_N} \right)^{1/3}$,

где $\mu_N \sim \frac{\hbar}{v_F d}$ приведенная эффективная масса подзон, связанных переходом. Выше края поглощения ($\beta_N > 0$) амплитуда становится осциллирующей функцией смещения β_N с периодом $\Delta\beta_N = 2.78W_N$, в то время как ниже края ($\beta_N < 0$) интенсивность перехода $\sim C(F_1)$

убывает как $\exp\left(-\frac{4}{3} \left[\frac{-\beta_N}{W_N} \right]^{3/2}\right)$. В отсутствие постоянного поля амплитуда осцилляций выше и ниже края $\beta_N = 0$ становится равной $C(0) = 1$ и $C(0) = 0$, соответственно. В поле F_1 эффективный край смещается в длинноволновую сторону на энергию $\Delta\beta_N^{(-)} = -1.60 W_N$, а основной осцилляционный пик сдвигается в область коротких волн на расстояние $\Delta\beta_N^{(+)} = 1.02 W_N$. Эти оба сдвига необходимо учитывать при экспериментальном изучении осцилляций Раби вблизи спектрального края в присутствии постоянного электрического поля.

Оценки, сделанные для основного межподзонного перехода $N = 0$ в ленте шириной $d = 2$ нм под влиянием излучения микрометрового диапазона с полем $F_0 = 360$ кВ/см и частотой $\omega = 3.3 \cdot 10^{14} c^{-1}$ ($\lambda = 5.7$ мкм, $l = 3, \gamma_0 = 3$) дают для частоты Раби $\Omega_0^{(R)} = 2.54 \cdot 10^{12} c^{-1}$. В поле $F_1 = 40$ кВ/см характерная энергия $W_N = 12,5$ мэВ. Из приведенных данных следует, что осцилляции Раби в кресельной ленте графена вполне наблюдаемы в лабораторных условиях. Отметим также, что даже слабое по сравнению с полем световой волны постоянное электрическое поле существенно влияет как в качественном, так и в количественном отношении на форму спектра межподзонных осцилляций Раби.

Список литературы

1. L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006)
2. Ken-ichi Sasaki, K. Kato, Y. Tokura, K. Oguri and T. Sogawa, Phys. Rev. B **84**, 085458 (2011)
3. B. S. Monozon and P. Schmelcher, Phys. Rev. B **105**, 115435 (2022)
4. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц “Квантовая механика” т. 3, Наука М, 1974

МАГНИТНЫЕ МИНИЗОНЫ В СВЕРХРЕШЕТКАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУДИРАКОВСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Кухарь Е. И.¹, Крючков С.В.^{1,2}, Котельников Е.Ю.¹

¹ВолгГТУ

²ВГСПУ

e-mail: eikuhar@yandex.ru

Уникальность так называемых дираковских кристаллов обусловлена наличием в гамильтониане носителей заряда слагаемых, связывающих импульс частиц с их псевдоспиновой степенью свободы. Это приводит к многообразию электродинамических и оптических эффектов, которые вызывают интерес у исследователей и в настоящее время [1,2]. Относительно недавно получен новый тип 2D кристаллов – полудираковские кристаллы, тензор эффективных масс у которых существенно анизотропен: только в одном из направлений носители заряда проявляют себя как безмассовые фермионы [3,4]. С целью проектирования генераторов высокочастотного излучения и ряда других оптоэлектронных устройств большое внимание уделяется изучению графеновых структур со сверхрешеткой (СР). Наличие узкой зоны проводимости позволяет СР проявлять нелинейные электрические свойства при относительно слабых полях. Образование магнитных минизон и их влияние на магнитотранспорт в графене изучено в [5]. Преимуществом СР [5] является возможность управления шириной минизоны, а, следовательно, и электронным транспортом, за счет изменения внешнего магнитного поля без вмешательства во внутреннюю структуру рабочего материала. Ниже представлены результаты исследования особенностей магнитных минизон в СР на основе полудираковского кристалла. Модельный гамильтониан его носителей заряда имеет вид

$$\hat{H} = v_F p_x \hat{\sigma}_x + \left(\Delta_x + \frac{p_y^2}{2m} \right) \hat{\sigma}_y,$$

где $\sigma_{x,y,z}$ – матрицы Паули, m – эффективная масса носителя в направлении y . Считаем далее, что $\Delta_x > 0$. Тогда параметр Δ_x приобретает смысл полуширины энергетической щели. Последнюю считаем пространственно модулированной с периодом d : $\Delta_x = \Delta - \Delta_0 \cos(2\pi x/d)$, $\Delta_0 \ll \Delta$. В такой ситуации уровни Ландау уширяются и образуются магнитные минизоны. Вычисления, выполненные в первом порядке теории возмущений, приводят к следующему выражению для закона дисперсии в минизоне:

$$\varepsilon_n(p_y) = w_n - \Delta_0 e^{-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2}} L_n \left(\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \right) \cos \left(\frac{2\pi p_y \lambda^2}{\hbar d} \right).$$

Здесь w_n – энергия n -го уровня Ландау в отсутствие модуляции щели, $L_n(\xi)$ – полиномы Лагерра, $\lambda = \sqrt{c\hbar/eH}$ – ларморовская длина, H – напряженность магнитного поля, $\alpha = 2\pi\Lambda/d$, $\beta = \hbar v_F/\Delta\Lambda$, $\Lambda = \lambda/\kappa$, $\kappa = \sqrt[4]{\Delta/mv_F}$. Для типичных значений параметров структуры $d \sim 10^{-6}$ см, $v_F \sim 10^8$ см/с, результат справедлив, если $m \gg 10^{-29}$ г, $\Delta \gg 0.006$ эВ, а температура $T \ll 200$ К.

Кроме того магнитное поле должно быть таким, чтобы в пределах периода СР могло укладываться небольшое натуральное число ларморовских радиусов (не больше 1 – 3). При этом индукция магнитного поля не должна превышать 50 Тл. Согласно полученному закону дисперсии, для СР на основе полудираковского кристалла (в отличие от дираковского [5]) ширина магнитной минизоны растет с увеличением ширины запрещенной зоны. С

использованием выражения для $\varepsilon_n(p_y)$ изучены особенности осцилляций проводимости материала с изменением напряженности магнитного поля.

Список литературы

1. Kim Y., Lee J. D., Ultrafast dynamics of phase and topology in Dirac semiconductors, *Materials Today Physics*, vol. 21, 100525, 2021.
2. Fu B., Ma D.-S., He C., Zhao Y.-H., Yu Z.-M., Yao Y., Two-dimensional Dirac semiconductor and its material realization, *Physical Review B*, vol. 105, 035126, 2022.
3. Khandelwal A., Mani K., Karigerasi M. H., Lahiri I., Phosphorene – The two-dimensional black phosphorous: Properties, synthesis and applications, *Materials Science and Engineering B*, vol. 221, 17-34, 2017.
4. Mawrie A., Muralidharan B., Direction-dependent giant optical conductivity in two-dimensional semi-Dirac materials, *Physical Review B*, vol. 99, 075415, 2019.
5. Nasir R., Sabeeh K., Tahir M., Magnetotransport in a periodically modulated graphene monolayer, *Physical Review B*, vol. 81, 085402, 2010.

Внутризонное поглощение излучения свободными дырками в напряженных в направлении [111] квантовых ямах GaAs/InGaAs

Павлов Н. В.^{1,2}

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ»

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: pavlovnv@mail.ioffe.ru

В настоящее время возобновился интерес к изучению напряженных полупроводниковых гетероструктур GaAs/InGaAs, выращенных в направлении [111] [1,2]. Рост структур в направлении, отличном от [100], позволяет модифицировать оптические характеристики оптоэлектронных приборов, добавляя еще одну степень свободы для оптимизации их параметров. Однако при приложении упругих напряжений в направлениях, отличных от [100], возникает существенное пьезоэлектрическое поле, максимальное значение которого может достигать $6 \cdot 10^5$ В/см [1] для направления [111]. Возникающее пьезополе очень негативно влияет на оптические характеристики гетероструктур вследствие весьма существенного уменьшения значения интеграла перекрытия волновых функций электрона и тяжелой дырки.

В настоящей работе проведено исследование процесса межподзонного поглощения излучения свободными тяжелыми дырками с переходом в спин-отщепленную зону в квантовых ямах GaAs/InGaAs, напряженных в направлении [111]. Ранее автором была решена аналогичная задача для направления [100] [3].

Для решения данной задачи впервые была получена система кейновских уравнений с учетом упругих напряжений в направлении [111], а также несферичности 8-зонного кр гамильтониана. Учет упругих напряжений был проведен согласно теории Бира-Пикуса. Получены аналитические решения для энергетических спектров и волновых функций носителей заряда. На основании полученных результатов рассчитаны подзоны размерного квантования и матричные элементы оптических переходов между подзонами тяжелых и спин-отщепленных дырок.

Произведен расчет коэффициента межподзонного поглощения излучения различной поляризации тяжелыми дырками с переходом в квазидискретный и непрерывный спектр спин-отщепленных дырок. Показано, что влияние пьезоэлектрического поля приводит к смещению пика поглощения в область коротких длин волн. Так как оптический переход происходит между двумя дырочными состояниями, то под влиянием пьезоэлектрического поля волновые функции начального и конечного состояний не разделяются в пространстве, и значение интеграла перекрытия уменьшается незначительно. По сравнению с поглощением в квантовых ямах аналогичного состава, выращенных в направлении [100], наблюдается уменьшение коэффициента межподзонного поглощения, которое становится более значительным с ростом массовой доли индия. Уменьшение коэффициента поглощения более выражено для поглощения света

ТЕ-поляризации, чем для ТМ-поляризации. Также данный эффект гораздо более выражен для поглощения с переходом в квазидискретный спектр спин-отщепленных дырок. Зависимость от ширины квантовой ямы является немонотонной: максимальное уменьшение коэффициента поглощения излучения ТЕ-поляризации происходит при ширине квантовой ямы 7 нм, затем происходит уменьшение величины эффекта вплоть до значения ширины квантовой ямы 13 нм, далее идет незначительное увеличение. Однако для всех рассмотренных случаев влияние

пьезоэлектрического поля на значение коэффициента поглощения оказывается гораздо менее значительным, чем для межзонных переходов.

Список литературы

1. H. Saidi, O. Zitouni, S. Ridene, *Materials Science and Engineering B*, 273, 115400, (2021).
2. H. Soto-Ortiz, G. Torres-Miranda, R. Muraoka-Espíritu, *Optics Communications*, 529, 129081, (2023).
3. Н.В. Павлов, Г.Г. Зегря, *ПЖТФ*, 45 (10), 9 (2019).

Фотолюминесценция асимметричных систем CdTe/CdMnTe и CdTe/CdMgTe с квантовыми ямами, разделенными широкими барьерами

Философов Н. Г.¹, Будкин Г.В.², Вербин С.Ю.¹, Агекян В.Ф.¹, Karczewski G.³, Серов А.Ю.¹, Штром И.В.¹ и Резницкий А.Н.²

¹СПбГУ

²ФТИ им. Иоффе

³Institute of Physics PAN

e-mail: *n.filosofov@spbu.ru*

Изучены низкотемпературные спектры фотолюминесценции (ФЛ) и возбуждения ФЛ (ВФЛ) двух систем с квантовыми ямами (КЯ) CdTe, разделенными барьерами CdMnTe (образец *A*) и CdMgTe (образец *B*). Образец *A* состоит из трех КЯ CdTe шириной 4 монослоя (МС), 8 МС и 16 МС (КЯ-1, 2, 3, соответственно, 1 МС CdTe = 0.324 nm), разделенных барьерами Cd_{0.55}Mn_{0.45}Te шириной 20 nm. Образец *B* состоит из четырех КЯ CdTe шириной 4, 8, 16 и 32 МС, разделенных барьерами Cd_{0.65}Mg_{0.35}Te такой же ширины. В спектрах ФЛ наблюдаются полосы, соответствующие излучательной рекомбинации экситонов в каждой КЯ. Наблюдаемые энергии полос ФЛ сопоставлены с расчетными значениями, полученными в приближении прямоугольной КЯ. В этих расчетах приняты во внимание экситонный эффект и влияние внутренних деформаций. Различие экспериментальных и расчетных значений не превышает ожидаемого при учете монослойных флуктуаций ширины КЯ.

Исследованы спектры ВФЛ образца *A* при детектировании сигнала в максимумах полос экситонного излучения КЯ CdTe при $T = 15$ К. Обращает на себя внимание то, что в спектре ВФЛ КЯ-3, помимо перехода между основными состояниями тяжелой и легкой дырок и электрона этой КЯ наблюдается сильная особенность около 1.89 эВ, совпадающая с энергией перехода легкая дырка-электрон в спектре КЯ-2. Это означает, что существует перенос энергии электронного возбуждения из КЯ шириной 8 МС в КЯ шириной 16 МС, причем интенсивность соответствующего сигнала сопоставима с интенсивностями сигналов основных переходов в КЯ-3. Есть также свидетельства переноса энергии между состояниями КЯ-1 и КЯ-2.

В спектрах ВФЛ образца *B* также наблюдается структура, свидетельствующая о переносе энергии из узких КЯ в более широкие КЯ. Отметим, что аналогичные результаты наблюдались и в работе [1], где исследована система CdTe/CdMnTe с несколькими КЯ CdTe, разделенными барьерами шириной 50 nm. В [1] высказано предположение, что перенос возбуждения обусловлен динамическими магнитными взаимодействиями между экситонами и ионами Mn в барьерных слоях. Однако, мы установили, что перенос экситонов между КЯ, разделенными толстыми барьерами, наблюдается и в немагнитных системах, к которым предложенный в [1] механизм неприменим. Этот перенос должен резко усиливаться при совпадении энергий определенных электронных уровней широкой и узкой КЯ. Полагаем, что эффективный перенос энергии между КЯ, разделенными широкими барьерами, обусловлен резонансным ферстеровским механизмом [2].

Список литературы

1. M. Godlewski et al., J. Crystal Growth 184/185 (1998) 957.
2. A. N. Poddubny and A. V. Rodina, ЖЭТФ, 149 (2016) 614.

HOM effect for monochromatic and non-monochromatic photons

Цыкарева Ю. В.¹, Макаров Д.Н.¹

¹САФУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: *aisonoka@gmail.com*

Эффект Хонг-Оу-Менделя (НОМ эффект) был открыт и экспериментально продемонстрирован Hong et al. в 1987 г. [1] и теоретически описан в работе [2]. В данной работе будет рассмотрена его реализация на линейном светоделителе, состоящем из подложки и двух волноводов на ней, близко сходящихся в центре, с двумя входными и выходными портами, и с детекторами на каждом выходном порте. Суть рассматриваемого эффекта состоит в том, что две идентичные однофотонные волны попадают на светоделитель в соотношении 1:1 (с коэффициентами отражения R и коэффициентом пропускания T , близкими к $1/2$), по одной на каждый входной порт. Когда фотоны идентичны, они компенсируют друг друга. НОМ эффект часто имеет место быть как в фундаментальных работах по квантовой механике, так и в практических реализациях квантовых технологий [3]. Найдено простое теоретическое объяснение НОМ эффекта, основанное на постоянных коэффициентах R и T и статистическом распределении бозонных фотонов [4, 5]. В этой интерпретации нас не интересует, что происходит с падающими фотонами в светоделителе. Для этого считаем без потерь с постоянными коэффициентами R и T (т.е. «обычные» светоделители), причем светоделитель является источником двух других фотонов, подчиняющихся бозонной статистике. Выбирая значения коэффициентов $R = T = 1/2$ и подставляя их в выражение для волновой функции фотонов на выходных портах светоделителя из [4], получается, что в этом случае фотоны выходят парами, т.е. вероятность будет $P = 1/2$ для каждого из детекторов, что противоречит классическому представлению о разделении двух лучей света с коэффициентами $R = T = 1/2$. В классическом представлении при $R = T = 1/2$ может быть 4 варианта: 1. первый и второй фотоны попадают на детекторы 1 и 2 соответственно; 2. первый и второй фотоны попадают на детекторы 2 и 1 соответственно; 3. первый и второй фотоны попадают на детектор 1; 4. Первый и второй фотоны попадают на детектор 2.

В итоге имеется 4 равновероятных события, что, очевидно, дает вероятность $P = 1/4$ для каждого из них. Такое явление называется НОМ эффектом и это хороший способ проверить квантовые свойства не только фотонов, но и других частиц. Другими словами, в НОМ эффекте вероятность попадания фотонов в первый детектор, а для второго детектора $P_{1,2} = (R - T)^2$, при равных R и T будет равен нулю. Если рассматривать немонохроматические фотоны, но идентичные (частотно-зависимые светоделители), то выбирая $R = T = 1/2$, мы учитываем частотозависимые флуктуации коэффициентов светоделителя, которые ранее не принимавшиеся в расчет. Эти вопросы будут подробно обсуждаться в этой работе.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-72-10151.

Список литературы

1. Hong, C. K., Ou, Z. Y. & Mandel, L. Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference. *Phys. Rev. Lett.* 59, 2044–2046 (1987).
2. Ou, Z.-Y. J. *Multi-Photon Quantum Interference* (Springer, New York, 2007).
3. Politi, A., Cryan, M. J., Rarity, J. G., Yu, S. & O'Brien, J. L. Silica-on-silicon waveguide quantum circuits. *Science* 320, 646–649 (2008).
4. Makarov, D. N. Theory of hom interference on coupled waveguides. *Optics Letters* 45, 6322–6325 (2020).

5. Makarov, D. N. Fluctuations in the detection of the hom effect. *Scientific Reports* 10, 20124 (2020).

Увеличение максимальной температуры генерации стимулированного излучения до 0°С в диапазоне 3-5 мкм в HgCdTe структуре с оптимизированным дизайном квантовых ям и волновода

Уточкин В. В.¹, Мажукина К.А.^{1,2}, Себина А.А.^{1,2}, Янцер А.А.^{1,2}, Морозов С.В.^{1,2}

¹ИПФ РАН

²ННГУ им. Н.И. Лобачевского

e-mail: xenonum@bk.ru

В настоящее время актуальна проблема разработки компактных и сравнительно дешёвых лазеров для перестраиваемой диодной лазерной спектроскопии (TDLAS), которая является удобной и распространённой методикой анализа газовых смесей. С прикладной точки зрения интересно окно прозрачности атмосферы 3–5 мкм, на которое приходится множество линий различных газов-поллютантов, таких как HCl, CO, CO₂, NO_x, SO₂ и CH₄. Из полупроводниковых лазеров в данном диапазоне широко представлены различные каскадные лазеры, для которых уже продемонстрирована возможность генерации при комнатной температуре в среднем ИК диапазоне. В то же время технологическая сложность роста многокаскадных структур наряду с проблемой перестройки по длине волны оставляют пространство для разработки альтернативных полупроводниковых лазерных систем.

Одной из таких систем являются межзонные лазерные диоды или оптические конвертеры на основе твёрдых растворов HgCdTe с квантовыми ямами (КЯ). В них за счет подбора параметров КЯ (толщины и состава) можно получить E_g от сотен до единиц мэВ. В отличие от ККЛ, в HgCdTe структурах возможно осуществлять перестройку по энергии кванта в широком диапазоне (десятки-сотни мэВ) за счёт температурной перестройки E_g . Нами ранее в подобных структурах диапазона 3–5 мкм была продемонстрирована генерация однопроходowego стимулированного излучения (СИ) и реализация на их основе микродискового волновода, в спектре которого наблюдался характерный модовый состав. В то же время максимальная температура генерации СИ в них лежала ниже комнатной температуры, в области, соответствующей термоэлектрическому охлаждению (210–240К для диапазона длин волн СИ 3.5–4 мкм). С практической точки зрения интересны приборы с рабочей температурой не ниже комнатной, поэтому целью данной работы является исследование структуры с оптимизированными параметрами КЯ и волновода, нацеленными на генерацию СИ при более высоких температурах.

Для объяснения затухания СИ с ростом температуры в HgCdTe структурах с КЯ были предложены различные механизмы, в том числе разные виды безызлучательной оже-рекомбинации: а) классическую оже-рекомбинацию "как в объёмном полупроводнике", б) беспороговые процессы с переходами носителей заряда в континуумы барьерных слоёв, в) квазипороговые "резонансные" процессы с переходом носителей в более высокие подзоны размерного квантования, а также г) сложную динамику разогрева носителей с ростом температуры и мощности оптического возбуждения. Для подавления обозначенных выше негативных явлений были предложены различные оптимизации дизайна структуры - во-первых, переход (с сохранением E_g) к как можно более узким бинарным КЯ HgTe с выраженной областью симметрии законов дисперсии в $k=0$, подавляющей классическую оже-рекомбинацию,

во-вторых, увеличение разрыва зон на гетерогранице КЯ (за счёт роста содержания Cd в барьерах) для увеличения температуры, при которой беспороговые оже-процессы становятся энергетически возможны, в-третьих, улучшение фактора оптического ограничения волноводной моды (Г-фактора) при помощи инжиниринга волновода и роста числа КЯ в структуре для понижения порога генерации СИ и ослабления разогрева носителей.

В работе исследуется волноводная HgCdTe структура с узкими (2.8 нм) квантовыми ямами HgCdTe с содержанием Cd порядка 2-3 процентов каждая. Барьеры между квантовыми ямами и волноводный слой имели высокое содержание Cd - порядка 85%, а число квантовых ям было увеличено по сравнению со структурами предыдущего дизайна до 20-ти. За счёт внесённых оптимизаций в дизайн структуры, а также определённых улучшений методики роста в структуре удалось пронаблюдать однопроходное СИ до длины волны 3.5 мкм при температурах вплоть до 273K (0°C), что на 30-60 кельвинов улучшает предыдущие результаты. В работе сравниваются старый и оптимизированный дизайны, а также приводятся оценки возможности дальнейшего увеличения температуры вплоть до комнатной.

Работа поддержана РФФ (грант 22-12-00310).

Температурные зависимости фотолюминесценции InGaAs/GaAs квантовых яма-точек с временным разрешением

Мельниченко И.А.^{1,2}, Надточий А.М.¹, Иванов К.А.¹, Махов И.С.¹, Максимов М.В.^{1,2}, Минтаиров С.А.³,
Калюжный Н.А.³, Крыжановская Н.В.¹, Жуков А.Е.¹

¹НИУ ВШЭ

²Академический университет

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: ivankomel550@gmail.com

За последние десятилетия, достигнут значительный прогресс в разработке и широком внедрении полупроводниковых приборов на основе низкоразмерных структур, таких как квантовые точки и квантовые ямы, которые позволяют получать приборы с уникальными характеристиками, такие как полупроводниковые лазеры с низкими пороговыми токами, однофотонные источники, солнечные элементы [1-2]. Исследование динамики носителей заряда в таких низкоразмерных структурах становится важным как для реализации высокоскоростных устройств передачи данных, требующих максимально быстрой релаксации носителей, так и для устройств, требующих длительного времени квантовой когерентности состояний и, соответственно, увеличения времени релаксации и рекомбинации. В данной работе мы исследуем кинетику фотолюминесценции (ФЛ) с субпикосекундным разрешением при различных температурах в новом типе наноструктур - InGaAs квантовых яма-точках (КЯТ), представляющих собой неоднородные InGaAs квантовые ямы с модуляцией толщины и состава (30-50% In), выращенные на вицинальных подложках GaAs [3].

Полупроводниковая гетероструктура была выращена методом МOC-гидридной эпитаксии на подложке GaAs, разориентированной на 6°. Исследуемый образец состоял из одного слоя КЯТ в центре GaAs матрицы толщиной 600 нм, ограниченной барьерными слоями Al_{0.4}Ga_{0.6}As толщиной 50 нм. Сверху был выращен слой GaAs толщиной 5 нм для предотвращения окисления AlGaAs слоя. КЯТ были сформированы путем осаждения слоя In_{0.4}Ga_{0.6}As толщиной 8 монослоев. Исследования фотолюминесценции с временным разрешением были выполнены методом ап-конверсии, позволяющим получать временное разрешение до сотни фемтосекунд. В качестве источника фемтосекундного излучения использовался титан-сапфировый лазер "Coherent Mira 900" с длительностью импульса 130 фс, частотой повторения 76 МГц и с длиной волны 780 нм. Детектирование оптического сигнала ап-конверсии производилось в режиме синхронного детектирования с использованием монохроматора и фотоэлектронного умножителя. Для низкотемпературных измерений использовался гелиевый криостат Montana S-50 замкнутого цикла.

Были получены временные зависимости ФЛ на длине волны основного состояния КЯТ для диапазона температур от 10 до 300 К. Типовой вид зависимости сигнала ФЛ КЯТ от времени можно разделить на три этапа: первоначальный этап нарастания интенсивности за единицы пикосекунд; затем участок «плато» продолжительностью ~2.5 нс (для комнатной температуры), который объясняется равновесной ситуацией — подпиткой носителями заряда уровней КЯТ из матрицы GaAs, что уравнивает рекомбинацию в КЯТ; и, наконец, моноэкспоненциальное затухание сигнала ФЛ.

С понижением температуры для полученных зависимостей характерны следующие изменения: время нарастания сигнала ФЛ существенно увеличивается (с ~10 до ~30 пс), максимальная

интенсивность ФЛ «плато» увеличивается, а его продолжительность, наоборот, сокращается. Также, с понижением температуры время затухания ФЛ КЯТ существенно снижается: с ~5 нс до ~1 нс.

С использованием скоростных уравнений для носителей заряда в двухуровневой системе было проведено моделирование экспериментальных зависимостей, в результате которого было обнаружено, что возможно удовлетворительно описать временные зависимости ФЛ без привлечения безызлучательной рекомбинации, при этом время излучательной рекомбинации в КЯТ составляет 700 пс, а величины энергетических барьеров для выброса электронов и дырок из КЯТ составляет 50 и 150 мэВ, соответственно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10002, <https://rscf.ru/project/22-72-10002/>.

Список литературы

1. Senellart P., Solomon G., White A. High-performance semiconductor quantum-dot single-photon sources //Nature nanotechnology. – 2017. – Т. 12. – №. 11. – С. 1026-1039.
2. Lin Y. H., Kiang J. F. Efficiency improvement of PIN solar cell by embedding quantum dots //Progress In Electromagnetics Research. – 2014. – Т. 146. – С. 167-180.
3. Maximov M. V. et al. Light emitting devices based on quantum well-dots //Applied Sciences. – 2020. – Т. 10. – №. 3. – С. 1038.

Формирование локализованных состояний в двойной квантовой точке на крае двумерного топологического изолятора с магнитными барьерами

Лаврухина Е. А.¹, Хомицкий Д.В.¹

¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

e-mail: ekaterina.a.lavrukhina@gmail.com

Открытие такого квантового состояния вещества, как топологический изолятор (ТИ), сильно повлияло на исследования в физике конденсированных сред, благодаря их уникальным фундаментальным свойствам и технологическим применениям [1]. ТИ составляют особый класс материалов, характеризующихся изолирующей объемной дисперсией и проводящими бесщелевыми геликоидальными поверхностными состояниями, защищенными от рассеяния симметрией обращения времени. Первое экспериментальное подтверждение проводимости спинового и зарядового тока вдоль края 2D ТИ наблюдалось в композитных квантовых ямах HgTe/CdTe после их теоретического предсказания в ВNZ-модели с инвертированными подзонами [2]. Топологически защищенные состояния представляют большой интерес, в том числе в плане их локализации при помощи магнитных барьеров для реализации квантовых точек, как альтернативного инструмента хранения и обработки информации.

На протяжении ряда лет нами разрабатывается модель локализованных состояний в квантовых точках, сформированных на краю двумерного ТИ на основе квантовой ямы HgTe/CdTe, с помощью магнитных барьеров конечной проницаемости. В частности, недавно была микроскопически обоснована модель влияния магнитного домена (барьера), расположенного вблизи края ТИ, на топологически защищенные одномерные краевые состояния [3]. В рамках нашей модели мы показали возможность формирования конечного числа энергетических уровней в одномерной квантовой точке. Мы изучили параметры зонной структуры и времена энергетической релаксации [4], а также вычислили отклики электронных состояний на периодическое электрическое поле, моделирующее управляющие импульсы в будущей модели кубита на основе таких квантовых точек [5]. Была определена важная роль состояний непрерывного спектра в нашей модели с магнитными барьерами конечной высоты. Также была изучена зависимость времени жизни квазистационарных состояний между магнитными барьерами от их ширины [6].

В данной работе мы представим дальнейшее исследование связанных состояний, но уже в двойной квантовой точке, сформированной тремя магнитными барьерами на крае 2D ТИ. Обнаружено два характерных режима формирования энергетических уровней в зависимости от ориентации векторов намагниченности магнитных доменов, формирующих двойную квантовую точку. Оказалось, что для параллельной ориентации векторов намагниченности относительно центрального барьера, наблюдаются только дублетные уровни энергии, а изменение высоты барьеров и ширины квантовых ям позволяют управлять количеством таких дублетов. При антипараллельной ориентации векторов намагниченности наблюдается противоположный случай, когда спектр двойной квантовой точки становится близок к эквидистантному. Также проведена аналитическая оценка расстояний между дублетными уровнями в простейшем случае симметричных квантовых точек в зависимости от высоты центрального барьера.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания FSWR-2023-0035.

Список литературы

1. X-L Qi and S-C Zhang, «Topological insulators and superconductors», Rev. Mod. Phys. V. 83, P.1057 (2011).
2. B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, «Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells» // Science, V. 314, 5806, P.1757 (2006).
3. D.V. Khomitsky, A.A. Konakov and E.A. Lavrkhina, «Formation of bound states from the edge states of 2D topological insulator by macroscopic magnetic barriers» // Journal of Physics Condensed Matter, V.34, 405302 (2022).
4. Д.В. Хомицкий, А.А. Чубанов, Е.А. Лаврухина, Н. Нжийа, «Релаксация энергии в квантовой точке на краю топологического изолятора», ФТП, т.51, вып.11, с.1557 (2017).
5. Д.В. Хомицкий, К.С. Кабаев, Е.А. Лаврухина, «Спиновый резонанс в квантовой точке на краю топологического изолятора при учёте состояний континуума», ЖЭТФ, т.158, вып.5(11), с.929 (2020).
6. D.V. Khomitsky, E.A. Lavrkhina, «Quasistationary states in a quantum dot formed at the edge of a topological insulator by magnetic barriers with finite transparency», Journal of Phys: Conf. Ser. 2103, 012201 (2021).

Обобщённые граничные условия для нахождения энергетического спектра и волновых функций электрона в полупроводниковых нанокристаллах в диэлектрической матрице

Русских К. И.^{1,2}, Родина А.В.²

¹СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, ²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: kirill.rusских99@gmail.com

Работа посвящена исследованию энергетического спектра и волновых функций (в.ф.) электрона в полупроводниковых сферических нанокристаллах (НК), окруженных диэлектрической средой. Стандартная модель сферической квантовой точки с бесконечным потенциальным барьером [1], предполагающая исчезновение в.ф. электрона на границе НК, не позволяет учесть специфику структуры, связанную с различием эффективной массы электрона внутри НК m_A и в окружающей диэлектрической среде m_B , которую положим равной массе свободного электрона m_0 . В работе исследованы НК с высоким, но конечным потенциальным барьером. Рассмотрены два типа граничных условий (ГУ) для волновых функций на поверхности НК, гарантирующих самосопряженность Гамильтониана задачи:

1. Стандартные граничные условия (СГУ), предполагающие равенство радиальных компонент в.ф. и нормальной

$$\frac{1}{m_A} \frac{dR_l^A}{dr} [a] = \frac{1}{m_B} \frac{dR_l^B}{dr} [a]$$

компоненты скорости

2. Обобщённые граничные условия (ОГУ) для бесконечного потенциального барьера [2]

$$R_l(r)|_{r=a} = \frac{m_0}{m_A} A \frac{dR_l(r)}{dr} \Big|_{r=a},$$

где A – параметр, имеющий размерность длины, при этом параметр A не зависит от радиуса a и симметрии состояния l .

Проведён теоретический расчёт энергий E_l/E_q и волновых функций электронных состояний s, p, d симметрий, характеризующихся значениями орбитального момента $l=0, 1, 2$, соответственно. За единицу энергии принято значение наименьшего энергетического уровня s-симметрии в НК с бесконечным потенциальным барьером $E_q = \pi^2 \hbar^2 / 2m_A a^2$. Расчёт выполнен для сферической квантовой точки в зависимости от безразмерной высоты барьера $X_u = U/E_q$ и для разных отношений масс электрона внутри и снаружи НК $\mu = m_A/m_B$.

Численно показано, что даже при очень больших значениях X_u , стандартные граничные условия, соответствующие приближению бесконечно высокого барьера, плохо описывают энергетический спектр, особенно для возбужденных состояний. Показано, что при уменьшении отношения масс μ , увеличивается отклонение расчетных уровней энергии от асимптотических ($E_l^\infty = \gamma_l^2 \hbar^2 / 2m_A a^2$, где γ_l – первый корень сферической функции Бесселя l -го порядка), равных значениям энергий в бесконечно глубокой яме. При этом вероятность найти электрон на границе значительно возрастает. Вероятность найти электрон вне квантовой точки при больших U и малых μ пренебрежимо мала.

Показано, что при больших значениях X_u и малых значениях μ энергетический спектр и в.ф. для $l=0, 1, 2$, рассчитанные с применением СГУ, хорошо описываются ОГУ с параметром $A/a \neq 0$.

Определена однозначная связь параметра A/a с X_u и μ , такая что $A/a = (1/\pi) \sqrt{\mu/X_u}$.

Определена область применения ОГУ. Для НК малого размера применение ОГУ позволяет избежать явного описания быстрого убывания в.ф. за пределами НК, не допустимого в рамках метода эффективных массы и приближения огибающих в.ф. Показано, что при $X_{ii} \rightarrow \infty$ имеет место предельный переход к $A/a=0$, соответствующий модели бесконечного потенциального барьера.

Рассчитана энергетическая поправка, связанная с потенциалом самодействия V^{self} в методе заряда-изображения [3], в зависимости от радиуса НК и разницы диэлектрических проницаемостей в матрице ϵ_B и внутри НК ϵ_A . Этот эффект приводит к увеличению энергии уровня в НК большого размера и может компенсировать понижение энергетического уровня, обусловленного конечной высотой барьера и разницей масс электрона. Выяснено, что для НК с малым радиусом a , поправка, связанная с потенциалом самодействия, может быть рассмотрена в рамках теории возмущений с использованием ОГУ, в то время как для НК с большим радиусом, более справедливо будет решение самосогласованной задачи.

Работа выполнена в рамках РНФ № 23-12-00300

Список литературы

1. Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос, ФТП, том. 40, 337-340, 1982 г.
2. A. Rodina, A. Alekseev, Al. L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer, Phys. Rev. B., том. 65, 125302, 2002 г.
3. Г.Б. Григорян, А.В. Родина, Ал. Л. Эфрос, ФТТ, том. 32, 3512-3521, 1990 г.

Туннелирование Ландау-Зинера и температурные эффекты в квантовом сверхпроводниковом нейроне

Бастракова М. В.^{1,2}, Д. А. Рыбин¹, Д. С. Пашин¹, П. В. Пикунов¹, А. Е. Щеголев^{1,3,4}, Н. В. Кленов^{2,5}, И. И. Соловьев^{2,3}

¹ННГУ

²Российский квантовый центр

³НИИЯФ МГУ

⁴МТУСИ

⁵МГУ им. М. В. Ломоносова

e-mail: mar.denisenko@gmail.com

Сверхпроводниковые технологии уже в настоящее время демонстрируют потенциал их применения в создании квантовых искусственных нейронных сетей (ИНС) и элементов цифровой электроники [1]. Главным преимуществом сверхпроводниковой технологии по сравнению с CMOS является низкое энергопотребление и быстродействие. В работе предлагается реализации квантового сверхпроводникового нейрона в составе многослойного персептрона на основе джозефсоновских контактов без резистивного шунтирования и изучается влияние диссипативных и температурных процессов на выходные характеристики.

В работе на основе аналитического и численного расчета проведён детальный анализ динамических процессов, влияющих на функцию активации квантового нейрона. Естественно при наличии внешнего поля расстояние между состояниями системы зависит от времени и будет происходить сближение основного и первого возбужденного уровня в моменты нарастания и спада внешнего магнитного поля. Показано, что сигмоидальное преобразование приложенного магнитного потока в средний выходной ток может быть получено как для одноямного, так и для двухямного потенциального профиля нейронной ячейки, что не реализуется при классическом режиме работы этой системы [2]. Изучена роль паразитных эффектов Ландау-Зинеровского туннелирования, происходящих в случае двухямного потенциального профиля нейронной ячейки, на процессы переключения с учётом инерции (ёмкости в цепи). Кроме того, показано, что влияние начального квантового состояния нейрона на вид функции активации особенно заметно для случая суперпозиции базовых состояний, которые интерферируют друг с другом со временем, что отражается в осцилляциях среднего выходящего тока. На основе численного решения общенного уравнения для матрицы плотности было показано, что диссипация подавляет колебания на функции активации подобно тому, как затухание подавляет плазменные колебания в классических джозефсоновских системах. Произведен подбор и оптимизация параметров сверхпроводниковой цепи типа персептрон для реализации «сигмоидной» функции активации, которая наиболее удобная для алгоритмов обучения нейронной сети. Для найденных параметров схемы (ёмкости, индуктивностей) рассчитана температурная карта (область характерных рабочих температур) и выделены области функционирования схемы с оценкой быстродействия. Выработаны рекомендации по функционированию схемы с учетом данных эффектов.

Список литературы

1. M. Schneider, E. Toomey, G. Rowlands *et al.* // *Supercond. Sci. Technol.* **35**, 053001(2022).
2. M.V. Bastrakova, A.A. Gorchavkina, A.E. Schegolev *et al.* // *Symmetry* **13(9)**, 1735(2021).

Эффективная фотогенерация спина в графене на магнитной подложке

Денисов К. С.¹, Голеницкий К.Ю.¹, Рожанский И.В.¹,

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *denisokonstantin@gmail.com*

Важной особенностью атомарно-тонких слоев двумерных материалов, таких как графен, является высокая чувствительность к их материальному окружению. Для двумерных структур резко возрастает роль эффектов близости (проксимитизация), при которых свойства двумерного слоя существенно изменяются в зависимости от типа близлежащих материалов [1]. В данной работе теоретически исследуются оптически индуцируемые спиновые явления в структурах на основе монослоя графена, расположенного на подложке магнитного изолятора. Ключевой особенностью данных систем является значительный эффект магнитной близости, который приводит к модификации спектра носителей заряда и формированию равновесной спиновой поляризации электронного газа в двумерном слое. Более того, понижение симметрии на интерфейсе благоприятствует усилению эффектов спин-орбитального взаимодействия и появлению новых спин-зависимых слагаемых в Гамильтониане, не представленных в системах с параболическим спектром. В работе исследованы особенности фотогенерации спиновой поляризации дираковских электронов за счет электрической компоненты падающего излучения при наличии интерфейсного спин-орбитального взаимодействия. Теоретически рассмотрены микроскопические механизмы, ответственные за оптически индуцируемые переходы с переворотом спина и установлено, что спиновый резонанс в данном классе структур имеет ряд интересных особенностей, связанных со спецификой зонной структуры и симметрией интерфейсного спин-орбитального взаимодействия. Продемонстрировано, что в результате эффекта близости заметно возрастает эффективность фотогенерации спиновой поляризации в слое графена в терагерцовом и дальнем инфракрасном диапазонах длин волн. Предложена феноменологическая теория среднего поля, описывающая особенности поглощения света в графене при переходах с переворотом спина. Изучены оптические свойства гетероструктур на основе графена с магнитной подложкой, обусловленные процессами генерации спина при поглощении света.

Работа выполнена в рамках проекта № 22-22-20082 (соглашение РНФ № 22-22-20082 от 25.03.2022, соглашение о предоставлении регионального гранта № 23/2022 от 14.04.2022)

Список литературы

1. I. Zutic et al., *Materials Today*, **22**, 85 (2019).

Внутризонные переходы в нанокристалле кремния с атомом висмута

Фомичев С. А.¹, Дербенёва Н. В., Бурдов В. А.

¹ННГУ им. Н.И. Лобачевского

e-mail: *sergeifomichev.batman@gmail.com*

Улучшение излучательных свойств кремниевых наноструктур и, в частности, нанокристаллов, по-прежнему является одним из вызовов для современной физики и технологии. Ранее было показано, что увеличения скоростей межзонной излучательной рекомбинации можно добиться за счет внедрения в нанокристалл мелкой донорной примеси, например, лития или фосфора, что было продемонстрировано ранее как экспериментально [1], так и теоретически (см., например, обзор [2] и приведенные там ссылки). Следует, однако, иметь в виду, что присутствие донора в нанокристалле проявляется двояко. С одной стороны, ион донора может ускорять межзонные излучательные переходы, но, с другой стороны, при возбуждении хотя бы одного электрона из валентной зоны в зону проводимости, атом донора (за счет эмиссии в зону проводимости своего "лишнего" электрона), фактически, открывает канал безызлучательной релаксации через Оже-процесс, который, как правило, является гораздо более быстрым, чем радиационный межзонный переход. "Запуск" быстрого Оже-процесса приводит к эффективному гашению фотолюминесценции.

В связи с этим в данной работе рассматривается альтернативный вариант использования доноров в кремниевых нанокристаллах для получения в них световой эмиссии. Как хорошо известно, основное состояние для доноров пятой группы является сильно отщепленным от всего остального спектра в зоне проводимости, что обусловлено короткодействующим потенциалом донора и наличием долино-орбитального взаимодействия. Так, согласно нашим расчетам, выполненным с использованием нестационарной теории функционала плотности [3], в нанокристалле $\text{Si}_{34}\text{H}_{36}\text{Bi}$ величина энергии синглет-триплетного расщепления составляет 1.1 эВ, что примерно вдвое меньше ширины оптической щели нанокристалла. При этом синглет-триплетные излучательные переходы, идущие внутри зоны проводимости, разрешены тетраэдрической симметрией системы и имеют достаточно высокие скорости. Важно также, что всегда можно подобрать энергию кванта света фотовозбуждения так, чтобы она была больше энергии расщепления, но существенно меньше ширины оптической щели. В этом случае переходы электрона в результате поглощения кванта света оказываются чисто внутризонными, что не приводит к образованию дополнительных электронно-дырочных пар в системе. Соответственно, полностью исключается Оже-процесс и, как следствие, квантовая эффективность фотонной генерации в такой системе существенно возрастает.

Работа была поддержана грантом РФФ 23-22-00275.

Список литературы

1. V.A. Belyakov, A.I. Belov, A.N. Mikhaylov, D.I. Tetelbaum, V.A. Burdov, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 045803 (2009).
2. N.V. Derbenyova, A.A. Konakov, V.A. Burdov, *J. Lumin.* **233**, 117904 (2021).
3. M.E. Casida, in *Recent Developments and Applications of Modern Density Functional Theory*, edited by J.M. Seminario (Elsevier Science, Amsterdam), 391 (1996).

Смена знака циркулярной поляризации рамановского рассеяния света с испусканием LO фонона в квантовых ямах (Cd, Mn)Te

Козлов И. И.¹, Козырев Н.В.¹, Намозов Б.Р.¹, Кусраев Ю.Г.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *ivankozloff@bk.ru*

Исследовано резонансное рамановское рассеяние света (PPC) с испусканием 1LO и 2LO фононов при возбуждении циркулярно-поляризованным светом в гетероструктуре CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe с квантовой ямой (КЯ) шириной 40Å, туннельно-связанной с КЯ шириной 80 Å. Барьеры сформированы на основе разбавленного магнитного полупроводника Cd_{1-x}Mn_xTe с номинальной концентрацией марганца $x=0.18$ (18%). Исследования проводились при температуре 1.5 К.

При возбуждении образца циркулярно-поляризованным светом с энергией квантов, превышающей энергию экситонного перехода приблизительно на $\hbar\omega_{LO} = 21$ мэВ (энергия LO-фонона) в спектре вторичного излучения, на фоне тусклой (из-за туннелирования в широкую яму) ФЛ, имеющей тот же знак поляризации что и у возбуждающего света, наблюдаются две узкие линии с противоположным возбуждающему свету знаком циркулярной поляризации (отрицательная поляризация). Эти линии соответствуют резонансному процессу PPC с испусканием одного или двух LO-фононов. Смена знака циркулярной поляризации свидетельствует о наличии специфических процессов спиновой релаксации, исследование которых представляет большой интерес. При понижении энергии возбуждающих квантов, степень циркулярной поляризации линий PPC на 1LO и 2LO постепенно становится положительной.

Мы предполагаем, что это явление связано с двойным резонансом PPC с испусканием LO фононов между состояниями «лёгкого» и «тяжёлого» экситона. Оценки показывают, что расщепление лёгкой и тяжёлой дырки в изучаемой КЯ составляет 19 мэВ, что близко к энергии LO-фонона. При резонансном возбуждении состояния лёгкого экситона циркулярно-поляризованным светом происходит быстрая релаксация его в состояние тяжёлого экситона, сопровождающееся испусканием LO фонона. При этом проекция углового момента меняется на противоположную. Это объясняется тем, что такой процесс требует релаксации одной лишь дырки, что делает его более вероятным. По мере понижения энергии возбуждающих фотонов, вместе с лёгкими дырками, также начинают рождаться тяжёлые экситоны, у которых процесс релаксации не сопровождается изменением знака циркулярной поляризации излучения. Это объясняет монотонное изменение степени циркулярной поляризации 1LO и 2LO линий.

Effect of a bifurcation meter on microwave transmission through a one-dimensional chain of qubits

Pashin D. S.¹, Bastrakova M. V.¹

¹UNN

e-mail: *pashindmi@gmail.com*

At present, experiments on nondemolition measurement of arrays of noninteracting qubits placed in a one-dimensional open waveguide [1] have been implemented, as well as metamaterials have been created that allow controlling the band gap of such a waveguide by tuning the qubits frequencies [2]. This work is devoted to the generalization of the technique for nondemolition measurement of superconducting qubit state by a Josephson bifurcation amplifier when interacting with single-photon fields in one-dimensional a microwave waveguide. Particular attention is paid to the influence of the meter on the transmission and reflection factors of the microwave signal in such a system. It is assumed that the control of the states of qubits occurs due to their capacitive coupling with the resonator.

To describe and study microwave transport processes, we find it convenient to use the projection operator formalism and the method of the effective non-Hermitian Hamiltonian to solve the generalized scattering problem. In the one-photon approximation there is the probability of photon absorption by a qubit in addition to the probabilities of transmission and reflection. Note that one of the first applications of this method for investigating microwave transmission through a one-dimensional qubit chain was presented in the paper [3].

It was found that with an increase in occupation numbers of the measuring oscillator initial state, the effective frequency of the qubit shifts in a nontrivial way. When considering two qubits with measuring oscillators, the dependences of the amplitude of the excitation probability of an individual qubit on various system parameters were found. In array of two identical qubits, the resonance curve could become asymmetric. This effect is associated with the interference of the incident and reflected photons.

The work was supported by UNN within the framework of the strategic academic leadership program “Priority 2030” of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

References

1. V. Schmitt, X. Zhou, K. Juliusson, B. Royer, A. Blais, P. Bertet, D. Vion, and D. Esteve, Multiplexed readout of transmon qubits with Josephson bifurcation amplifiers. *Phys. Rev. A* 90, 062333 (2014).
2. J.D. Brehm, A.N. Poddubny, A. Stehli, T. Wolz, H. Rotzinger, and A.V. Ustinov, Waveguide bandgap engineering with an array of superconducting qubits. *npj Quantum Mater.* 6, 10 (2021).
3. Ya.S. Greenberg, and A.A. Shtygashev, Non-Hermitian Hamiltonian approach to the microwave transmission through a one-dimensional qubit chain. *Phys. Rev. A* 92, 063835 (2015).

Исследование влияния формы импульса накачки на задержку включения в квантовых каскадных лазерах

Фельчина-Абдулразак С. Х.¹, Соколовский Г.С.¹, Дюделев В.В.¹, Михайлов Д. А.¹, Врубель И. И.¹, Черотченко Е.Д.,¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *sausana95@gmail.com*

Квантово-каскадные лазеры (ККЛ) применяются в самых различных отраслях промышленности, сельского хозяйства, здравоохранения, охраны окружающей среды и многих других научных и технических областях. Одним из основных фундаментальных ограничений, влияющих на эффективность лазера и такие основные параметры, как пороговые характеристики и задержка включения, является низкая теплопроводность активной зоны и, как следствие, существенный перегрев активной области.[1] В данной работе мы исследуем влияние импульсов с различным передним фронтом нарастания тока, и теоретически и экспериментально показываем связь переднего фронта импульса накачки с нагревом активной области ККЛ, а также исследуем влияние нагрева на задержку включения. Предложенная теория согласуется с экспериментом, а также с моделированием с помощью скоростных уравнений.[2] . Исследование выполнено в рамках проекта РНФ №23-29-00930

Список литературы

1. Vrubel I.I. et al, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2308.10013>
2. Cherotchenko, E. D., et al. "Observation of long turn-on delay in pulsed quantum cascade lasers." *Journal of Lightwave Technology* 40.7 (2022): 2104-2110.

Физика плазмы, гидро- и аэродинамика

Development of a plasma electron spectroscopy (PLES) method for the detection of complex chemical compounds

Kudryavtsev A.A., C. Zhou, J. Yao, A.I. Saifutdinov, C. Yuan
School of Physics, Harbin Institute of Technology, PRC

e-mail: *akud53@mail.ru*

Most industrial, medical and scientific applications require small-sized portable gas analyzers that can operate in non-vacuum conditions and can be used both as detectors in gas chromatography and for monitoring gaseous media in various technological processes and power plants.

The method of plasma electron spectroscopy (PLES), developed in works [1-4] for detecting impurities in a buffer inert gas, is one of the possible approaches to solving this problem. In the PLES method the identification of atomic or molecular impurities is based on selective registration of groups of fast electrons, released in the reaction of Penning ionization of the impurity particles by helium metastable atoms.

The energy spectra of the penning electrons represent narrow peaks on the electron energy distribution function (EDF) near the energy E_p of their appearance [1-4]. Since the ionization potential E_i of each type of atom or molecule is a well-known atomic constant and it is different for different substances, measuring the energy of penning electrons E_p and using the well-known excitation energy of helium metastable atoms (19.82 eV), it is possible to identify the atoms or molecules A of the unknown impurity by their ionization potential E_i (qualitative analysis): $E_i = 19.82 - E_p$. By absolute measurements and/or calibration of the signals from these peaks, it is possible to quantify impurities A (quantitative analysis). Since the energies of the signals from different impurities differ, the obtained results show that different impurities can be detected simultaneously. Therefore, the PLES method will be very useful when creating compact gas analyzers with a simple vacuum pumping system based on a miniature vacuum pump.

Experimental studies were carried out in miniature discharge tubes that were placed in a vacuum chamber. Tungsten rods with a radius of 1.5 mm were used as electrodes. An additional measuring electrode (wall probe) made of a molybdenum wire diameter of 0.3 mm in the form of a ring of radius 1.5 mm was located strictly in the middle of the electrodes. The interelectrode distance varied from 1 to 4 mm depending on the gas pressure.

The obtained results demonstrate the extension of the capabilities of the PLES method for the determination of small impurities of complex chemical compounds on the example of alcohol and ammonium nitrate. Since the ionization potentials of different impurities differ from each other, the PLES method can simultaneously detect several impurities at the same time in one measurement.

At the same time, the device for the practical implementation of the PLES method has a relatively simple technical design compared to other analysis methods.

It should also be noted the possibility of creating (or upgrading) a detector for gas chromatography using the PLES method, based on measurements of the energy of characteristic electrons from reactions of Penning ionization of impurities by metastable helium atoms.

References

1. A.A. Kudryavtsev. A new method of gas analysis using Penning-electron energy spectra, in Book of abstracts International Workshop "Results of fundamental research for investments" IWRFR1'99, Russian Technologies for Industrial Applications, St. Petersburg, Russia, 24-26 May 1999, p. 94.
2. A. A. Kudryavtsev and A. B. Tsyganov, U.S. patent 7,309,992 (2007).
3. A. Kudryavtsev, P. Pramatarov, M. Stefanova and N. Khromov, JINST 7, 07002 (2012).
4. C. Zhou, J. F. Yao, A. I. Saifutdinov, A. A. Kudryavtsev, C. X. Yuan and Z. X. Zhou, Plasma Sources Sci. Technol. 30, 117001 (2021).

Особенности формирования плазмы в импульсе цезиевого импульсно-периодического разряда.

Богданов А. А.¹, Марциновский А. М.¹, Столяров И. И.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *a.bogdanov@mail.ioffe.ru*

В докладе представлены результаты спектроскопических измерений в различные моменты времени по импульсу линейно нарастающего тока (с разрешением 1 мкс) в импульсно-периодическом разряде в парах цезия. Ранее было показано, что, несмотря на радиальную неоднородность плазмы, излучение рекомбинационного континуума позволяет достаточно надежно определять температуру электронов на оси разрядной трубки и концентрацию плазмы [1]. В настоящей работе была улучшена методика таких измерений. Это позволило получить новые данные о трансформации спектра континуума в самом начале импульса и в распаде (в том числе дальнем). Исследования показали, что одним из основных факторов, влияющих на характер развития разряда, является давление паров цезия. Радиальная структура разряда (распределенный или контрагированный) определяется давлением, а также геометрией разрядного промежутка (диаметры разрядной трубки и электродов, межэлектродное расстояние) [2]. Из-за высокого давления компонент ($P_{Cs} = 10-100$ Торр, $P_{Xe} = 40$ Торр) концентрация плазмы при ее распаде уменьшается в паузе между импульсами всего лишь до $\sim 10^{13}$ см⁻³, благодаря чему удалось наблюдать спектр рекомбинационного континуума в самом начале импульса. Этот спектр показал появление избытка быстрых электронов в функции распределения электронов по энергии в самом начале импульса, когда напряжение между электродами достигает значения 3 кВ. Этот избыток проявляется в характере зависимости интенсивности излучения континуума I_λ от длины волны (в координатах $\ln(I_\lambda \lambda^3)$ от $1/\lambda$). В диапазоне длин волн 4500-5300 Анг (соответствует малым энергиям электронов до 0,4 эВ) эта зависимость линейна, что указывает на максвелловскую функцию распределения электронов в этом диапазоне. Эту часть ФРЭ можно описать параметром T_e (температура), определяемым наклоном этого прямолинейного участка. При меньших длинах волн (больших энергиях рекомбинирующих электронов) рассматриваемая зависимость отклоняется от линейной в сторону превышения, что и означает появление избытка электронов в данной области энергий. Быстрый рост концентрации плазмы в течение первых микросекунд приводит к ускорению максвеллизации электронов, ФРЭ становится максвелловской во все большем диапазоне энергий. Это приводит к линейности указанной зависимости во всем регистрируемом диапазоне длин волн. Это означает, что T теперь описывает всю наблюдаемую ФРЭ. С этого момента в импульсе осмысленные значения температуры T можно определять по интенсивностям излучения континуума только на двух длинах волн, что резко сокращает время измерений. Этим методом была зарегистрирована зависимость температуры от времени (в интервале от 4-6 мкс и до конца импульса) для разных режимов разряда. Подводимая к разряду мощность линейно нарастает, интегральное излучение континуума также линейно нарастает. При этом температура возрастает незначительно, иногда сохраняется практически постоянной, а иногда даже уменьшается в конце импульса. Эти факты указывают на то, что значительная часть мощности, подводимой к разряду, выносится излучением континуума [3].

Список литературы

1. Богданов А. А., Гавриш С. В., Марциновский А.М., Столяров И. И. Диагностика плазмы сильноточного цезиевого разряда с помощью рекомбинационного континуума. Успехи прикладной физики, том 8, №5, 326-332, 2020.
2. Bogdanov A. A., Gavrish S. V., Martsinovsky A. M. and Stolyarov I. I. Influence of contraction of a cesium pulse-periodic discharge on its luminous efficacy and spectral properties. Journal of Physics: Conf. Ser. **2103** 012220 2021.
3. Бакшт Ф. Г., Лапшин В. Ф. Генерация видимого излучения с непрерывным спектром импульсно-периодическим разрядом высокого давления в цезии. Успехи прикладной физики, том 5, №6, 525-533, 2017.

Использование электронного циклотронного резонанса для получения высокоскоростных плазменных потоков

Ташаев Ю. Н.¹,

¹Росбиотех

e-mail: *tashayevyn@mgupp.ru*

В магнитоплазодинамических дуговых ускорителях (МПДУ) высокоскоростные плазменные потоки создаются в ускорительном канале, в который подаётся плазмообразующий газ [1]. В стандартной комплектации конструктивно ускорители выполнены в виде коаксиально расположенных внутри соленоида электродов – катода и анода. Катод размещается на оси ускорителя вблизи горла анода, имеющего форму профилированного сопла Ловаля. Соленоид создаёт в межэлектродном промежутке осесимметричное расходящееся магнитное поле. Такая конструкция обеспечивает ускорение плазмы при её расширении через сопло во внешнее пространство как под действием термо ЭДС, так и под действием силы Ампера, возникающей при взаимодействии тока, текущего в плазме, с магнитным полем соленоида. В работе [2] описан тепловой неизотермический ускоритель плазмы, представляющий собой модифицированный МПДУ, в котором отсутствует термоэмиссионный катод, а разряд возникает при подаче в объёмный резонатор СВЧ энергии от магнетрона, работающего в квазиимпульсном режиме. Анод расположен внутри резонатора и представляет собой отрезок запердельного волновода [3]. Электромагнит создавал в приосевой области горла анода (горла магнитного сопла) однородное магнитное поле, величина которого определялась частотой высокочастотного (В.Ч.) поля СВЧ генератора ($\omega_c \sim \omega$). Созданная путём электронного циклотронного резонанса плазма с горячими электронами ($T_e \gg T_i$) ускорялась при расширении в «магнитном сопле». Для определения порогового среднеквадратичного значения напряжённости высокочастотного электрического поля и мощности магнетрона СВЧ генератора, необходимой для создания плазмы, рассматривалось движение электрона в скрещённых \vec{E} и \vec{B} полях при учете его столкновений с атомами и молекулами. Предполагалось, что в области горла магнитного сопла, где возникает разряд, магнитное поле, создаваемое соленоидом, однородно и направлено вдоль оси симметрии ускорителя, а В.Ч. электрическое поле, также являясь однородным, направлено по радиусу. В результате решения уравнения движения электрона при соответствующем выборе начальных условий, определена траектория его дрейфового движения, представляющая собой эллипс, расположенный в плоскости, перпендикулярной оси симметрии ускорителя. Получено выражение для $\vec{\mu}$ –магнитного момента тока, переносимого вращающимся по эллиптической орбите электроном, совершающим вынужденные колебания с частотой электромагнитной волны. Из формулы для $\vec{\mu}$ следует, что $\vec{\mu}$ и \vec{B} антипараллельны. Это обусловлено диамагнитными свойствами заряженных частиц при искривлении траектории под действием силы Лорентца. Рассмотрев аналогично движение ионов, отметим, что в модифицированном МПДУ В.Ч. электрическое поле, перпендикулярное магнитному, увеличивает диамагнетизм плазмы, который в отсутствие В.Ч. поля обуславливается лишь циклотронным вращением заряженных частиц. В работе получена формула для $\langle de/dt \rangle$ –усреднённой за период В.Ч. поля скорости нарастания тепловой энергии электронов, приведена оценка времени τ_i , необходимого для возбуждения атомов рабочего тела – аргона. Пороговое значение напряжённости электрического В.Ч. поля определялось из соотношения $\tau_i \leq R^2/D_L$, где R –радиус критического сечения разрядной камеры, D_L –коэффициент диффузии электронов поперек магнитного поля в предположении замагниченности электронов. Мощность, необходимая для зажигания и поддержания разряда,

определяется скоростью выделения джоулева тепла в разрядной камере: $P = \langle d\varepsilon/dt \rangle n_e V_c$, где V_c – объем резонатора, n_e – концентрация электронов, максимальное значение которой вычисляется из условия отражения электромагнитной волны от области ионизованного газа ($n_{\max} \sim 10^{17} \text{ м}^{-3}$). В экспериментах [2] использовался магнетрон мощностью 500 Вт, работавший в квазиимпульсном режиме, который создавал в резонаторе электрическое поле напряженностью до $3 \cdot 10^4$ В/м. В отсутствие постоянного положительного напряжения на аноде ускорителя средняя концентрация и температура электронов за срезом сопла составляли $\sim 10^{17} \text{ м}^{-3}$, $T_e \sim 1 \text{ эВ}$, направленная скорость струи $\sim 10^4$ м/с.

Список литературы

1. Кубарев Ю.В., Кирдяшев К.П., Смирнов В.А. Выбор и состояние разработки электрореактивных двигателей мегаваттного класса для межпланетных полетов // Пилотируемые полеты в космос. 2013. № 1(6). С. 66.
2. Кубарев Ю.В., Соловьев Е.Г., Ташаев Ю.Н., Черник В.Н. А/С № SU 1210604 А1. 1995, № заявки 3700040/25 приоритет 14.02.1984. 09.01.1995
3. Мамонтов А. В., Нефёдов В.Н., Хриткин С.А. Применение запредельных волноводов для пиromетрических измерений // Измерительная техника. 2018. № 7. С. 55.

Численное моделирование формирования активной среды ЭУФ лазера на переходах Ni-подобных ионов золота в лазерной плазме

Тимшина М. В.¹, Калинин Н.В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *mariyatimshina@yandex.ru*

В настоящее время исследования по созданию лазеров в экстремально ультрафиолетовом (ЭУФ) и мягком рентгеновском (МР) диапазонах на плазме многозарядных ионов успешно развиваются во многих научных центрах мира. В этих исследованиях особый интерес связан с возможностью генерации излучения с длинами волн в спектральном диапазоне $1 < \lambda < 10$ nm, включающем в себя области «углеродного окна» и «водяного окна» (2.3-4.4nm). В этом спектральном диапазоне лазерное излучения, имеющее максимальную яркость, находит широкое применение для решения целого ряда прикладных задач в научных исследованиях по физике, биологии, медицины и т.д. По мнению многих исследователей, наиболее перспективный путь решения данной задачи связан с использованием переходов Ni-подобных ионов [1-3].

В данной работе проведен численный анализ формирования активной среды на переходах Ni-подобных ионов в лазерной плазме. Использовалась модель, позволяющая согласованно описывать динамику лазерной плазмы в одномерном двухтемпературном радиационно-гидродинамическом приближении. А также расчеты нестационарной ионизации плазмы и кинетики формирования населенностей рабочих уровней. Вследствие заметного различия характерных времен процессов ионизации-рекомбинации и процессов возбуждения становится возможным проводить этот анализ в два этапа [4]. На первом этапе осуществлялся расчет температуры электронов, плотности плазмы и ее ионного состава под действием внешнего лазерного источника излучения. На втором - расчет инверсной населенности лазерных подуровней иона для полученных на первом этапе радиально-временных распределений температуры, плотности и зарядового состава плазмы. Информация о населенностях рабочих уровней позволяет определить коэффициент усиления активной среды для определенной длины волны в однопроходном режиме. В данной работе проводится двухэтапный расчет коэффициента усиления на Ni-подобных ионах золота на переходе $4d - 4p$ ($\lambda = 3.5$ nm). Найдены условия, при которых возможно получить максимальный коэффициент усиления на указанном выше переходе $g^+ \sim 1 \cdot 10^1 \text{ cm}^{-1}$. Рассматривалась возможность формирования инверсии вследствие переходных процессов с учетом и без учёта радиационного опустошения нижнего рабочего уровня. Проведено сравнение результатов наших расчетов с оценками и расчетами, приведенными в [3,5].

Список литературы

1. Suckewer S., Jaegle P., X-ray laser: past, present, and future, *Laser Phys. Lett.* 6 (6) (2009)411–436
2. Nilsen J., X-ray lasers: The evolution from Star Wars to the table-top, *Proc. SPIE.* 2021. Vol.11886. Intern. Conf. on X-Ray Lasers. 2020. P. 1188604 (8 July 2021).
3. Wessameldin S. Abdelaziz, Hamed Mahmoud Hamed Ibrahim. XUV and Soft X-Ray Laser Radiation from Ni-Like Au, *Optics and Photonics Journal*, 2011, 1, 110-115
4. Виноградов А.В., Собельман И.И., Юков Е.А. О возможности создания лазера далекой ультрафиолетовой области спектра на переходах многозарядных ионов // *Квантовая электроника.* 1975. Т.2. № 1. 105 - 113.
5. Шматов М.Л. Энергия рентгеновских лазерных импульсов и длины волн вынужденного излучения, достигаемые при накачке рентгеновских лазеров с помощью лазерной установки National Ignition Facility // *Квантовая электроника.* 2023. Т. 52. № 8. С.715 - 719

Об устойчивости стационарных решений для режима с отражением частиц от потенциальных барьеров в диоде с электрон-позитронной плазмой

Бакалейников Л.А.¹, Кузнецов В.И.¹, Флегонтова Е.Ю.¹, Барсуков Д.П.¹, Морозов И.К.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: fl.xiees@mail.ioffe.ru

В работе [1] была высказана гипотеза о том, что радиочастотное излучение пульсаров обусловлено колебаниями электрического поля в плазме, возникающими из-за неустойчивости стационарных состояний. Там же была предложена модель пульсарного диода, в котором электроны поступают с левой границы, а позитроны - с правой. В [2] показано, что стационарные решения в таком диоде делятся на 2 типа: 1) все заряженные частицы долетают до противоположной границы и 2) часть частиц, вылетевших с электрода, отражается от потенциального барьера, существующего в плазме, и возвращается на электрод. В [1] выведено уравнение для амплитуды возмущения электрического поля для случая стационарных решений 1-го типа, с использованием которого в [1], [3] изучена устойчивость всех таких решений. Доказано, что решения с однородным распределением поля устойчивы, когда величина межэлектродного расстояния оказывается ниже некоторого порога, а все решения с неоднородными распределениями поля являются неустойчивыми.

В представляемом докладе изучается устойчивость стационарных решений для решений 2-го типа. Для этой цели с использованием двух численных кодов: E,K-кода и PIC-кода [3] рассчитывается начальная стадия развития малых возмущений. Доказано, что для стационарных решений, у которых потенциальный минимум, отражающий электроны, лежит около левого электрода, существует порог по величине безразмерного межэлектродного расстояния δ , при превышении которого стационарные решения оказываются неустойчивыми. Построена дисперсионная ветвь. Установлено также, что развитие возмущений в случае неустойчивости решений завершается выходом на колебательные решения. Построена зависимость амплитуды колебаний от величины δ . Обнаружено, что в окрестности порога δ_{th} эта зависимость ведет себя как $(\delta - \delta_{th})^{1/2}$, что характерно для бифуркации Хопфа. Расчеты развития возмущений решений, у которых потенциальный минимум, отражающий электроны, лежит около правого электрода, а потенциальный максимум, отражающий позитроны, лежит около левого электрода, показали, что такие решения являются неустойчивыми относительно малых возмущений. Полученные результаты оказались идентичными для расчетов, выполненных с использованием обоих кодов, что говорит о надежности расчетов.

Таким образом, нами завершено изучение устойчивости всех стационарных решений для диода со встречными потоками электронов и позитронов.

Список литературы

1. Kuznetsov V. I., Bakaleinikov L. A., Flegontova E. Yu., Steady states stability features of the electron-positron plasma diode, Phys. Plasmas, v. 29, 112115, 2022.
2. Эндер А. Я., Кузнецов В. И., Груздев А. А., Стационарные состояния диода со встречными пучками электронов и позитронов, том 42, 891-902, 2016.
3. Л.А. Бакалейников, В.И. Кузнецов, Е.Ю. Флегонтова, Д.П. Барсуков, И.К. Морозов. *Изучение устойчивости неоднородных стационарных решений у диода с электрон-позитронной плазмой*. Доклад на конференции

Equilibrium and non-equilibrium gas discharges sustained by powerful radiation of the THz frequency range in noble gases.

Сидоров А. В.¹, Веселов А.П., Водопьянов А.В., Глявин М.Ю., Калынов Ю.К., Лучинин А.Г.

¹ИПФ РАН

e-mail: *alvasid@inbox.ru*

The processes of creation and dynamics of a gas discharge in focused beams of electromagnetic radiation have been studied in sufficient detail in the microwave and IR ranges[1-2]. The terahertz frequency range lying between them became available to researchers of gas discharge physics relatively recently due to progress in the creation of powerful sources of this frequency range - free electron lasers and gyrotrons [3-4].

This paper presents the results of a study of the spatial dynamics of a discharge in pure noble gases and their mixtures (helium with the addition of argon) in a wide range of gas pressures (from units of Torr to several atmospheres).

The heating electromagnetic radiation was directed into the discharge chamber using a quasi-optical system of mirrors. The discharge was ignited at the focus of electromagnetic radiation and propagated towards it. The studies were carried out for several frequencies of heating radiation (250, 263, 550, and 670 GHz) in a wide range of power densities in the focal spot (from fractions of a kW/cm² to several MW/cm²). At relatively low power densities, the discharge propagation had an equilibrium character, while at high power densities it was non-equilibrium.

The discharge glow dynamics was studied using a streak camera, a camera with a short frame (up to 20 ns), a fast camera with a frame rate of up to 1000 fps, and a photo camera. The propagation velocities of both equilibrium and non-equilibrium discharges in various noble gases and their mixtures have been measured. The equilibrium discharge propagated at subsonic velocities, while the non-equilibrium discharge propagated at supersonic velocities. The spatial structure of the non-equilibrium discharge front has been studied. In heavy noble gases, the stretching of plasma filaments along the electric field vector was observed, while in helium the filaments were stretched along the direction of the discharge propagation. Various mechanisms of propagation of non-equilibrium and equilibrium discharges are discussed.

References

1. Raizer Y P 1977 Laser-Induced Discharge Phenomena (Consultants Bureau: New York).
2. Golubev S V, Gritsinin S I, Zorin V G, Kossyi I A, and Semenov V E 1988 in High-Frequency Discharge in Wave Fields (in Russian). (IPF AN SSSR: Gor'kii) pp. 136-97.
3. Bolotin V P et al. 2004 Proc. 1 Int. Conf. on Submillimeter Sci. and Tech.(Ahmedabad, India) pp 1-8.
4. Glyavin M Yu, Luchinin A G, Nusinovich G S, Rodgers J, Kashyn D G, Romero-Talamas C A, and Pu R 2012 Appl. Phys. Lett. 101 153503.

Исследование условий образования второй точки обращения знака электрического поля в тлеющем разряде

Прохорова Е. И.¹, Кудрявцев А.А.², Платонов А.А.¹, Слышов А.Г.¹

¹ПетрГУ

²Харбинский политехнический университет (Китай)

e-mail: *prokhorova@petrsu.ru*

В последнее время значительно вырос интерес к условиям образования такого нетривиального и дискуссионного явления, как обращение знака электрического поля (Field Reversal, FR) в тлеющем разряде постоянного тока [1]. При этом теоретически и экспериментально изучено положение первой точки FR, определяющей долю ионов из плазмы на катод [1]. Что же касается второй точки FR, то ее положение экспериментально не исследовано. Это можно объяснить тем, что переход ко второй точке FR происходит при малом (милливольты) изменении потенциала пространства. Поэтому обнаружить в эксперименте такое изменение весьма затруднительно. По этой причине вопрос о второй точке FR практически не обсуждается в литературе. Однако интерес к формированию и условиям ее нахождения становится актуальным после предсказания в работе [2] условий реализации нерешенной до сих пор чрезвычайно актуальной задачи инверсии функции распределения электронов (ФРЭ) и абсолютной отрицательной проводимости электронного газа в газах с рамзауэровским минимумом сечения упругого рассеяния (аргон, криптон, ксенон) [2].

В данной работе проведено комплексное экспериментальное исследование продольного распределения параметров тлеющего разряда (аргон, давления 0,1; 0,25; 0,4 и 0,7 Торр, разрядный ток 10 мА), включающее зондовые измерения концентрации и температуры электронов, потенциала пространства и свечения.

Эксперимент проводился в стеклянной разрядной трубке диаметром 65 мм и расстоянием между электродами 160 мм. Для определения электронных параметров использовался подвижный электрический зонд.

Получены следующие результаты. При низких давлениях, когда разряд состоит исключительно из области катодного (CF), анодного (AF) слоев и яркой области плазмы отрицательного свечения (NG), наблюдается одна точка обращения FR в середине светящейся области, соответствующей максимуму плотности плазмы. При этом поверхность анода темная, анодное падение отрицательно (запирает электроны). Температура тепловых электронов в потенциальной яме между CF и AF низка (менее 1 эВ), а их ФРЭ по энергиям близка к максвелловской.

Далее синхронно с повышением давления начинает формироваться темная область плазмы фарадеева темного пространства, длина которого растет от анода по направлению к катоду (соответственно размер области NG уменьшается). При этом на аноде появляется светящаяся пленка и образуется интересующая нас вторая точка FR. При дальнейшем увеличении давления вблизи анода начинает образовываться светящийся положительный столб разряда с большой (порядка 3 эВ) температурой электронов. И хотя наличие двух точек FR при этом сохраняется, расстояния между ними и от катода уменьшаются, что сильно затрудняет их обнаружение при повышении давления. Соответственно температура запертых электронов в плазменной области между первой и второй точками FR низка (менее 1 эВ), а их ФРЭ близка к максвелловской.

Таким образом, в работе показано, что в тлеющем разряде в аргоне вторая точка обращения знака электрического поля с неизбежностью образуется при увеличении давления газа (параметра $pL > 3 \text{ cmTorr}$) по мере формирования переходной области от фарадеева темного пространства к положительному столбу.

Список литературы

1. Цендин, Л.Д. Нелокальная кинетика электронов в газоразрядной плазме. УФН. Т. 180, № 2, С. 139, 2010.
2. Ch. Yuan, J. Yao, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, Zh. Zhou. Formation of inverse electron distribution function and absolute negative conductivity in nonlocal plasma of a dc glow discharge. Phys. Rev. E, v.101, 031202, 2020.

Изучение устойчивости неоднородных стационарных решений у диода с электрон-позитронной плазмой

Бакалейников Л. А.¹, Кузнецов В.И.¹, Флегонтова Е.Ю.¹, Барсуков Д.П.¹, Морозов И.К.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: morozov22505@gmail.com

Пульсары - источники импульсного радиоизлучения, всплески которого следуют друг за другом с очень медленно изменяющимся периодом, были обнаружены более 50 лет назад. Однако до сих пор нет ясного представления ни о механизме этого излучения, ни о причине перескока между модами [1-2]. Только в последние годы появилось понимание того, что излучение пульсаров связано с коллективными процессами, протекающими в электрон-позитронной плазме пульсарного диода [3].

В работе [4] высказана гипотеза, согласно которой излучение пульсара вызвано колебаниями электрического поля в плазме, возникающими из-за неустойчивости стационарных состояний. Такого рода неустойчивости характерны для диодов с бесстолкновительной плазмой. Предложена модель диода, в котором электроны поступают с левой границы, а позитроны - с правой. В первую очередь необходимо рассмотреть стационарные состояния такого диода и изучить их устойчивость. Стационарные решения делятся на два типа: 1) все заряженные частицы долетают до противоположной границы и 2) часть частиц отражается от потенциального барьера, существующего в плазме, и возвращается на электрод, с которого вылетела [5]. В работе [4] выведено уравнение для возмущения электрического поля в случае стационарных решений 1-го типа. Кроме того, в [4] для однородного распределения поля получено дисперсионное уравнение и построены дисперсионные ветви.

В представляемом докладе изучается устойчивость неоднородных стационарных решений для режима без отражения заряженных частиц от потенциальных барьеров. С помощью полуаналитического метода получено решение уравнения для возмущения поля, выведено дисперсионное уравнение и изучены дисперсионные ветви. Установлено, что все рассмотренные неоднородные стационарные решения являются неустойчивыми относительно малых возмущений.

Для валидации полученных результатов изучена начальная стадия развития малых возмущений стационарных решений с использованием двух численных кодов: E,K-кода и PIC-кода. Результаты численных расчетов совпали между собой и с результатами, полученными аналитически. Оба кода могут быть использованы в дальнейшем для изучения устойчивости стационарных решений с отражением заряженных частиц от потенциальных барьеров.

Список литературы

1. P. Goldreich, W.H. Julian. The Astrophysical Journal. 157(2), 869, 1969.
2. P.A. Sturrock. The Astrophysical Journal. 164(3), 529, 1971.
3. A. Philippov, A. Timokhin, A. Spitkovsky. Phys. Rev. Lett. 124(24), 245101, 2020.
4. V.I. Kuznetsov, L.A. Bakaleinikov, E.Yu. Flegontova. Phys. Plasmas, 29(22), 112115, 2022.
5. A. Ya. Ender, V.I. Kuznetsov, A. A. Gruzdev. Plasma Phys. Rep. 42(10), 936, 2016.

Особенности диссипации энергии взрывной волны применением водной пены

Гайнуллина Э. Ф.¹, Болотнова Р.Х., Коробчинская В.А.
ИМех УФИЦ РАН

e-mail: *elina.gef@yandex.ru*

Изучение демпфирующих свойств водной пены применительно к проблемам ослабления ударных и взрывных волн является актуальным направлением научных исследований, поскольку способность пен существенно снижать скорость и амплитуду ударного импульса делает их эффективным средством защиты от ударного воздействия [1].

Особенности динамики сильных и слабых ударных волн в водной пене исследованы в работах [2-5]. Предложены двухфазные модели для описания поведения пены как газокапельной смеси, образующейся при разрушении пенной структуры в результате ударной нагрузки высокой интенсивности [4, 5]. В [6, 7] разработана упруго-вязко-пластическая модель, учитывающая поведение пены как неньютоновской жидкости при слабом ударном воздействии.

В настоящей работе исследуется взаимодействие ударных волн с водной пеной для условий экспериментальных данных [8] по ослаблению взрыва ВВ применением защитного пенного барьера. В [8] заряды ВВ массой 82 и 250 (г) окружались полусферическим слоем водной пены радиусом 0.2 и 0.28 (м) с плотностью 60 кг/м³. Датчики, измеряющие давление в формирующейся ударной волне, располагались вне пены на расстоянии 0.5 – 1.1 м от центра взрыва. Для оценки демпфирующих свойств водной пены были проведены эксперименты по взрыву ВВ при отсутствии пенного барьера [8].

Моделирование изучаемого процесса проводится на основе разработанной двухфазной газожидкостной модели водной пены [4] в однодавленческом, двухскоростном, двухтемпературном приближениях с учетом сил межфазного взаимодействия и межфазных теплообменных процессов.

В результате численного анализа оценено влияние толщины пенной преграды на степень снижения скорости и амплитуды ударного импульса и рассчитано безопасное расстояние от центра взрыва в зависимости от его интенсивности при наличии пенной защиты, а также в ее отсутствии. Проведен сравнительный анализ полученных расчетов с экспериментальными данными [8].

Исследования выполнены при финансовой поддержке средствами госбюджета по госзаданию 0246–2019–0052.

Список литературы

1. Monson K.L., Kyllonen K.M., Leggitt J.L. et al., Blast Suppression Foam, Aqueous Gel Blocks, and their Effect on Subsequent Analysis of Forensic Evidence, *J Forensic Sci.*, vol. 65, no. 6, 1894–1907, 2020.
2. Monloubou M., Le Clanche J., Kerampran S., New experimental and numerical methods to characterise the attenuation of a shock wave by a liquid foam, *AFM*, 255125, 2019.
3. Liverts M., Ram O., Sadot O. et al., Mitigation of exploding-wire-generated blast-waves by aqueous foam, *Phys. Fluids*, vol. 27, 076103, 2015.
4. Bolotnova R. Kh., Gainullina E.F., Wave dynamics and vortex formation under the impact of a spherical impulse on the boundary between gas and aqueous foam, *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 1268, 012015, 2019.

5. Bolotnova R.Kh., Gainullina E.F., Modeling Dynamics of Shock Impact on Aqueous Foams with Account for Viscoelastic Properties and Syneresis Phenomena, *Fluid Dynamics*, vol. 55, no. 5, 604–608, 2020.
6. Bolotnova R.Kh., Gainullina E.F., Influence of the dissipative properties of aqueous foam on the dynamics of shock waves, *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, vol. 61, no. 4, 510–516, 2020.
7. Bolotnova R.Kh., Gainullina E.F., Modeling of weak shock waves propagation in aqueous foam layer, *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 2103, 012217, 2021.
8. Khurshid A., Malik A.Q., Experimental studies on blast mitigation capabilities of conventional dry aqueous foam, *AIP Advances*, vol. 10, 065130, 2020.

Взаимодействие электромагнитных волн с жидкими пленками

Харланов А. В.¹, Харланова Т.С.¹

¹ВолгГТУ

e-mail: *harlanov_av@mail.ru*

Стекающие жидкие пленки используются в системах оборудования для химической обработки, нанесения покрытий, обработки полимеров, охлаждения микроэлектронных приборов [1, 2]. Движение тонкой пленки по подложке – это сложная задача, не имеющая аналитического решения. Кроме того, неровная поверхность стекающей жидкости приводит к неравномерности ее толщины, что, в свою очередь, приведет к неравномерности охлаждения или других технологических процессов [3, 4]. Эту проблему можно обойти, если жидкость будет течь между двумя пластинами. В этом случае свободная поверхность будет отсутствовать, уравнения, описывающие течение жидкости, существенно упростятся, а толщина жидкости будет постоянной. Однако дополнительная поверхность будет тормозить течение жидкости. Чтобы ее ускорить, можно воспользоваться комбинацией двух физических явлений – электроосмоса и вибрационной механики [5, 6]. Причиной этого служит заряженный слой на границе раздела двух различных веществ. Электрическое поле действует на этот слой и приводит его в движение.

Пусть к телу массой m , лежащему на горизонтальной поверхности, горизонтально приложена постоянная сила F_C , меньше силы трения покоя, т. е. тело покоится. Если теперь подействовать горизонтальной силой $F_0 \sin \omega t$ с частотой ω и амплитудой F_0 , больше силы трения покоя, то тело начнет двигаться. В вибрационной механике выводится выражение для скорости установившегося движения [7]:

$$U_0 = \frac{F_0}{m\omega} \cos \frac{k_+}{k_+ + k_-} \pi, \quad (1)$$

где $k_- = \frac{F_f + F_C}{mg} > k_+ = \frac{F_f - F_C}{mg}$, F_f – максимальная сила трения покоя.

Рассмотрим плоскую жидкую пленку между двумя твердыми поверхностями, текущую под действием разности давлений. Рассматривая движение вязкой жидкости, можно получить выражение для распределения скоростей в поперечном сечении:

$$U_x = \frac{P_1 - P_2}{2\eta l} (a^2 - x^2),$$

где $2a$ – расстояние между поверхностями, η – вязкость, $P_1 - P_2$ – разность давлений на длине l . Неподвижный слой жидкости, находящийся непосредственно у стенок, имеет заряд. Под действием переменной (вибрационной) электромагнитной силы этот слой приобретет скорость U_0 . Тогда новая формула распределения скоростей запишется в виде:

$$U_x = \frac{P_1 - P_2}{2\eta l} (a^2 - x^2) + U_0,$$

Для оценки предположим, что жидкость течет между двумя вертикальными плоскими поверхностями под действием силы тяжести. Рассмотрим слой жидкости, толщиной h , находящийся непосредственно у стенки. На этот слой действует сила тяжести, сила адгезии со стороны стенки и сила вязкого трения со стороны соседнего слоя жидкости.

При рассмотрении движения тонкой пленки целесообразнее рассматривать силы, действующие на единицу поверхности. Для воды сила адгезии будет иметь порядок $f_A \approx 100 \text{ Н/м}^2$ [8]. Эта сила аналогична силе F_f в формуле (1).

Теперь оценим силы тяжести f_g и вязкости f_τ , которые для слоя жидкости, примыкающего к стенке, противоположны силе адгезии. Эта сила будет иметь смысл силы F_C :

$$f_C = \frac{F_C}{S} = f_g + f_\tau = \rho g(h + a).$$

Если расстояние между поверхностями 1 мм, плотность $\rho = 10^3 \text{ кг/м}^3$, а толщина слоя жидкости, прилипающая к стенке трубы $200 - 800 \text{ \AA}$, то сила $f_C \approx 10 \text{ Н/м}^2$ на порядок меньше силы адгезии, то есть она не может сдвинуть слой жидкости относительно поверхности.

Амплитуда электромагнитной силы, действующей на тонкий слой жидкости, пропорциональна величине напряженности E_0 , которую можно найти из уравнений Максвелла, и поверхностной плотности заряда ρ_S . Тогда тонкая пленка на границах $\pm a$ приобретет дополнительную скорость:

$$U_0 = \frac{\rho_S E_0 \cos \theta}{h \rho \omega} \frac{f_A - f_C}{2f_A} \pi.$$

В нашем случае $U_0 = \frac{\rho_S E_0}{\omega} \cdot 1,6 \cdot 10^3 \text{ м/с}$.

Чем толще будет пленка, тем менее заметным будет наблюдаемый эффект. Увеличение скорости течения тонкой пленки может применяться не только для увеличения эффективности охлаждения электронных устройств, но и для определения параметров жидких тонких пленок, так как скорость течения зависит от заряда пленки.

Список литературы

1. Kabov O.A., Zaitsev D.V., Cheverda V.V., Bar-Cohen A., Evaporation and flow dynamics of thin, shear-driven liquid films in microgap channels, *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 35, 825–831, 2011
2. Ubara T., Asano H., Sugimoto K., Heat Transfer Enhancement of Falling Film Evaporation on a Horizontal Tube by Thermal Spray Coating, *Appl. Sci.*, 10, 1632, 2020
3. Craster R. V., Matar O. K., Dynamics and stability of thin liquid films, *Rev. Mod. Phys.*, 81, 1131, 2009
4. Ma C., Hu S., Dong G., Li B., Fingering Instability of a Gravity-Driven Thin Film Flowing Down a Vertical Tube with Wall Slippage. *Appl. Sci.*, 10, 76, 2020
5. Григоров О. Н. Электрокинетические явления, Изд-во ЛГУ, 199 с., 1973
6. Tiboni M., Remino C., Bussola R., Amici C., A Review on Vibration-Based Condition Monitoring of Rotating Machinery, *Appl. Sci.*, 12, 972, 2022
7. Вибрации в технике, М.: Машиностроение, 1978
8. Зимон А. Д., Адгезия жидкости и смачивание, М.: Химия, 413 с., 1974

Моделирование процесса истечения жидкого азота через коническое сопло в вакуумную камеру

Коробчинская В. А.¹, Болотнова Р.Х., Гайнуллина Э.Ф.

¹ИМех УФИЦ РАН

e-mail: *buzina_lera@mail.ru*

Исследования, связанные с изучением процессов формирования расширяющихся струй криогенных жидкостей при распылении из тонкого сопла в сосуд низкого давления, представляют важную научно-практическую значимость в связи с их применением в различных технологических процессах современной энергетики и ракетной технике.

В экспериментальной работе [1] исследовалось влияние увеличения степени перегрева на эволюцию распыления струи вскипающего азота в условиях криогенных температур. Были измерены распределения скорости и диаметра капель сильно перегретых вскипающих брызг жидкого азота с постоянными условиями впрыска [1, 2].

Целью данной работы является моделирование и исследование процесса пространственного осесимметричного истечения вскипающей струи криогенного жидкого азота при внезапной разгерметизации камеры высокого давления в вакуумную атмосферу в условиях, близких к экспериментам [1].

Для решения поставленной задачи разработана двухфазная модель парожидкостной смеси в двухтемпературном, однодавленческом, односкоростном приближениях с учетом контактного теплообмена и неравновесных массообменных процессов испарения и конденсации [3, 4]. Скорость испарения определялась в соответствии с [5]. Компьютерная реализация предложенной модели парожидкостной смеси проводилась с применением разработанного авторами решателя в среде OpenFOAM.

Проведен анализ особенностей формирования струи жидкого азота, истекающего через тонкое коническое сопло из сосуда высокого давления в вакуумную камеру для начальных условий впрыска при температуре $T_{inj} = 82.5$ К и давлении $p_{inj} = 4$ бар в зависимости от различных степеней перегрева в соответствии с данными [1]. Приведены распределения полей скоростей струйного потока, значений температур и объемного содержания фаз и проанализировано влияние степени перегрева на угол раскрытия струи и образование вихревых зон в процессе перехода из пузырькового режима истечения в парокапельный с оценкой уровня монодисперсности парокапельного потока. Получено удовлетворительное согласование численных результатов с экспериментами [1].

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00309, <https://rscf.ru/project/23-29-00309/>.

Список литературы

1. Rees A., Salzmann H., Sender J., Oswald M. Investigation of Flashing LN2-Jets in Terms of Spray Morphology, Droplet Size and Velocity Distributions, In: 8th EUCASS conference, Madrid, Spain, 1–13, 2019
2. Rees A., Araneo L., Salzmann H., Lamanna G., Sender J., Oswald M. Droplet Velocity and Diameter Distributions in Flash Boiling Liquid Nitrogen Jets by Means of Phase Doppler Diagnostics, Experiments in Fluids, vol. 5, No. 182, 1-18, 2020

3. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Москва: Наука, 1987.
4. Болотнова Р.Х., Коробчинская В.А. Моделирование динамики струи при истечении через тонкое сопло водного флюида, находящегося в сверхкритическом состоянии, Теплофизика и аэромеханика, том. 29, № 3, 361–370, 2022
5. Болотнова Р.Х., Бузина В.А., Галимзянов М.Н., Шагапов В.Ш. Гидродинамические особенности процессов истечения вскипающей жидкости, Теплофизика и аэромеханика, том. 19, № 6, 719–730, 2012

Расчетные исследования интерференции элементов легкой транспортной платформы вертикального взлета и посадки

Губский В.В.¹, В.С. Замаев¹, О.В. Павленко¹, В.И. Черноусов¹
¹ФАУ "ЦАГИ"

e-mail: Vitaliy.Gubskiy@tsagi.ru

В работе представлены расчетные исследования легкой транспортной платформы вертикального взлета и посадки. В компоновке использованы отдельные конструктивно-технологические решения, примененные на Hawker Siddeley Harrier и Dornier Do 31^{1,2}. Особенностью данной платформы является несущий корпус с использованием в качестве силовой установки турбовентиляторного двигателя с винтами в кольцевых каналах-мотогондолах (отсутствие открытого ротора) для обеспечения меньшего уровня шума и повышения безопасности вертикального взлета-посадки.

На основе предварительной оценки несущей способности фюзеляжа на крейсерских режимах полета, проведены численные исследования по аэродинамике с целью формирования базовых характеристик на различных режимах полета. Для мотогондолы в целом получены расчетные зависимости подъемной силы и силы сопротивления на крейсерских режимах, а также ее распределенные характеристики: коэффициент давления, число Маха, турбулентная вязкость и др.

На основе анализа аэродинамических характеристик мотогондолы и с целью увеличения подъемной силы и снижения сопротивления подъемных элементов мотогондолы проведена их оптимизация, по результатам которой отмечено следующее:

- в наиболее оптимальных условиях работы оказываются профили элементов подъемной решетки мотогондолы, расположенные ближе к ее нижней поверхности;
- центральный профиль находится в затененном потоке от обтекателя вентилятора и имеет малую эффективность;
- при изменении угла атаки до $\alpha = 7^\circ$ верхний профиль попадает в вязкий след от внутренней поверхности мотогондолы, однако закрутка потока создает положительный эффект и в меньшей степени снижает эффективность его работы.

На основе вышеприведенных данных был сделан выбор взаимного положения элементов подъемной решетки, а также оптимизирован угол атаки для каждого профиля. Проведенные численные исследования подъемной решетки показали, что применение единого оптимального профиля для всех ее элементов позволяет увеличить подъемную силу на 20%, а установка всех элементов подъемной решетки под оптимальный угол атаки - увеличить несущие способности мотогондолы в 2 раза. Кроме того, установка каждого элемента под свой оптимальный угол позволяет дополнительно получить еще 30% к общей величине подъемной силы мотогондолы в целом.

Таким образом, на основе проведенного расчетно анализа и полученных аэродинамических зависимостей, сформированы основные базовые характеристики транспортной платформы на различных режимах полета. Легкая транспортная платформа вертикального взлета и посадки на

крейсерских режимах должна перевозить полезную нагрузку массой до 1200 кг внутри корпуса на дальность до 1000 км со скоростью 450-500 км/ч, на взлетно-посадочных режимах должна обеспечивать безопасность вертикального взлета-посадки на ограниченные площадки.

Список литературы

1. General Electric Company, V/STOL AIRCRAFT (US3618875A)
2. General Electric Company, FAN POWERED AIRCRAFT (US3212731A)

Численное исследование дифракции ударных волн в плоском канале с наличием выдува струи газа в сверхзвуковой поток.

Сназин А. А.¹, Шевченко А.В.¹, Шевченко В.И.¹,

¹ВКА им. А.Ф. Можайского

e-mail: alexsnzn@gmail.com

Эффективное взаимодействие выдуваемых струй газа со сверхзвуковым потоком является одним из актуальных вопросов, которому посвящено большое количество исследований и разработок. Выдув струй в сверхзвуковой поток является распространенным методом повышения эффективности смешивания газов и воздействия на ударно-волновую структуру потока. Исследования показывают, что поперечный выдув струи газа является одним из традиционных и надежных методов, обеспечивающих быстрое смешивание газов и высокое проникновение струи в сверхзвуковой поперечный поток [1-3].

Объект исследования представляет собой канал размерами $l = 180\text{мм}$, $h = 30\text{мм}$ и $w = 80\text{мм}$, где на расстоянии $b = 80\text{мм}$ от входа находится место выдува струи газа. На расстоянии $n = b/2$ расположена рампа длиной $m = 5\text{мм}$ и 10мм и углом наклона $\beta = 30^\circ$. Набегающий сверхзвуковой поток задан следующим образом: $M_\infty = 4,2$, статическое давление $P_\infty = 1200\text{ Па}$ и статическая температура $T_\infty = 227\text{ К}$. Число Маха выдуваемой струи равно $M_j = 1$, полная температура $T_j = 293\text{ К}$, а отношение давления струи к статическому давлению $P_j/P_\infty = 0.16$ [4]. Условие выдува струи фиксировано на протяжении всего расчета. На нижнюю и верхнюю стенки канала наложены условия прилипания и адиабатической стенки.

Модель решалась на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса, которые замыкались уравнением модели турбулентности SST $k-\omega$. [5] Топология сетки построена таким образом, чтобы разрешить пристеночные течения и турбулентные структуры в зонах больших перепадов газодинамических параметров. В пристеночных областях безразмерная высота слоя $y^+ < 1$. Общее число ячеек сетки конечных элементов составляет $1,8 \times 10^6$ элементов. Для расчета моделировалась половина канала, на плоскость раздела накладывалось условие симметрии.

В результате проведенных исследований была получена картина ударно-волновых структур, возникающих при выдуве струи газа и наличии рампы на противоположной стенке канала. Видно, что падающая ударная волна с рампы поджимает область образования подковообразного вихря перед выдуваемой струей. При этом область распространения подковообразного вихря увеличивается по ширине канала. Увеличивается область перемешивания газов в низ по потоку за струей. За струей выдуваемого газа увеличивается область пониженного давления.

В настоящей работе проведено численное исследование взаимодействия между падающей ударной волной и поперечно выдуваемой струей газа. Варьировался размер, угол подъема рампы с целью исследования их влияния на сверхзвуковой поток в канале. В результате получено, что увеличение угла подъема рампы и ее размера оказывают большое влияние на структуру потока в канале.

Список литературы

1. Fric, T. F., and Roshko, A., "Vortical Structure in the Wake of a Transverse Jet," Journal of Fluid Mechanics, Vol. 279, 1994, pp. 1–47. doi:10.1017/S0022112094003800

2. Ben-Yakar, A., Mungal, M. G., and Hanson, R. K., "Time Evolution and Mixing Characteristics of Hydrogen and Ethylene Transverse Jets in Supersonic Crossflows," *Physics of Fluids*, Vol. 18, No. 2, 2006, Paper 026101. doi:10.1063/1.2139684
3. Gruber, M. R., Nejad, A. S., Chen, T. H., and Dutton, J. C., "Mixing and Penetration Studies of Sonic Jets in a Mach 2 Freestream," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 11, No. 2, 1995, pp. 315–323. doi:10.2514/3.51427
4. Исследование взаимодействия недорасширенной газовой струи, выдуваемой из тела, с высокоскоростным набегающим потоком / А.А. Сназин, А.В. Шевченко, Е.Б. Панфилов, И.К. Прилуцкий // Труды МАИ. 2021. №119 – DOI 10.34759/trd-2021-119-05.
5. Menter, F.R., "Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications," *AIAA Journal*, Vol. 32, No. 8, 1994, pp. 1598-1605. doi:10.2514/3.12149

О наилучшей форме хорошо обтекаемых тел (аналитическое обоснование)

Гладков С. О.¹, Нагибин Н.С.¹

¹Московский авиационный институт

e-mail: *sgrad51@mail.ru*

Хорошо известно, что наилучшим гидродинамическим обтеканием обладает тело, имеющее форму капли (см. [1]). Действительно, если рассмотреть ее разрез, то благодаря практически отсутствующей турбулентности в области хвостовой части, сопротивление будет наименьшим. При этом аналитического обоснования такой формы мы не обнаружили. Близкая к этой задаче является и постановка вопроса о том, какова должна быть форма тел с точки зрения эффективного плавания. В подавляющем большинстве примеров физическая скорость движения обычно не велика, а число Рейнольдса в области пограничного слоя, непосредственно примыкающего к поверхности тела, мало. При этом важную роль должно играть межмолекулярное взаимодействие. Иными словами, нам необходимо принимать во внимание вязкость окружающего континуума.

Для решения поставленной задачи необходимо проанализировать уравнение Навье – Стокса вместе с уравнением непрерывности в двухмерном случае, считая тело практически плоским считая его толщину чрезвычайно малой. В пограничной области, непосредственно примыкающей к поверхности тела, уравнение Навье – Стокса сводится к довольно специфическому уравнению для определения распределения скоростей вблизи поверхности. При этом направление основной оси декартовой системы координат выбирается вдоль движения потока. Дальнейший анализ заключается в решении уравнения Прандтля в двухмерном случае при выполнении вполне естественного условия, когда продольная скорость течения значительно превышает скорость в перпендикулярном к ней направлении.

Поскольку продольные размеры тела конечны, то в рамках нашей задачи в операторе Лапласа следует учесть обе вторые частные производные в отличие от уравнения, которое решал Блазиус. Именно учет двухмерности оператора Лапласа позволяет найти интересующее нас автомодельное решение, сильно отличающееся от решения, которое получил Блазиус. При решении полученного обобщенного уравнения Прандтля мы считаем, что на бесконечном удалении от тела продольная составляющая скорости должна совпадать с постоянной скоростью течения стационарного потока, а перпендикулярная к ней составляющая должна стремиться к нулю. Кроме этих необходимых условий, на контуре тела должна исчезать и нормальная компонента скорости, что свойственно только потенциальному течению (см. [1], а также [2] - [4]).

Специфика такого подхода позволяет найти решение с помощью некоторой скалярной функции, автоматически удовлетворяющей уравнению непрерывности и приводящей уравнение Прандтля к уравнению третьего порядка по частным производным. Оказалось, что это уравнение допускает автомодельное решение. После перехода к единственной новой переменной, представляющей собой простую дробь, составленную из двух введенных в рассмотрение координат, уравнение в частных производных сводится к решению обыкновенного нелинейного дифференциального уравнения третьего порядка, которое с помощью понижающей его размерность подстановки элементарно сводится к уравнению второго порядка для искомой скалярной функции. Оказалось, что его решение можно найти строго аналитически после

двухкратного интегрирования. Полученное решение, в свою очередь, дает нам возможность найти и интересующее нас распределение скоростей. В результате получается общее решение, которое в разных предельных случаях (то есть при малых и больших числах Рейнольдса) позволяет проанализировать форму хорошо обтекаемого тела. В частности, оказалось, что вблизи начала координат его решение ведет себя согласно корневой зависимости от координаты в направлении потока, что с нашей точки зрения указывает на качественно правильный ход решения.

Отметим в заключении, что, во – первых, предложена аналитическая модель, позволяющая выяснить вид контура хорошо обтекаемого тела, а во – вторых, приведено численное решение задачи в общем случае для произвольных чисел Рейнольдса.

Список литературы

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Гидродинамика. Т. 6. М.: Наука. 1988. 733 с.
2. С.О. Гладков. О конвективном движении газа в цилиндрическом объеме. Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 12. СС. 71 – 75.
3. С.О. Гладков. О доказательстве единственности гидродинамического решения Стокса. Известия вузов. Физика. 2018. Т. 61. В. 6. СС. 103 – 105.
4. С.О. Гладков. К вопросу о вычислении времени остановки вращающегося в вязком континууме цилиндрического тела и времени увлечения соосного с ним внешнего цилиндра. ЖТФ. 2018. Т. 59. В. 3. СС. 377 – 341.

Подавление обратных реакций при разложении CO₂ в плазме СВЧ разряда

Чекмарев Н. В.¹, Мансфельд Д.А.¹, Преображенский Е. И.¹, Синцов С. В.^{1,2}, Ремез М. А.^{1,2}, Водопьянов А. В.^{1,2}
¹ИПФ РАН, ²ННГУ

e-mail: chekmarev@ipfran.ru

В связи с ускоренным ростом концентрации парниковых газов в атмосфере возрастает интерес к технологиям их утилизации – в т.ч. с конверсией в продукты, которые имеют добавочную стоимость. С этой точки зрения перспективной считается реакция разложения углекислого газа на кислород и монооксид углерода, который при добавлении водорода образует «синтез-газ», который может быть использован для производства углеводородов, в т.ч. метанола, диметилового эфира и для синтеза Фишера-Тропша.

В последнее десятилетие усилия плазмохимического сообщества направлены на поиск способов разложения углекислого газа в неравновесной плазме различных разрядов атмосферного давления, из которых наиболее перспективным является СВЧ разряд, который помимо достигнутых высоких степеней конверсии углекислого газа, имеет ряд преимуществ, таких как безэлектродность и масштабируемость [1]. Особенностью нашего подхода является использование в качестве источника СВЧ излучения технологического гиротронного комплекса непрерывного действия с частотой 24 ГГц и мощностью до 5 кВт. Излучение по волноводному тракту поступает в плазмотрон, в котором за счет конического сужения с 32,5 мм до 10 мм плотность мощности возрастает в ~12 раз и становится достаточной для поддержания разряда. В эту же область по нескольким различным каналам подается плазмообразующий газ аргон и углекислый газ. В экспериментах потоки газов менялись в диапазонах CO₂: 0,4 – 4 л/мин, Ar: 0 – 5 л/мин.

Разряд состоит из двух различных областей: область прямых реакций находится внутри плазмотрона вблизи максимума амплитуды напряженности электрического поля. В ней достигается температура 4000 – 5000 К, и активно протекают прямые реакции разложения CO₂: $2CO_2 \rightarrow 2CO + O_2$. Область обратных реакций представляет собой плазменный факел длиной до 10 см. В нем происходит остывание реакционной смеси. Необходимо обеспечить быстрое ~ $10^6 - 10^7 K/s$ охлаждение продуктов, чтобы обратные реакции не успевали протекать [2]. Таким образом можно достичь повышения эффективности разложения углекислого газа.

В данной работе рассматривается охлаждение потоком холодного газа: поток азота 1 – 3 л/мин направляется в основание плазменного факела. Охлаждение достигается за счет двух эффектов: первый – теплообмен непосредственно с холодным газом, а второй – смешивание с атмосферой, сформировавшейся в камере.

Эксперименты показали, что охлаждение плазменного факела потоком газа действительно позволяет подавлять обратные реакции: в среднем этот метод позволяет повысить степень разложения углекислого газа в 2 - 2,5 раза. Рекордным достигнутым результатом является повышение степени разложения с 16 % до 42,5 % за счет подачи 3 л/мин азота в основание факела. При этом доля энергии СВЧ излучения, затрачиваемая на протекание плазмохимической реакции, пропорционально возросла с 6,7 % до 17,6 %.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-12-00376).

Список литературы

1. Y. Qin, G. Niu, X. Wang, D. Luo, Y. Duan, Status of CO₂ conversion using microwave plasma, *J. CO₂ Util.* 28 (2018) 283–291. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2018.10.003>.
2. E.R. Mercer, S. Van Alphen, C.F.A.M. van Deursen, T.W.H. Righart, W.A. Bongers, R. Snyders, A. Bogaerts, M.C.M. van de Sanden, F.J.J. Peeters, Post-plasma quenching to improve conversion and energy efficiency in a CO₂ microwave plasma, *Fuel*, Volume 334, Part 2, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126734>.

О кондуктивно-конвективном преобразовании в двумерной трубе

Шампаров Е. Ю.¹, Жагрина И.Н.¹

¹A N Kosygin RSU

e-mail: *shamparov@bk.ru*

Вопросы теплового комфорта человека в различных окружающих условиях особенно актуальны в нашей самой холодной стране мира. Однако приоритетного внимания, как, например, к ракетам, которые должны не только летать, но и попадать, к одежде, которая должна быть не только красивой, но еще и греть, на данный момент не наблюдается. Каждый день мы подвергаемся стрессу. На улице минус 10 и ветрено. В автобусе плюс 5 и долго. В метро плюс 25 и душно. Потом опять на улице. И расплачиваемся за это собственным здоровьем.

Конечно, весь комплекс задач построения интеллектуальной одежды к одной физике не сводится. Роль физической науки состоит прежде всего в формулировке решаемых задач, базовых для понимания процессов в системе. На их основании, как на кирпичиках возможна реализация конкретных технических решений.

В работе рассмотрены вопросы кондуктивно-конвективного переноса тепла и возникновения естественных конвекционных потоков в атмосфере с давлением P (изменением давления с высотой перебрежем) и молярной массой μ в поле тяжести (с напряженностью g) в двумерной трубе шириной l с открытыми концами. Рассмотрен случай высокой трубы с двумя параллельными плоскими стенками, имеющими температуру T_1 и T_2 . Пусть температура внешнего пространства равна T_3 , $T_1 > T_2 > T_3$. Пренебрегая концевыми эффектами можно считать, что в такой трубе реализуется стационарный поток газа со скоростью v , распределенной в зависимости от расстояния от поверхности с температурой T_1 . Скорость на поверхностях равна нулю. Поток вещества перпендикулярен потоку тепла. Пренебрегая зависимостью теплопроводности газа от температуры можно считать, что между поверхностями согласно уравнению Фурье реализуется постоянный градиент температуры. На расстоянии d от горячей стенки температура составляет $T = T_1(1 - x\alpha)$, где x и α - безразмерные переменные $x = d/l$ и $\alpha = (T_1 - T_2)/T_1$.

Задача имеет аналитическое решение, в ходе которого, используя уравнение Ньютона (для вязкости) для скорости газа получено

$$v = ((x - x^2)/(2T_3) + ((1 - x\alpha)\ln(1 - x\alpha) - x(1 - \alpha)\ln(1 - \alpha))/(\alpha^2 T_1))(\mu P g l)/(R\eta),$$

$$v = \frac{P g l \mu}{R \eta} \left(\frac{x - x^2}{2T_3} + \frac{(1 - x\alpha)\ln(1 - x\alpha) - x(1 - \alpha)\ln(1 - \alpha)}{\alpha^2 T_1} \right)$$

где R - универсальная газовая постоянная и η - вязкость газа.

Далее найдена линейная плотность потока газа в трубе (поток приходящийся на единицу длины). Затем проведен анализ полученных данных.

Показано, когда можно пользоваться средней по ширине трубы температурой газа.

После этого внимание сконцентрировано на соотношении между кондуктивным и конвективным отводом тепла от горячей поверхности трубы конечной высоты. Найдено, на какой высоте от нижнего конца трубы формируется стационарный поток. Оценена оптимальная высота трубы, на которой доля конвективного отвода тепла в общем потоке тепла от горячей поверхности максимальна. Выполнены численные оценки скорости воздуха и мощности, которую можно отводить посредством естественной конвекции при различных геометрических характеристиках трубы.

Работа имеет важное прикладное значение для понимания роли естественной конвекции при переносе тепла в пододежном пространстве. На основании численных оценок можно сделать вывод о возможности резкого увеличения отвода тепла из пододежного пространства посредством естественной конвекции и таким образом обеспечения существенно более высокого комфорта при резком увеличении температуры окружающей среды. Отметим, что с учетом возможности отвода тепла за счет испарения влаги в реальных условиях отводимое посредством движения воздуха тепло может быть еще значительно больше.

Дополнительно отметим, что проведенные оценки должны быть полезны для тепловизионной маскировки объектов. Горячий воздух, как известно, настолько прозрачен, что ни в каких тепловизорах не виден.

Список литературы

1. Кутателадзе С. С. Основы теории теплообмена. Изд. 5-е перераб. и доп. М: Атомиздат, 1979, 416 с.

Особенности поведения аномально термовязких жидкостей в условиях теплообмена с внешней средой

Мухутдинова А. А.¹, Киреев В.Н.², Урманчиев С.Ф.¹

¹Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН

²Уфимский университет науки и технологий

e-mail: *muhutdinova18@gmail.com*

Процессы теплообмена потока жидкости с внешней средой в значительной мере определяют особенности течения. При этом учёт зависимости вязкости и теплофизических констант от температуры вносит существенный вклад не только в количественные, но и качественные характеристики течения. Например, для капельных жидкостей, которым свойственна зависимость вязкости от температуры аррениусовского типа, в работе [1] приведены достаточно подробные исследования течения теплоносителей в каналах ядерных энергетических установок. Из научной литературы известно значительное количество работ выполненных в предположении убывающей зависимости вязкости от температуры [2] для решения различных проблем геофизики, экологии, металлургии и химической промышленности. Между тем, зависимость вязкости от температуры может иметь и немонотонный характер, физическая природа которого может быть объяснена непрерывными процессами полимеризации и распада полимерных цепочек, если речь идёт о растворах и расплавах полимеров, например, жидкой сере [3] или мицеллярных растворах [4]. Немонотонный характер температурной зависимости обнаруживается и при определении вязкости некоторых аморфных металлических сплавов, находящихся в жидком состоянии [5,6]. Как было показано в работах [7,8] свойство немонотонности вязкости можно использовать в потокоотклоняющих технологиях при добыче жидких углеводородов.

В этой связи возникает задача изучения закономерностей течения жидкостей с немонотонной зависимостью вязкости от температуры, или аномально термовязкой жидкости, при различных значениях параметров теплообмена. В статье [9] были представлены результаты по определению характеристик установившегося режима течения такой жидкости в плоском канале. В настоящей работе выполнено детальное исследование особенностей течения аномально термовязкой жидкости в канале кольцевого сечения и рассмотрена задача численного моделирования процесса блокирования высокопроницаемого участка пористой среды термообратимой жидкостью, обладающей немонотонной зависимостью вязкости от температуры.

Математическая модель состоит из модифицированных уравнений Навье-Стокса с учётом переменной вязкости, уравнений неразрывности и сохранения энергии, записанных в цилиндрической системе координат при наличии осевой симметрии [10]. Уравнения математической модели реализованы с помощью компьютерного кода на основе метода контрольного объема с использованием алгоритма SIMPLE.

С помощью численного моделирования установлено влияние реологических параметров жидкости и условий теплообмена на характеристики потока. Показано, что гидродинамические параметры течения сильно зависят от расположения области течения с высокой вязкостью. Построены эпюры осевой скорости в различных сечениях канала. Также было отмечено влияние геометрии канала на асимметрию распределения температуры и вязкого барьера. По результатам численных исследований были определены объёмы термообратимой композиции для эффективного блокирования высокопроницаемого участка пористой среды.

Список литературы

1. Петухов Б. С., Генин Л. Г., Ковалев С. А., Соловьев С. Л. Теплообмен в ядерных энергетических установках : учеб. пособие для вузов - 3-е изд., перераб. и доп. - М. : Изд-во Моск. энергетич. ин-та, 2003. – С. 548,
2. Виноградов Г.В., Малкин А.Я. Реология полимеров. М.: Химия, 1977. С. 438.
3. Bacon R.F., Fanelli R. The viscosity of sulfur // J. Am. Chem. Soc., 1943, vol. 65, pp. 639-648.
4. Karul G.C., Frounfelker B.D., Cipriano B. H., Norman A. I., Raghavan S. R. Viscosity Increase with Temperature in Cationic Surfactant Solutions Due to the Growth of Wormlike Micelles. // Langmuir, 21(24), 10998–11004
5. Tabachnikova E.D., Bengus V.Z., Egorov D.V., Tsepelev V.S., Ocelik V. Mechanical properties of amorphous alloys ribbons prepared by rapid quenching of the melt after different thermal treatments before quenching // Mater. Sci. Eng. A, 1997, vol. 226-228, pp. 887–890.
6. Ладьянов В. И., Бельтюков А. Л., Шишмарин А. И. Температурные и концентрационные зависимости вязкости расплавов системы Fe-B // Расплавы. – 2005. – №. 4. – С. 34-40.
7. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Кувшинов И.В., Стасьева Л.А., Чертенков М.В., Андреев Д.В., Карманов А.Ю. Увеличение нефтеотдачи пермо-карбоновой залежи высоковязкой нефти Усинского месторождения физико-химическими и комплексными технологиями (обзор) // Журнал СФУ. Химия. 2018. Т. 11. № 3. С. 462-476.
8. Тома А., Саюк Б., Абирова Ж., Мазбаев Е. Полимерное заводнение для увеличения нефтеотдачи на месторождениях легкой и тяжелой нефти. // Территория Нефтегаз. 2017. С. 58-67.
9. Урманчев С.Ф., Киреев В.Н. Установившееся течение жидкости с температурной аномалией вязкости // Доклады АН. 2004. Т. 396. № 2. С. 204–207.
10. Mukhutdinova A.A., Kireev V.N., Urmancheev S.F. Influence of variable thermophysical properties on the flow of fluids in an annular channel under intensive heat exchange // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics, vol. 16, no. 1.1. (в печати).

Влияние слоя Ленгмюра на развитие неустойчивости расплавленной металлической поверхности под воздействием плазмы лазерного факела

Борматов А. А.¹, Кожевин В.М.¹, Гуревич С.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: antonbormat@mail.ru

Развитие неустойчивости на расплавленной поверхности металла, приводящее к выбросу капель, при контакте с плазмой наблюдалось во многих экспериментах как в установках термоядерного синтеза, так и в установках по наносекундной лазерной абляции металлов [1,2]. В частности, эксперименты показывают [3,4], что при воздействии лазерного излучения на металлы пиковой мощностью $q = 1 - 3$ ГВт/см² в течении $\Delta t \sim 10 - 30$ нс на поверхности мишени образуются волнообразные периодические структуры, с характерной длиной волны $\lambda \sim 1 - 10$ мкм.

Теоретические исследования, результаты которых представлены в работах [5-7], с помощью аналитических и численных моделей показали, что на динамику расплава существенно влияет электрическое поле слоя Ленгмюра, характерная ширина которого $L_{sh} \sim r_D$, где r_D – дебаевский радиус плазмы. Это влияние может в том числе приводить к генерации электрокапиллярной неустойчивости, вызванной модуляцией давления плазмы и электрического поля при возмущении поверхности. Особенность данных работ заключается в том, что расчеты проводились в области параметров плазмы, характерных для установок для термоядерного синтеза. Однако прямое применение разработанных моделей в области параметров лазерной плазмы при наносекундной абляции металлов показывает, что сильное изменение потенциала электрического поля локализуется в тонком слое вблизи поверхности металла, что в случае возмущения поверхности приводит к численной неустойчивости при проведении расчетов. Поэтому для получения распределения давлений плазмы и электрического поля вдоль поверхности расплава при контакте с плотной сильно ионизованной плазмой лазерного факела необходимо провести отдельный анализ.

Для выбора диапазона параметров плазмы вблизи поверхности мишени использовались результаты моделирования динамики лазерного факела, представленные в работе [8], которые показывают, что при абляции металла лазерным импульсом с плотностью мощности 1 ГВт/см² и длительностью 10 нс, плотность и температура электронов плазмы в начальной стадии разлета после окончания действия лазерного импульса принимает значения $n_{pl} \sim 10^{23} - 10^{25}$ м⁻³ и $T_e \sim 1 - 5$ эВ. При данных параметрах плазмы применима модель Бома для слоя Ленгмюра [9], в которой для нахождения потенциала U электрического поля решается квазилинейное уравнение Пуассона, в правой части которого записана разность плотностей ионов и электронов плазмы, причем плотность электронов подчиняется распределению Больцмана. Степень ионизации ионной компоненты учитывается с помощью приближения "эффективного" заряда ионов Z_{eff} . Вводя безразмерные величины $\phi = U/U_0$ и $\rho_i = n/n_0$, где U_0 и n_0 – характерные масштабы для потенциала электрического поля и плотности плазмы соответственно, можно записать уравнение Пуассона в следующем виде

$$\alpha \Delta \phi = \rho_i(\phi) - \exp(-\beta \phi).$$

Здесь $\alpha = (\varepsilon_0 U_0)/(q_e Z_{eff} n_0 L^2)$, где ε_0 – диэлектрическая постоянная, q_e – заряд электрона, L – характерный пространственный масштаб, а $\beta = (q_e U_0)/(k_B T_e)$, где k_B – постоянная Больцмана. Плотность ионов находится из решения уравнения неразрывности потока и уравнения движения ионов в самосогласованном электрическом поле. Заметим, что при увеличении плотности плазмы коэффициент α стремится к нулю (задача является сингулярно вырожденной). Область решения данной системы уравнений задается системой неравенств

$$\Omega = \{x, y : 0 \leq x \leq \lambda/2, A \cos(2\pi x/\lambda) \leq y \leq y_{pl}\},$$

где A – амплитуда возмущения поверхности, $y_{pl} \sim 10r_D$ – граница между слоем Ленгмюра и плазмой.

При решении данной задачи рассматривалось два подхода. В первом расчетная область разделялась на две подобласти, в каждой из которых уравнение Пуассона упрощалась, а значения потенциала на общей границе двух областей находилось из требования непрерывности напряженности поля. Во втором подходе использовалось асимптотическое разложение потенциала поля по малому параметру [10] для вывода цепочки уравнений, каждое из которых использовалось для уточнения решения. В результате применения обоих подходов были получены согласованные друг с другом результаты. По результатам расчетов было получено дисперсионное соотношение для волн на поверхности расплава, а также получены требования на параметры плазмы, при которых на поверхности металлического расплава развивается неустойчивость.

Список литературы

1. De Temmerman G. et al., Melt-layer motion and droplet ejection under divertor-relevant plasma conditions, *Nuclear Fusion*, vol. 53, № 2, 2013
2. Ахманов С. А. и др., Воздействие мощного лазерного излучения на поверхность полупроводников и металлов: нелинейно-оптические эффекты и нелинейно-оптическая диагностика, *УФН*, том. 147, №4, с. 675-745, 1985
3. Zhu Y. et al., Effect of nanosecond pulse laser ablation on the surface morphology of Zr-based metallic glass, *Optics & Laser Technology*, vol. 83, pp 21-27, 2016
4. Брайловский А. Б. и др., Формирование крупномасштабного рельефа поверхности мишени при многократном импульсном воздействии лазерного излучения, *ЖТФ*, том. 61, № 3, с. 129-138, 1991
5. Владимиров В. В. и др., Возбуждение капиллярных волн на поверхности жидкого катода, граничащего с ионным ленгмюровским слоем, *ЖТФ*, том. 57, №8, с. 1588-1597, 1987
6. Holgate J. T. et. al., Numerical implementation of a cold-ion, Boltzmann-electron model for nonplanar plasma-surface interactions, *Physics of Plasmas*, vol. 25, №4, 2018
7. Holgate J. T. et. al., Enhancement of droplet ejection from molten and liquid plasma-facing surfaces by the electric field of the sheath, *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 53, № 10, 2019
8. Bogaerts A. et al., Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling?, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, vol. 58, № 11, 2003
9. Benilov M. S., The Child–Langmuir law and analytical theory of collisionless to collision-dominated sheaths, *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 18, № 1, 2008
10. Васильева А. Б. и др. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений, М.: Высшая школа, 1990

Генерация сверхзвуковой струи газа с помощью плазменного ускорителя

Горяинов В. Ю.^{1,2}, Воронин А.В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²СПбПУ

e-mail: vgoryainov@mail.ioffe.ru

В работе представлены результаты получения потока гелия со скоростями 10-50 км/с с помощью коаксиального ускорителя плазмы [1]. В настоящее время ускоритель плазмы применяется для подпитки топливом токамака с помощью инъекции плазмы в центральную область [2,3]. Кроме того, найдено успешное применение ускорителя для инициирования разряда в токамаках с затрудненными условиями пробоя [4]. Струи газа активно применяются на ряде установок: ФТ-2, COMPASS, MAST, DIII-D, для диагностических и других целей [5]. Скорость струй при этом ограничена и близка к скорости звука (~1 км/с), что не обеспечивает глубокое зондирование плазмы. В работе представлены варианты источника сверхзвуковой гелиевой струи, применяемого для измерения температуры пристеночной плазмы в составе гелиевого полихроматора на токамаке Глобус-М2. Все результаты были получены на экспериментальном стенде плазменного ускорителя с набором разработанных и налаженных диагностик, измеряющих энергетические параметры струи. В частности, для получения потока нейтрального гелия к выходу коаксиального ускорителя плазмы с током менее 80 кА присоединялась рекомбинационная труба длиной 1.32 м.

Работа выполнена на УНУ "Сферический токамак Глобус-М", входящей в состав ФЦКП "Материаловедение и диагностика в передовых технологиях", в рамках государственного задания ФТИ им. А.Ф. Иоффе; создание и модернизация источника проводилась по госзаданию № 0040-2019-0023, разработка диагностик осуществлялась в рамках госзадания № 0034-2021-0001; а также поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках гос. задания в сфере науки по проекту №0784-2020-0020.

Список литературы

1. А.В. Воронин, В.Ю. Горяинов, В.К. Гусев 2020 *ЖТФ* **90** 6 1028-34 <https://doi.org/10.1134/S1063784220060286>
2. A.V. Voronin, V.K. Gusev, E.V. Demina, A.D. Ibyaminova, S.A. Lepekhov, I.V. Miroshnikov, V.B. Minaev, E.E. Mukhin, A.N. Novokhatsky, Yu.V. Petrov, M.D. Prusakova, N.V. Sakharov, S.Yu. Tolstyakov *41st EPS Conference of Plasma Physics June 23-27, 2014, Berlin, Germany* **38F** P-4.035
3. A.V. Voronin, B.B. Ayushin, V.K. Gusev, G.S. Kurskiev, M.M. Kochergin, E.E. Mukhin, V.B. Minaev, I.V. Miroshnikov, Yu.V. Petrov, M.I. Patrov, N.V. Sakharov, S.Yu. Tolstyakov, A.V. Zabuga *36st EPS Conference of Plasma Physics June 29 – July 3, 2009, Sofia, Bulgaria* **33E** P-5.157
4. A.V. Voronin, V.Yu. Goryainov, V.K. Gusev, V.B. Minaev, A.N. Novokhatsky, Yu.V. Petrov, N.V. Sakharov, E.G. Zhilin, B. Chektybaev, E.A. Sarsembaev, A.D. Sadykov, A.T. Kusainov 2021 *Plasma Phys. Rep.* **47** 8 763-71. doi:10.1134/S1063780X21080109
5. Ahn J.W., Craig D., Fiksel G. et al. *Phys. Plasmas*. 2007 **14** 083301

Исследование параметров индуктивно-связанной плазмы, полученной в водород-аргон-фторидной среде

Преображенский Е. И.¹, Синцов С.В.^{1,2}, Водопьянов А.В.^{1,2}

¹ИПФ РАН, Россия, г. Нижний Новгород

²ННГУ им. Лобачевского, Россия, г. Нижний Новгород

e-mail: *evgenypr@ipfran.ru*

В современной плазмохимии актуальной задачей является изучение параметров химически активной низкотемпературной плазмы. Прикладной интерес представляют собой соединения фтора и хлора, которые используются при получении высокочистых веществ при помощи плазмохимического синтеза [1]. Например, соединения фтора нашли применение в задачах изотопного обогащения [2] или высокоэффективном получении твердой фазы при разложении летучих галогенидов в низкотемпературной плазме [3]. Задача данной работы состояла в измерении температуры и концентрации электронов, а также в оценке особенностей функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) [4], [5]. Полученные параметры плазмы в дальнейшем могут быть использованы для моделирования плазмохимических процессов.

Плазменный разряд зажигался в кварцевой трубке диаметром 5 см, вокруг которой обмотан индуктор, подключенный к генератору с мощностью до 600 Вт и частотой 13.56 МГц. В качестве плазмообразующих газов были использованы смеси Ar, H₂, CH₄ с летучими соединениями фторидов (BF₃, SiF₄, GeF₄). Диапазон давлений был от 10⁻² до 3 торр.

Для измерения параметров химически активной плазмы индукционного разряда был использован «быстрого» электрического зонда, основное преимущество которого состоит в локальности измерений [6]. На электрический зонд подается сигнал, период которого меньше характерного времени изменения плазменных параметров, а величина амплитуды напряжения достаточна для обеспечения насыщения вольт-амперной характеристики (ВАХ). В данной работе используется метод «быстрого» зонда, поскольку зонд загрязняется продуктами плазмохимического синтеза. Зонд вводился в плазму на 1 с для снятия нескольких десятков периодов сигнала. Экспериментально показано, что в таком режиме примерно после 50 итераций зонд начинает загрязняться, что приводит к искажению получаемых ВАХ. Зонд представлял собой проволоку из молибдена с толщиной 0.3 мм, часть длины которой изолирована керамической оболочкой.

В работе при различных значениях давлений, соотношений потоков газов и мощностей разряда были измерены концентрации и температуры заряженных частиц с помощью двойного зонда. Также при аналогичных параметрах были оценены ФРЭЭ при помощи одиночного зонда Ленгмюра. Благодаря «быстрому» зондированию для каждого режима горения разряда было получено несколько десятков осциллограмм, что позволяло провести усреднение ВАХ и повысить точность вычисления плазменных параметров. Температура электронов в зависимости от режима поддержания разряда находилась в диапазоне от 3 эВ до 14 эВ, а концентрация электронов в пределах от 6·10¹⁰ см⁻³ до 4·10¹² см⁻³. Для вычисления ФРЭЭ дополнительно использовался фильтр Савицкого-Голея с целью сглаживания погрешностей при вычислении производной. Характеристики полученных ФРЭЭ хорошо согласуются с плазменными параметрами, измеренными с помощью двойного электрического зонда.

Список литературы

1. Полак Л.С, Овсянников А.А., Словецкий Д.И., Вурзель Ф.Б. Теоретическая и прикладная плазмохимия.—М.; Наука, 1975.
2. Kornev, R. A., Sennikov, P. G., Sintsov, S. V., & Vodopyanov, A. V. (2017). Microwave Interferometry of Chemically Active Plasma of RF Discharge in Mixtures Based on Fluorides of Silicon and Germanium. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 37(6), 1655–1661.
3. Kornev, R. A., Sennikov, P. G., Shabarova, L. V., Shishkin, A. I., Drozdova, T. A., & Sintsov, S. V. (2019). Reduction of Boron Trichloride in Atmospheric-Pressure Argon–Hydrogen Radiofrequency Induction Plasma. *High Energy Chemistry*, 53(3), 246–253.
4. Godyak, V. A., & Demidov, V. I. (2011). Probe measurements of electron-energy distributions in plasmas: What can we measure and how can we achieve reliable results? (*Journal of Physics D: Applied Physics* (2011) 44 (233001)). *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44(26).
5. Sintsov, S., Mansfeld, D., Preobrazhensky, E., Kornev, R., Chekamrev, N., Viktorov, M., Ermakov, A., & Vodopyanov, A. (2022). Study of the Electron Density in an Inductively Coupled Plasma of Fluorine-Hydrogen-Argon Gas Mixture. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 42(6), 1237–1247.
6. Andruczyk, D., Tarrant, R. N., James, B. W., Bilek, M. M. M., & Warr, G. B. (2006). Langmuir probe study of a titanium pulsed filtered cathodic arc discharge. *Plasma Sources Science and Technology*, 15(3), 533–537.

Диагностика FIDA для исследования функции распределения быстрых ионов при нейтральной инжекции на токамаке ТУМАН-3М

Шувалова Л. К.¹, Аскинази Л.Г.¹, Белокуров А.А.¹, Жубр Н.А.¹, Киселев Е.О.¹, Корнев В.А.¹, Лебедев С.В.¹,
Разуменко Д.В.¹, Смирнов А.И.¹, Тукачинский А.С.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: shuvalova-lyuba@mail.ru

Диагностика быстрых ионов FIDA (Fast-ion D-alpha) [1] состоит в измерении и анализе спектра излучения, возникающего в результате девозбуждения атомов дейтерия или водорода, образовавшихся при перезарядке быстрых ионов на атомах нагревного пучка. Анализ этих спектров, регистрируемых обычно в разных ракурсах по отношению к направлению инжекции и области локализации быстрых ионов, позволяет получить информацию о функции распределения последних. На токамаке ТУМАН-3М проведены первые эксперименты по измерению сигналов FIDA при инжекции атомов водорода, в некоторых из которых обнаружены искажения спектра излучения, связанные с наличием в плазме быстрых атомов и ионов. Однозначная интерпретация этих спектров, однако, затруднена вследствие слабости сигналов и влияния более сильного излучения, вызванного другими процессами, например свечением атомов самого нагревного пучка или излучением примеси. Кроме того, требуется учет конкретной геометрии наблюдения в каждом эксперименте.

Для количественной интерпретации зарегистрированных спектров использовался код FIDASIM [2], реализующий метод Монте-Карло. Он позволяет получить функцию распределения быстрых ионов через моделирование спектров, регистрируемых по реальным линиям наблюдения, с дальнейшим достижением наилучшего совпадения с экспериментально наблюдаемыми спектрами путем подбора параметров функции распределения быстрых ионов и коэффициентов, описывающих их торможение и потери.

Для работы FIDASIM необходимы параметры плазмы (данные о магнитных полях, профили температуры, концентрации, эффективного заряда и другие) и атомарного и ионного пучков, часть из которых доступна в эксперименте, а остальные получаются путем моделирования разряда совместно кодами ASTRA [3] и NUBEAM [4]. Требовательность FIDASIM к количеству входных данных и их виду привела к необходимости разработки специального интерфейса между этими кодами и FIDASIM. В первую очередь была установлена связь между транспортным кодом ASTRA и связанным с ним модулем NUBEAM посредством дополнительной утилиты обработки входных параметров на пространственную сетку NUBEAM, в их числе плазменные профили, карта магнитных поверхностей, геометрия нейтральной инжекции и информация о составе пучка. В результате взаимодействия двух кодов была получена функция распределения быстрых ионов. В дальнейшем была установлена связь между текущим набором данных с кодом FIDASIM через подпрограмму для считывания и преобразования на новую пространственную сетку параметров из созданных в процессе вывода из ASTRA и NUBEAM файлов. Помимо информации о равновесии, состоянии плазмы и распределении быстрых ионов, была добавлена реальная геометрия спектральной диагностики. После проведения полного описания требуемых входных параметров, а также поиска оптимальных настроек моделирования, таких как число пробных частиц для моделирования Монте-Карло, были получены синтетические спектры излучения FIDA и проведено сравнение

их с зарегистрированными в эксперименте. В дальнейшей работе планируется получить инструмент для определения функции распределения быстрых ионов по совпадению экспериментального и синтетического спектров.

Кроме моделирования диагностики перезарядки быстрых ионов, было исследовано их поведение в плазме токамака ТУМАН-3М, а также влияние на их удержание электрических полей.

Обеспечение функционирования токамака ТУМАН-3М и работы стандартных диагностик осуществлялось при поддержке государственного контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0040-2019-0023. Создание комплекса диагностики FIDA и моделирование ее работы на токамаке ТУМАН-3М было осуществлено при поддержке государственного контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0034-2021-0001. Исследование влияния электрических полей было проведено при поддержке гранта РФФИ № 22-12-00062.

Список литературы

1. W.W. Heidbrink, Fast-ion D-alpha measurements of the fast-ion distribution, Review of scientific instruments 81, 10D727 (2010)
2. URL: <https://d3denergetic.github.io/FIDASIM/index.html>
3. G. V. Pereverzev, P. N. Yushmanov, A. Yu. Dnestrovskii, A. R. Polevoi, K. N. Tarasjan, L. E. Zakharov, ASTRA, An Automatic System for Transport Analysis in a Tokamak, Report IPP 5/42, August 1991.
4. A. Pankin et al, The tokamak Monte Carlo fast ion module NUBEAM in the National Transport Code Collaboration library, Computer Physics Communications 159 (2004) 157–184

Исследование динамики структуры и параметров плазмы лазерной искры

Водопьянов А. В., Сидоров А.В., Веселов А.П.
ИПФ РАН

e-mail: *avod@ipfran.ru*

В работе обсуждается пробой воздуха, аргона и криптона атмосферного давления сфокусированным излучением с длиной волны 10.6 мкм. Использовался углекислотный лазер с длительностью импульса 100 нс и энергией в импульсе до 1.2 Дж. Для фокусировки излучения использовалась двояковыпуклая просветленная линза из селенида цинка с фокусным расстоянием 38 мм. Размер пятна фокусировки составлял 80 мкм в диаметре.

При помощи техники скоростной фотографии исследовалась динамика структуры разряда с временным шагом 20 нс, измерены скорости распространения разряда. Было подтверждено, что распространение разряда при атмосферном давлении носит детонационный характер, скорость распространения составляет $5 \cdot 10^6$ см/с и уменьшается по мере удаления фронта разряда от фокальной плоскости.

В работе также приводится результат исследования зависимости температуры плазмы от параметров горения разряда. Температура плазмы измерялась по эмиссионному спектру в оптическом диапазоне и в случае разряда в воздухе составляла около 3 эВ.

Пучково-плазменные технологии для решения проблем современной энергетики

Штода Е. В.¹, Грабовский А. Ю.¹

¹Санкт-Петербургский горный университет

e-mail: *shtoda.e@mail.ru*

Сегодня важнейшей задачей развития Арктического региона и других труднодоступных областей России является разработка эффективных систем энергообеспечения объектов промышленности и социальной инфраструктуры. Среди путей решения этой проблемы - разработка компактных ядерных энергетических установок нового поколения [1].

Для достижения этой цели необходимы надежные приборы на базе анизотропной плазмы [2], способные функционировать в условиях высокого уровня радиации и температуры. Этим требованиям удовлетворяет электроника, использующая низковольтный пучковый разряд (НПР) в качестве рабочей среды [3].

В работе представлены результаты экспериментальных исследований анизотропной плазмы гелиевого НПР в рабочих условиях трехэлектродного стабилизатора тока и напряжения. Измерены энергетические и угловые зависимости функции распределения электронов по скоростям и распределение потенциала в плазме. Показана возможность эффективного управления распределением заряженных частиц с помощью внешнего управляющего электрода. Реализованы новые режимы горения разряда, с принципиально различными механизмами токопереноса, что позволило в условиях одного прибора совместить функции стабилизатора тока плотностью (10^{-1} - 10^1 А/см²) и напряжения в диапазоне (10-100 В).

Список литературы

1. Иванов С.В., Кузнецов В.И. Энергетическая стратегия развития Арктики и районов крайнего Севера Российской Федерации до 2030 года // Региональная Энергетика и Энергосбережение. 2021. № 1. С. 58-61.
2. V.I. Demidov, C. A. DeJoseph, Jr., and A. A. Kudryavtsev, Phys. Rev. Lett. 95, 215002 (2005).
3. Mustafaeв, A., Grabovskiy, A., Sukhomlinov, V. Suppression of Instabilities in a Plasma Voltage Stabilizer. Appl. Sci. 2022, 12, 3915. <https://doi.org/10.3390/app12083915>

Термодинамика взаимодействия металлической струи с аналогами лунного грунта

Румянцев Б. В.¹, Козачук А.И., Павлов С.И.

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *brum@mail.ioffe.ru*

Исследуется взаимодействие металлической струи со скоростью 6-8 км/с в ситаллы и ультрафарфор (ХМ), являющиеся аналогами лунных грунтов. С помощью электронной микроскопии анализируется состояние материалов после взаимодействия. Наблюдаемые фазовые превращения металла и неорганических материалов свидетельствует о высоких температурах и давлениях в зоне внедрения, определяемые высоким уровнем кинетической энергии высокоскоростной металлической струи, соотношением физико-механических и термодинамических параметров взаимодействующих материалов.

Изучение внедрения металлических струй в твердые тела имеет большое практическое значение при решении задач защиты космических аппаратов от фрагментов техногенного мусора со скоростью 2–8 км/с [1–6] при освоении Луны и планет.

Наблюдаемые состояния остаточных продуктов взаимодействия медной струи с ХМ прежде всего определяются скоростью металлической струи, т.е. кинетической энергией, которая при торможении расходуется на вытеснение, диспергирование ХМ и тепловые потери. Зафиксированные свидетельства о следах испаренной меди, плавлении ХМ свидетельствуют о динамическом нагреве локальных областей взаимодействия до температур выше 3000 К [5]. Наиболее вероятными местами локального нагрева является прохождение струи через область схлопывания откольных фрагментов разрушения ХМ и скольжения обратного потока меди относительно стенок каверны.

При скорости струи меди 6 - 8 км/с максимальное давление при внедрении в ситалл и ультрафарфор составляет 30–50 ГПа, что явно недостаточно для ударного нагрева меди до испарения. В тоже время, установленное наличие испаренной меди свидетельствует о дополнительном нагреве при не адиабатическом сдвиговом взаимодействии с ХМ на стенках и в области радиального схлопывания откольных фрагментов поверхности каверны [5, 6].

Можно предположить, что, кроме скорости удара, высокая температура плавления и низкая теплопроводность ХМ способствуют поддержанию температуры на уровне испарения материала струи.

Таким образом, высокая прочность ХМ при внедрении медной струи обеспечивает схлопывание откольного слоя каверны, а также последующее возмущение и разрушение струи [3-5]. На границе металлическая струя - хрупкий материал значительный градиент скорости приводит к образованию области локального нагрева с плавлением и испарением в соответствии с соотношением термодинамических параметров металл - керамика. И.

В результате, последовательное гидродинамическое проникание превращается в объемное с накоплением материала струи в области внедрения.

Радиальная реакция ХМ при высокоскоростном внедрении металла создает условия для дестабилизации гидродинамического режима внедрения и эффективного преобразования

направленной кинетической энергии струи в тепловую.

Список литературы

1. Z. Rosenberg and E. Dekel, *Terminal Ballistics* / Springer. 2016. P.359. ISBN:9789811003950.
<https://www.springer.com/us/book/9789811003936>
2. M. Held, Prop. Expl. Pyrotechn. **23**, 105 (1998).
3. B.V.Rumyantsev, Tech. Phys. **64**, 635 (2019). <https://doi.org/10.21883/JTF.2019.05.47469.337-18>
4. G. E. Hauver, P. H. Netherwood, R. F. Bensk, and Melani, Tech. Report BRL-TR-3273 (U. S. Army Ballistic Res. Lab., Aberdeen Proving Ground, MD, 1991).
5. B. V. Rumyantsev and V. Yu. Klimenko, AIP Conf. Proc. **1426**, 56 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.3686220>
6. D. Zhu, Z. Zheng, and Q. Chen, Mater. Sci. Eng., A **595**, 241 (2014). <https://doi.org/10.1016/J.MSEA.2013.12.025>

Дизайн системы замедления нейтронного потока для нейтронного генератора ИПФ РАН

Выбин С. С.¹, Голубев С.В.¹, Изотов И.В.¹, Скалыга В.А.¹

¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук»

e-mail: vybinss@ipfran.ru

В настоящее время развитие технологии бор-нейтронозахватной терапии рака (БНЗТ) сдерживается из-за недостаточного количества доступных нейтронных источников, обладающих достаточной интенсивностью [1]. В Институте прикладной физики РАН ведутся разработки непрерывного интенсивного (ожидаемый нейтронный выход порядка 10^{11} с^{-1}) нейтронного генератора, основанного на D-D реакции [2]. Установка включает в себя газодинамический ионный источник, который формирует пучок ионов дейтерия (с полным током в несколько сотен мА), направленный на нейтроногенерирующую мишень. При этом происходит генерация нейтронов с энергией 2.5 МэВ. Планируется добиться полного тока пучка на уровне 500 мА при его энергии, равной 100 кэВ.

Предполагается использование данного нейтронного генератора для проведения экспериментов по облучению нейтронами клеточных культур, а также небольших биологических объектов в интересах развития методов БНЗТ. В зависимости от постановки задачи, необходимо воздействовать на биологический образец потоком нейтронов теплового (менее 0.5 эВ) или эпитеплового (от 0.5 эВ до 10 кэВ) диапазонов энергии. Для снижения энергии генерируемых быстрых нейтронов используется замедлитель нейтронов, который располагается между источником и образцом.

Для подготовки к эксперименту необходимо провести оптимизацию параметров замедляющей системы. Это позволит уменьшить негативное влияние излучения быстрых нейтронов, а также снизит требуемое время облучения образцов для достижения биологического эффекта.

В данной работе представлены результаты численных расчетов системы формирования нейтронного потока, которая включает в себя: замедлитель, отражатель и нейтронную защиту. Последняя необходима для уменьшения радиационного фона (до допустимого уровня) вблизи установки во время проведения экспериментов. В этой работе описан дизайн системы для проведения эксперимента по облучению клеточных культур. В ходе оптимизации преследовалась цель увеличения потока тепловых нейтронов через образец при снижении потока нейтронов с более высокой энергией. Были оптимизированы геометрические размеры системы формирования нейтронного потока.

В качестве материала замедлителя использовалась легкая вода. Материалом нейтронного отражателя был выбран свинец. В состав нейтронной защиты входят слои из борированного полиэтилена (с содержанием бора 30% по массе), а также слои свинца, необходимые для ослабления потока вторичного гамма излучения.

Распространение нейтронов в веществе моделируется методом Монте-Карло. Значения сечений столкновения нейтрона с ядрами взяты из базы данных JENDL-4.0.

Данная работа выполнена в рамках научного проекта «Новые источники синхротронного излучения и нейтронов на принципах лазерного ускорения заряженных частиц», финансируемого Министерством образования Российской Федерации и реализуемого в соответствии с соглашением № 075-15-2021-1361 от 07.10.2021 г.

Список литературы

1. Думова М. А., Taskaev S. Y., Richter V. A., Kuligina E. V., Boron neutron capture therapy: Current status and future perspectives, *Cancer Communications*, том. 40, 406–421, 2020 г.
2. Выбин С. С., Изотов И. В., Скалыга В. А., Палашов О. В., Миронов Е. А., Модернизация ионного источника нейтронного генератора ИПФ РАН, *Журнал технической физики*, том. 92, 1930, 2022 г.

Применение плотной плазмы электронно-циклотронного резонансного разряда для генерации положительных и отрицательных ионов водорода

Скалыга В. А.¹, Изотов И.В.¹, Выбин С.С.¹, Голубев С.В.¹, Поляков А.В.¹, Киселёва Е.М.¹
¹ИПФ РАН

e-mail: *skalyga@ipfran.ru*

Одним из перспективных источников сильноточных пучков положительных и отрицательных ионов представляется разряд, поддерживаемый в условиях электронно-циклотронного резонанса (ЭЦР) в открытых магнитных ловушках мощным излучением миллиметрового диапазона длин волн. В ИПФ РАН проведены разработки импульсных и непрерывных источников положительных ионов изотопов водорода с рекордными характеристиками по качеству и составу формируемых пучков. В докладе будут представлены последние результаты с экспериментальных установок SMIS 37 и GISMO по генерации пучков для инъекции в линейные ускорители. В настоящее время также рассматривается вариант модернизации таких систем для получения пучков отрицательных ионов. В источнике предлагается использовать две последовательные магнитные ловушки – в первую вводится микроволновое излучение и зажигается ЭЦР разряд, плазма которого через закритическое для микроволнового излучения отверстие (отражающую микроволновое излучение сетку) перетекает во вторую магнитную ловушку, где под действием быстрых электронов происходит возбуждение, диссоциация и ионизация газа. В такой плазме во второй ловушке за счет взаимодействия остывших электронов с возбужденными молекулами водорода может происходить образование отрицательно заряженных ионов водорода. Использование для поддержания разряда мощного миллиметрового излучения позволяет получать в ЭЦР разряде плазму с высокой плотностью, и главное, обеспечить высокий удельный энерговклад и высокую, оптимальную для возбуждения атомов водорода, температуру электронов. Эффективность такого подхода продемонстрирована в импульсном режиме работы с использованием излучения гиротрона с частотой 37,5 ГГц и мощностью до 100 кВт, длительность импульса 1 мс, получены токи отрицательных ионов водорода до 80 мА/см². В докладе будут представлены результаты исследований по генерации отрицательных ионов водорода на экспериментальном стенде GISMO, на котором возможно непрерывное поддержание горения плазмы при ее нагреве излучением гиротрона с частотой 28 ГГц и мощностью до 10 кВт.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ №21-12-00297.

Определение параметров высокоскоростного потока газа по величине теплового потока и давления в критической точке затупленного тела

Попов П. А.¹, Монахов Н.А.¹, Сахаров В.А.¹, Куракин Р.О.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *pavel.popov@mail.ioffe.ru*

Достоверное определение параметров сверхзвукового потока является важным этапом любого газодинамического эксперимента. В случае установок длительного действия, параметры газа с высокой точностью можно рассчитать по измеряемой температуре и давлению в форкамере. Принципиально иная ситуация при использовании импульсных установок, например, ударных аэродинамических труб с соплом, работающем в режиме отражения. В большинстве случаев, используется метод, основанный на расчете равновесного состояния реального газа за отраженной ударной волной по начальному давлению в камере низкого давления и измеренному числу Маха падающей ударной волны. Далее параметры потока на выходе из сопла рассчитываются по одномерной модели. Применение данного метода в случае высоких энтальпий газа может приводить к погрешностям, связанным с неопределенностью температуры в зоне торможения из-за сложной системы волн и потерями на излучение. Дополнительным источником погрешностей при таком способе расчета течения в сопле является термическая и химическая неравновесность, а также образование нестационарного турбулентного пограничного слоя. Возможным решением данной задачи является детальное численное моделирование с учетом всех описанных факторов. Такой подход требует значительных вычислительных ресурсов и не может быть использован в режиме сопровождения экспериментальных исследований.

Достаточно простым и достоверным является экспериментальный метод определения параметров сверхзвукового потока, основанный на одновременном измерении теплового потока и давления в критической точке затупленного тела [1]. Используя данный подход, на Большой ударной трубе ФТИ им. А.Ф. Иоффе была проведена диагностика течения при различной энтальпии, охватывающей как случай идеального газа, так и заметной диссоциации азота и неравновесности течения в сопле. Для измерения теплового потока использовался датчик на гетерогенных металлических структурах, имеющий высокую механическую прочность, и позволяющий проводить измерения при высоких температурах торможения, вплоть до 5000 К [2]. Далее, с помощью созданной программы определялись полная энтальпия потока, температура торможения, массовый поток и динамическое давление. В программе учитываются реальные свойства и состав рабочего газа при высоких температурах. Сравнение экспериментального значения энтальпии потока у модели и рассчитанной по состоянию газа в области отражения позволяет установить наличие неизэнтропических процессов в сопле. Полученные результаты показывают корректность применяемой методики обработки тепловых измерений и определения параметров на выходе из сопла и находятся в соответствии результатами расчета течения на основе одномерной модели.

Список литературы

1. Sangdi Gu, Herbert Olivier, Chih-Yung Wen, Jiaao Hao, and Qiu Wang, Characterization of reflected shock tunnel air conditions using a simple method, *Physics of Fluids* 34, 056103 (2022) <https://doi.org/10.1063/5.0089120>

2. Sapozhnikov S.Z., Mityakov V.Yu., Mityakov A.V. Heatmetry: The Science and Practice of Heat Flux Measurement: Heat and Mass Transfer (2020) Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-40854-1>

Влияние ультразвуковых волн на возникновение разряда в жидкости

Барышников А. С.¹, Захаров М.А.², Груздков А. А.³

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Балтийский университет

³СПбГТИ

e-mail: *al.bar53@gmail.com*

Кавитационные явления в жидких средах, как и твердых телах, оказывают существенное влияние на физические свойства сред. Это связано с тем, что «схлопывание» пузырька, сопровождается кумулятивными явлениями: возрастанием температуры и давления в центре пузырька [1].

Для описания динамики одиночного пузырька в жидкости используется уравнение Рэлея, которое при учёте ультразвука преобразуется в уравнение Нолтинга-Неппайреса добавлением в свободный член периодического давления звуковой волны [2], так как жидкость считается несжимаемой. Если учитывать сжимаемость, то внутри жидкости вне пузырька решение имеет вид бегущей волны, так как уравнение сохранения материи преобразуется в волновое уравнение. В жидкости скорость распространения звуковой волны намного больше, чем в газе (в воде 1500 м/с). Поэтому задержка появления волны на достаточно большом расстоянии не существенно скажется на решении уравнения распространения звука. Таким образом, на расстояниях более длины звуковой волны решение движения жидкости вблизи пузырька нужно искать в гармоническом виде. При этом скорость движения жидкости вне пузырька имеет вид: $V=V_0\cos(\omega t)$, так как скорость V должна непрерывно переходить в скорость в несжимаемой жидкости, V_0 , когда частота звукового поля $\omega=0$.

В работе предполагается малая концентрация пузырьков, что снижает вероятность механизма слияния пузырьков, рассматривается одиночный пузырек, который испытывает растяжение и сжатие внутри звуковой волны. Диаметр пузырька считается гораздо меньше длины звуковой волны. Учитывается вязкость жидкости. Диффузия и испарение на поверхности пузырька не учитываются. Повторяя вывод уравнения Рэлея, получаем уравнение аналогичное уравнению Рэлея, но с коэффициентом при старшей производной, обращающийся в ноль при $\omega t = \pi/2$, а именно $\cos(\omega t)$, поэтому расчеты демонстрируют неустойчивость. При уменьшении шага в 2 раза (порядка миллиона шагов за единичное время), решение стабилизируется, но обнаруживает различное поведение в зависимости от частоты ультразвука. Причем это происходит даже при малом изменении частоты ультразвука. Так при частоте $f = 15.5$ кГц в критический момент безразмерного времени, равного $\pi/2$, безразмерной скорости растяжения жидкости $u_0 = 10^{-4}$ и размере пузырька $R_0 = 10^{-5}$ м пузырек испытывает резкое схождение. При частоте же $f = 16$ кГц пузырек резко расширяется. Такое разное поведение пузырька при близких частотах удалось объяснить теоретически. Происходит своеобразный резонанс колебаний звука и собственных колебаний пузырька.

В реальности звуковые колебания представляют собой группу волн близких частот. Поэтому столь резкий переход от схождения к расширению пузырька и наоборот должен приводить к тому, что при некоторых средне-групповых частотах имеет место и расширение и схлопывание пузырьков одновременно, что способствует образованию газообразных сред с высокой

температурой, плазмы. Если это происходит в электрическом поле, то может возникнуть электрический разряд высокой интенсивности. Есть сведения, что подобный разряд наблюдается в эксперименте [3]. Объяснения этому эффекту пока не имеется.

Список литературы

1. Хилл, К., Бэмбер, Дж., тер Хаар, Г. ред. Ультразвук в медицине. Физические основы применения. Пер. с англ. М.:Физматлит, 2008. 544с.
2. Noltingk В.Е., Neppiras E.A.//Cavitation produced by ultrasonics. Proc. Phys.Soc. 63В. С.674—685. 1950.
3. Академик РАЕН Климов А.И. Частное сообщение

Особенности формирования ледяных наростов на симметричном и несимметричном профиле и их влияние на аэродинамические характеристики крыла

Амелюшкин И. А.¹, Павленко О.В.^{1,2}, Февральских А.В.³, Багдади М. К.²

¹ЦАГИ

²МФТИ

³МАИ

e-mail: *amelyushkin_ivan@mail.ru*

Определение аэродинамических характеристик, а также параметров устойчивости и управляемости летательного аппарата с учетом возможного нарастания льда на его поверхности является актуальной задачей проектирования летательной техники, в частности, объектов малой авиации, гидросамолетов и экранопланов [1]. Для несущего крыла таких аппаратов, как правило, выбирается существенно несимметричный профиль, обеспечивающий высокие значения удельной нагрузки на крыло. В то же время для горизонтального оперения в основном выбирают профиль с формой, близкой к симметричной относительно его хорды (например, НАСА 0012), которая позволяет обеспечить необходимую величину стабилизирующего момента по тангажу при незначительном изменении центра аэродинамического давления, действующего на летательный аппарат в процессе полета. Опыт расчетов форм нарастающего льда [2] и аэродинамических характеристик [3] симметричных и несимметричных профилей по результатам численного моделирования на основе метода контрольных объемов указывает на существенные различия в сценариях образования ледяных наростов (и как следствие - влияния льда на аэродинамические характеристики), прогнозирование и управление которыми требует проведения дополнительных исследований.

Для достижения этой цели в настоящей работе с использованием методов численного моделирования проведены параметрические исследования образования льда на симметричных и несимметричных профилях, проведен анализ результатов, получены оценки параметров противообледенительных систем и предложения по их более рациональному размещению.

Список литературы

1. Февральских А.В. Численное моделирование обледенения крыла экраноплана / А.В. Февральских // Труды Крыловского государственного научного центра. – 2019. – № 4(390). – ISSN: 2542-2324 – с. 117-124
2. И.А. Амелюшкин, М.А. Кудров, А.О. Морозов, А.С. Щеглов, Математические модели и методы расчета процессов, сопровождающих обледенение летательного аппарата // Труды ИСП РАН, том 33, вып. 5, 2021 г., С. 237 – 247
3. Сидоров К. К., Основополагающая статья, Высокоцитируемый журнал, том. 234, 212-219, 1999 г.

Изучение свойств ионно-циклотронных колебаний в модернизированном сферическом токамаке Глобус-М2

Кулыгин М. С.^{1,2}, Балаченков И. М.¹, Бахарев Н.Н.¹, Варфоломеев В.И.¹, Гусев В. К.¹, Киселёв Е. О.¹, Минаев В.Б.¹, Патров М. И.¹, Петров Ю. В.¹, Сахаров Н.В.¹, Тельнова А. Ю.¹, Щеголев П. Б.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²СПбПУ

e-mail: kulygin.ms@edu.spbstu.ru

В токамаке Глобус-М2 [1, 2] в разрядах с инжекцией нейтрального пучка ($E_{NBI} \approx 28.5$ кэВ, $P_{beam} \approx 0.85$ МВт) на стадии плато тока при помощи магнитных зондов было зарегистрировано излучения в ион-циклотронном диапазоне частот. Излучение регистрировалось в диапазоне магнитных полей $B_0 = 0.7 - 0.9$ Тл и токов по плазме $I_p = 300 - 400$ кА. Ион-циклотронное излучение (ICE) как правило возникает [3] за счет резонанса циклотронного вращения надтепловых ионов с различными неустойчивостями плазмы. В качестве резонансных частиц как правило рассматривают продукты реакции термоядерного синтеза или ионы, получившие энергию за счет дополнительного нагрева (нейтральная инжекция, нагрев на частоте ион-циклотронного резонанса). Изучение ICE представляет большой интерес, поскольку может быть применено для диагностики, например альфа-частиц [4].

Для наблюдения ICE использовался тороидальный массив, состоящий из восьми магнитных зондов, регистрирующих полоидальную компоненту магнитного потока. Для определения поляризации использовался трехкоординатный зонд. В предположении, что регистрируемое излучение является ионно-циклотронным, была установлена центральная локализация излучения путём сопоставления его частоты с циклотронной частотой, полученной из восстановленного магнитного равновесия. Также при помощи методов спектрального и корреляционного анализа были определены тороидальные номера мод и установлено, что ICE формирует структуры в виде как стоячих, так и бегущих волн. При помощи трехкоординатного зонда была определена продольная (по отношению к магнитному полю) поляризация излучения. Кроме того, была установлена линейная зависимость частоты ICE от магнитного поля и её уменьшение с ростом концентрации.

В рамках усовершенствования магнитной диагностики планируется ввести в работу новый полоидальный массив быстрых магнитных зондов в количестве 16 штук, который позволит регистрировать колебания магнитного поля в диапазоне ион-циклотронных частот и определять полоидальные номера мод вплоть до $m = 7$. В дополнение к полоидальному массиву зондов будет введена система гальванической изоляции трактов сигналов, обеспечивающая улучшенную помехозащиту.

Список литературы

1. Minaev V B et al 2017 *Nucl. Fusion* **57** 066047
2. Bakharev N. N. et al. 2020 *Plasma Phys. Reports* **46**(7) 675-682
3. D’Inca R. «Ion cyclotron emission on ASDEX upgrade» Ph.D. thesis, Ludwig-Maximilians-Universität, Munich, Germany, 2014
4. G.A. Cottrell, et al., *Nucl. Fusion* **33** (1993) 1365

Влияние угла скольжения и работы воздушных винтов на концах крыла на индуктивное сопротивление

Павленко О. В.¹, Пигусов Е.А.^{1,2}, Айшвария Сантош², Мостафа Гази Реслан²

¹ЦАГИ

²МФТИ)

e-mail: *olga.v.pavlenko@yandex.ru*

В последнее время, когда обращают на себя внимание проблемы экологии, в мире появились разработки летательных аппаратов, которые используют солнечную энергию для поддержания и обеспечения полета [1]. Подобные летательные аппараты имеют специфическую конструкцию и крыло большого размаха, а их несущие поверхности покрыты фотоэлементами. Для летательных аппаратов, которые совершают длительный полёт на крейсерском режиме, актуальной задачей является снижения воздушного сопротивления, так как это позволяет им увеличить аэродинамическое качество, снизить энергетические затраты и увеличить длительность полета, тем самым обеспечивая конкурентоспособности создаваемой летательной техники [2].

В данной работе представлены результаты численного исследования влияния изменения угла скольжения на обтекание самолета [3] с механизированным крылом сверхбольшого удлинения ($\lambda=23$) с установленными на его концах с тянущими двухлопастными воздушными винтами, диаметром 0.22 м, с частотой вращения $N = 15000$ об/мин., а также без установленных воздушных винтов. Расчеты проведены с использованием программы, основанной на решении осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса при скорости набегающего потока $V=50$ м/с и числе Рейнольдса $Re = 0.35 \times 10^6$ при отклоненной механизации крыла $d = 15^\circ$, соответствующей ее взлетному положению.

Показано, что увеличение угла скольжения снижает индуктивное сопротивление, как с работающими воздушными винтами, так и без них. При увеличении положительной величины угла скольжения $+b$ индуктивное сопротивление правой наветренной консоли крыла больше, чем левой, а индуктивное сопротивление крыла с работающими на его концах винтами примерно в 1.7 раза больше, чем без них. При этом, следует отметить, что в диапазоне больших углов скольжения $12^\circ \leq b \leq 20^\circ$ производная функции коэффициента индуктивного сопротивления по углу скольжения с работающими воздушными винтами выше, чем без них.

Список литературы

1. Лисейцев Н.К., Самойловский А.А. Современное состояние, проблемы и перспективы развития самолетов, использующих солнечную энергию // Электронный журнал «Труды МАИ». 2012. Выпуск №55. URL: https://mai.ru/upload/iblock/bd2/sovremennoe-sostoyanie_problemy-i-perspektivy-razvitiya-samoletov_-_ispolzuyushchikh-solnechnuyu-energiyu-dlya-poleta..pdf
2. Теперин Л.Л., Притуло, Орфинежад Ф.Э., Мьё Тхейн, Средства снижения индуктивного сопротивления крыла самолета // ТРУДЫ МФТИ. Том 9, № 4, 2017
3. Сидоров К. К., Основополагающая статья, Высокоцитируемый журнал, том. 234, 212-219, 1999 г.

Физика ферроиков

Закономерности изменения фрактальной размерности магнитооптических изображений магнитов после воздействия импульсным полем

Зигерт А.Д.¹, Семенова Е.М.¹, Кузьмин Н.Б.¹, Сдобняков Н. Ю.¹

¹ТвГУ

e-mail: *nsdobnyakov@mail.ru*

В настоящее время фрактальный анализ широко используется для описания как поверхности на наноуровне [1], так и корреляции фрактальной размерности и магнитных характеристик магнетиков [2-4] при различных условиях эксперимента.

В развитие работы [4] в [5] были представлены результаты фрактального анализа изображений поверхности постоянного магнита КС37, полученных методом полярного эффекта Керра с помощью индикаторной висмутсодержащей феррит-гранатовой пленки после перемагничивания импульсным полем 0,1 - 1,5 Тл. Полученные зависимости остаточной намагниченности от величины внешнего импульсного поля были сопоставлены с фрактальной размерностью магнитооптических изображений поверхности магнита после воздействия импульсного поля. Установлена корреляция между видом полевых зависимостей фрактальной размерности профиля магнитооптических изображений поверхности магнита и первой производной намагниченности по полю $dM_r(H)/dH$. Таким образом, можно говорить о наличии взаимосвязи между характером изменения намагниченности в импульсном поле и видом магнитооптического изображения, анализируемого с использованием аппарата фрактальной геометрии.

В данной работе планируется применить методики [4, 5] для фрактального анализа магнитооптических изображений постоянных магнитов с разным химическим составом, в том числе SmFeN и NdFeB(N-35). Кроме того планируется также использовать другую методику воздействия импульсным полем, которую можно описать следующей новой схемой: перед каждым воздействием на магнит импульсом производится воздействие на него импульсом максимального значения, но противоположной полярности для его насыщения. Длительность импульса составляет 40 мкс, величина поля варьируется от 0,1 до 2 Тл, т.е. максимальное значение величины импульсного поля выше, чем в [5]. Визуализация полей рассеяния магнита осуществлялась через несколько секунд после импульса с помощью индикаторной феррит-гранатовой плёнки методом полярного эффекта Керра. Полученные с использованием новой методики результаты планируется сравнить с результатами, полученными с помощью методики [5].

В результате анализа экспериментальных данных ожидается, что такая методика позволит отчасти подтвердить, концепцию, озвученную в [5], но и выявить особенности в закономерности поведения зависимости остаточной намагниченности от величины внешнего импульсного поля и величины фрактальной размерности магнитооптических изображений у постоянным магнитов с разным химическим составом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Список литературы

1. Сдобняков Н.Ю., Антонов А.С., Иванов Д.В. Морфологические характеристики и фрактальный анализ металлических пленок на диэлектрических поверхностях: монография. Тверь: Тверской государственный университет, 2019. 168 с.
2. Иванова А.И., Семенова Е.М., Дунаева Г.Г., Овчаренко С.В., Третьяков С.А., Зигерт А.Д., Влияние дефектов на магнитные характеристики феррит-гранатовых пленок, Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, вып. 12, 103-112, 2020.
3. Зигерт А.Д., Дунаева Г.Г., Сдобняков Н.Ю., Фрактальный анализ лабиринтной доменной структуры феррит-гранатовых пленок в процессе перемагничивания, Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, вып. 13, 134-145, 2021.
4. Зигерт А.Д., Семенова Е.М., Кузьмин Н.Б., Сдобняков Н.Ю., Фрактальный анализ магнитооптических изображений поверхности магнита после воздействия импульсным полем, Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, вып. 14, 101-107, 2022.
5. Zigert A.D., Dunaeva G.G., Semenova E.M., Ivanova A.I., Karpenkov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Fractal dimension behaviour of maze domain pattern in ferrite-garnet films during magnetisation reversal, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, volume 35, issue 8, 2187-2193, 2022.

Магнитные свойства композитов на основе твердых растворов манганита лантана-стронция и магнониобата свинца-титаната свинца

Анохин А. С.^{1,2}, Еськов А.В.², Мишнев М.А.², Семенов А.А.²,

¹ИТМО

²СПБГЭТУ «ЛЭТИ»

e-mail: asanokhin@itmo.ru

Мультиферроики, как материалы, сочетающие в себе несколько видов микроскопического упорядочения, таких как ферромагнитное и сегнетоэлектрическое, представляют собой перспективный класс функциональных материалов для электроники и сенсорики [1]. К сожалению, известные на данный момент однофазные (естественные) мультиферроики не обладают характеристиками, позволяющими разработать конкурентоспособные устройства на их основе [2]. В наиболее изученных однофазных мультиферроиках, таких как феррит висмута и соединений на его основе, температуры фазовых переходов электрически- и магнитоупорядоченного состояния достаточно далеко отстоят друг от друга, что приводит к слабо выраженному взаимодействию электрической и магнитной подсистем, то есть к малому коэффициенту магнитоэлектрической связи [3]. Кроме того, во многих естественных мультиферроиках сама природа магнитоэлектрической связи приводит к слабовыраженным магнитоэлектрическому и магнитодиэлектрическому эффектам [4]. В связи с этим, перспективной представляется разработка искусственных мультиферроидных сред, основанных на чередующихся слоях или взаимовложенных матрицах магнитных и сегнетоэлектрических материалов, т.е. мультиферроиков на основе объемных или слоистых композитов [5].

В данной работе рассматривается мультиферроидный композит на основе твердых растворов сегнетоэлектрического и ферромагнитного материала. В качестве магнитного материала используется манганит лантана-стронция (LSMO), известный высокой величиной магнитной восприимчивости, намагниченности и магнитокалорического эффекта [6]. Сегнетоэлектрический компонент представлен магнониобатом свинца-титанатом свинца (PMN-PT), демонстрирующим высокие величины поляризации, диэлектрической проницаемости, электрокалорического эффекта, а также высокими пьезокоэффициентами [7]. Оба материала образуют широкий спектр твердых растворов, позволяющий получать фазовые переходы в диапазоне температур от 200 до 400 К. Экспериментальные образцы и исходные компоненты композита были изготовлены методом высокотемпературного твердофазного синтеза. В работе были рассмотрены магнитные свойства композитов LSMO/PMN-PT при соотношении La:Sr 76:24 и PMN:PT 90:10, изготовленных при различных температурах спекания. Было показано, что при температурах спекания композита ниже 1000 °С при содержании и магнитной фазы, равном 10 мол.%, наблюдается совместное существование сегнетоэлектрической и ферромагнитной фаз, при этом температуры обоих фазовых переходов находятся в диапазоне 20-50 °С.

Список литературы

1. Vopson M. M. Fundamentals of multiferroic materials and their possible applications //Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. – 2015. – Т. 40. – №. 4. – С. 223-250.
2. Prellier W., Singh M. P., Murugavel P. The single-phase multiferroic oxides: from bulk to thin film //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2005. – Т. 17. – №. 30. – С. R803.

3. Kumar M. et al. Progress in multiferroic and magnetoelectric materials: applications, opportunities and challenges //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2020. – T. 31. – C. 19487-19510.
4. Martin L. W., Ramesh R. Multiferroic and magnetoelectric heterostructures //Acta Materialia. – 2012. – T. 60. – №. 6-7. – C. 2449-2470.
5. Nan C. W. et al. Multiferroic magnetoelectric composites: Historical perspective, status, and future directions //Journal of applied physics. – 2008. – T. 103. – №. 3. – C. 1.
6. Shinde K. P. et al. Magnetocaloric effect in LSMO synthesized by combustion route //Materials Chemistry and Physics. – 2011. – T. 129. – №. 1-2. – C. 180-182.
7. Cheng K. C. et al. Piezoelectric coefficients of PMN-0.33 PT single crystals //ISAF 2000. Proceedings of the 2000 12th IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectrics (IEEE Cat. No. 00CH37076). – Ieee, 2000. – T. 2. – C. 533-536.

Магнитные свойства нанокристаллических материалов на основе ортоферрита висмута, допированного иттрием

Кравцова П.Д.¹, Томкович М.В.¹, Волков М.П.¹, Ломанова Н.А.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *valdner347@gmail.com*

Перовскитоподобные мультиферроики на основе ортоферрита висмута являются перспективными материалами для современной техники, т.к. сочетают сегнетоэлектрические, ферромагнитные и каталитические свойства при комнатной температуре [1, 2]. На возможность управления их функциональным откликом путем допирования иттрием указывается в [3, 4].

В работе представлено исследование магнитных характеристик нанокристаллических материалов с номинальным составом $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ ($x=0.1, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.9$). Образцы синтезированы методом глицин-нитратного горения и имеют средние размеры нанокристаллов 25-80 нм. Подробно технология синтеза описана в [5]. Характеризация материалов выполнена методами рентгеновской дифрактометрии, сканирующей электронной микроскопии и элементного анализа, мёссбауэровской спектроскопии и магнитометрии.

Влияние состава исходной композиции на фазовый состав и структуру целевого продукта, а также на его магнитные свойства обсуждается в докладе. Определено, что полученные материалы обладают магнитным порядком в интервале температур 5-400 К и их суммарная намагниченность превышает значения для чистых ортоферритов висмута и иттрия в несколько раз. Данный результат связывается с совокупностью нескольких факторов – со структурным искажением перовскитовой ячейки в результате допирования, с размерным фактором, а также с влиянием фазового состава материала.

Авторы благодарят В.Г. Семёнова (СПбГУ) и И.В. Бурьяненко (СПбПУ) за мёссбауэровский эксперимент и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Акбашев А.Р., Кауль А.Р. Структурные и химические аспекты создания материалов со свойствами мультиферроиков // Успехи химии. 2011. Т.80. №12. С. 1211-1230.
2. Wu J, Fan Zh, Xiao D, Zhu J, Wang J. Multiferroic bismuth ferrite-based materials for multifunctional applications: ceramic bulks, thin films and nanostructures // Progr. Mat. Sci. 2016. Т. 84. P. 335-402.
3. Mittova I.Y., Perov N.S., Tomina E.V., Pan'kov V.V., Sladkopevtsev B.V. Multiferroic Nanocrystals and Diluted Magnetic Semiconductors as a Base for Designing Magnetic Materials // Inorg Mater. 2021. **57**. 1340–1366.
4. Anastasiya N. Sokolova et al. Photocatalytic properties of composites based on $\text{Y}_{1-x}\text{Bi}_x\text{FeO}_3$ ($0 \leq x \leq 0.15$) nanocrystalline solid solutions with a hexagonal structure // Nanosystems: Phys. Chem. Math. 2022. 13 (1). 87–95.
5. Ломанова Н.А., Томкович М.В., Данилович Д.П., Осипов А.В., др. Магнитные характеристики нанокристаллических материалов на основе BiFeO_3 , синтезированных методом растворного горения // Неорганические материалы. 2020. 56. 12. С. 1342-1349.

Особенности фазовых переходов твердых растворов $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ с высоким содержанием стронция

Константинов А. С.¹, Михейкин А.С.
¹ЮФУ

e-mail: septinex@gmail.com

К перспективным материалам для перестраиваемых устройств микроволнового диапазона относятся сегнетоэлектрики, полимеры, жидкие кристаллы. Среди них особый интерес представляют сегнетоэлектрики, благодаря своим диэлектрическим свойствам [1]. Твердые растворы типа "виртуальный сегнетоэлектрик - высокотемпературный сегнетоэлектрик" позволяют варьировать критическую температуру сегнетоэлектрического фазового перехода, что позволяет тонко настраивать рабочий температурный диапазон устройства. Важным свойством подобных материалов является существование мягкой моды, которая несёт в себе информацию о структурном фазовом переходе [2]. Таким образом, интерес к исследованию динамики кристаллической решетки сегнетоэлектрических материалов обусловлен изменением свойств материалов в результате фазовых переходов и соответствующим им структурным преобразованиям.

В данной работе проведено исследование спектров комбинационного рассеяния света (КРС) для керамик твердых растворов титанат бария-стронция $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ (BST) с $x = 1, 0.5$ и 0.3 . Спектры измерялись в широком диапазоне температур от 77 до 460 К.

В спектрах КРС параэлектрической фазы твердого раствора BST с содержанием $x(Sr) = 0.7$ наблюдается значительное уменьшение ширины линий некоторых мод. Это может быть связано с увеличением времени жизни колебательного состояния, характерного для смещенного иона титана. Такое смещение соответствует ромбоэдрическому искажению кубической ячейки перовскита. В титаната бария считается, что механизм Слэтера ответственен за сегнетоэлектрический переход в тетрагональную фазу, но с ростом концентрации Sr мы видим, что этот механизм постепенно подавляется в пользу ромбоэдрического искажения. Такая конкуренция механизмов связана с уменьшением ионного радиуса катионов, занимающих А позицию в структуре перовскита.

Из аппроксимации экспериментальных спектров были получены температурные зависимости для мягкой E(ТO) моды. Для $x(Ba) = 0.3$ поведение мягкой моды в большей степени напоминает классическое поведение мягкой моды в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа смещения. Такое поведение объясняется ослаблением взаимодействия между центральным пиком и мягкой модой в силу его быстрого затухания. Для количественной оценки изменения потенциального рельефа с увеличением концентрации Sr была найдена зависимость энергии активации от концентрации ионов стронция по формуле: $\tau = \tau_0 e^{-\frac{E_a}{k_B T}}$. Полученные в ходе расчетов значения энергии активации показывают, что для BST с $0.5 \leq x(Ba) \leq 1$ энергия активации почти не меняется и составляет около 10 меВ, тогда как для $x(Ba) = 0.3$ энергия активации перехода иона титана из одного минимума в другой возрастает более чем в три раза до 31 мэВ.

Список литературы

1. Ahmed A., Goldthorpe I. A., Khandani A. K. Electrically tunable materials for microwave applications //Applied Physics Reviews. – 2015. – T. 2. – №. 1. – C. 011302.
2. Fleury P. A. The effects of soft modes on the structure and properties of materials //Annual Review of Materials Science. – 1976. – T. 6. – №. 1. – C. 157-180.

Generation and routing of nanoscale droplet solitons without compensation of magnetic damping

Nikitchenko A. ¹, Pertsev N. ¹

¹Ioffe Institute

e-mail: *nikitchenko@mail.ioffe.ru*

A magnetic droplet soliton is a localized dynamic spin state which can serve as a nanoscale information carrier and nonlinear oscillator. The present opinion is that the formation of droplet solitons requires the compensation of magnetic damping by a torque created by a spin-polarized electric current or pure spin current. Here, we demonstrate theoretically that nanoscale droplet solitons can be generated and routed in ferromagnetic nanostructures with voltage-controlled magnetic anisotropy in the presence of uncompensated magnetic damping. Performing micromagnetic simulations for the MgO/Fe/MgO trilayer with almost perpendicular-to-plane magnetization, we reveal the formation of the droplet soliton under a nanoscale gate electrode subjected to a subnanosecond voltage pulse. The soliton lives up to 50 ns at room temperature and can propagate over micrometer distances in a ferromagnetic waveguide due to nonzero gradient of the demagnetizing field. Furthermore, we show that electrical routing of the soliton to different outputs of a spintronic device can be realized with the aid of an additional semiconducting nanostripe electrode creating controllable gradient of the perpendicular magnetic anisotropy.

Our theoretical results provide guidelines for the development of an energy-efficient information-processing device based on the electrical generation, propagation, and routing of magnetic solitons. The device converts the input voltage signal into the magnetic information carrier, which propagates to one of several outputs. The desired output is selected by the voltage applied to the routing electrode and involves the magnetic tunnel junction, which provides electrical reading of the output signal via the measurement of the junction's resistance.

References

1. Andrei I. Nikitchenko and Nikolay A. Pertsev in *Phys. Rev. Materials* **6** (5 October 2022), L101401

Экваториальный эффект Керра в плазмонной наноструктуре на основе пленки никеля

Кулабухов А. А.^{1,2}, Геревенков П. И.², Филатов Я. А.², Хохлов Н. Е.², Калашникова А. М.², Беляев В. К.³, Родионова В. В.³

¹ИТМО

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе

³БФУ имени И. Канта

e-mail: usablink182@yandex.ru

В настоящее время ведутся активные исследования в области сверхбыстрой магнитной динамики, возбуждаемой фемтосекундными лазерными импульсами [1] с целью создания новых подходов к обработке информации. Так, оптический импульс позволяет как возбуждать когерентную магнитную динамику, так и локально управлять её параметрами [2]. Теоретически предсказано [3], что при воздействии линейно-поляризованного света в металлических ферромагнитных плёнках должно создаваться эффективное магнитное поле, вызванное обратным экваториальным магнитооптическим эффектом Керра. Для экспериментального наблюдения этого эффекта, однако, необходимы среды или структуры, в которых экваториальный магнитооптический эффект Керра (эМОЭК) имеет большую величину. Известно, что усиление эМОЭК возможно в области поверхностного плазмон-поляритонного резонанса [4]. Ожидается, что возбуждение поверхностного плазмон-поляритона позволит увеличить и значение эффективного магнитного поля на порядок.

Целью нашей работы является экспериментальная демонстрация возможности применения подходов плазмоники для наблюдения обратного эМОЭК. В работе определено влияние поверхностного плазмон-поляритонного резонанса на магнитооптический отклик наноструктур на основе пленок никеля. Магнитоплазмонная структура получена напылением пленок никеля толщиной 5 нм на поверхности структур, используемых в DVD- и BlueRay-дисках, покрытых слоем золота толщиной 100 нм. Периоды исследованных структур составляли 700 и 300 нм для DVD и BlueRay, соответственно [5].

Для обнаружения длин волн, характерных для возбуждения поверхностного плазмон-поляритонного резонанса, измерены спектры отражения для s- и p-поляризованного света при угле падения 23° в спектральном диапазоне 450-1000 нм. Был проанализирован магнитооптический контраст, т.е. относительная разность в интенсивности отраженного света для двух ориентаций внешнего магнитного поля $H = \pm 150$ мТл, приложенного в геометрии для наблюдения эМОЭК. Значение магнитооптического контраста, наблюдаемое в области плазмонного резонанса для DVD-диска на длине волны 650-680 нм, составило до 1%. Следует отметить, что магнитооптический контраст в сплошной планарной плёнке Ni составляет $\approx 0.1\%$ [6]. Для определения влияния плазмонного резонанса на магнитооптический отклик также были измерены петли магнитного гистерезиса в геометрии экваториального эффекта Керра. Выполнен сравнительный анализ петель гистерезиса, измеренных при использовании линейно-поляризованных фемтосекундных лазерных импульсов в диапазоне длин волн 680-1000 нм.

Таким образом, продемонстрирована возможность усиления магнитооптического отклика исследованных структур в спектральной области их плазмон-поляритонных резонансов. Полученные результаты позволили определить оптимальные условия экспериментального

наблюдения сверхбыстрого обратного экваториального эффекта Керра и возбуждения за счёт него магнитной динамики.

Работа частично поддержана грантом РФФ 22-22-00326.

Список литературы

1. А. М. Калашникова и др., Усп. физ. наук, 185, 1064-1076 (2015)
2. А. М. Калашникова и др., Жур. тех. физ., 12, 1848 (2021)
3. V. I. Belotelov and A. K. Zvezdin. Phys. Rev. B 86, 155133 (2012)
4. S. A. Dyakov et al. Phys. Rev. B 100, 214411(2019)
5. V. K. Belyaev et al. Jap. J. Appl. Phys. 59 S66A08 (2020)
6. M. A. Kiryanov et al. APL Phot. 7, 026104 (2022)

Структура и микроструктура квантовых параэлектриков на основе титаната стронция с малыми добавками ионов свинца в температурном диапазоне 15-250 К

Михейкин А. С.¹, Широков В.Б.^{1,2}

¹ЮФУ

²Южный научный центр РАН

e-mail: amikheykin@sfnedu.ru

Свойства и фазовые превращения системы твердых растворов $Sr_{1-x}Pb_xTiO_3$ (SPT) со структурой перовскита привлекательны из-за существенного различия свойств конечных членов этой системы. Титанат свинца перовскита является сегнетоэлектриком при температуре ниже 760 К с превосходными пьезоэлектрическими свойствами [1], что позволяет широко использовать его в технике в качестве материалов для пьезоэлектрических сенсоров, преобразователей и актуаторов как в чистом виде, так и в системах твердых растворов, таких как $PbZr_xTi_{1-x}O_3$ [2]. Титанат стронция представляет собой квантовый параэлектрик, демонстрирующий признаки приближающегося сегнетоэлектрического фазового перехода, который не происходит до криогенных температур [3]. Высокое значение диэлектрической проницаемости, ее зависимость от температуры и внешнего электрического поля делает этот материал перспективной основой для перестраиваемых устройств микро- и нанoeлектроники [4]. Фазовая диаграмма системы SPT «концентрация – температура» мало изучена вблизи крайнего члена – титаната стронция и низких температур, как и другие фазовые диаграммы «сегнетоэлектрик-квантовый параэлектрик», например, $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$, $Pb_xCa_{1-x}TiO_3$ и другие. Скорее всего, это связано с интересом к сегнетоэлектрическим состояниям твердых растворов, лежащим в противоположной области концентрационной фазовой диаграммы. Однако больший интерес для перестраиваемых устройств микро- и нанoeлектроники могут представлять сегнетоэлектрики выше температуры Кюри или потенциальные сегнетоэлектрики, в которых сегнетоэлектрический фазовый переход не происходит в области реальных температур [5]. Поэтому критически важно понять, какие состояния могут реализовываться в системах твердых растворов «сегнетоэлектрик — квантовый параэлектрик», границы их возникновения и устойчивости.

Для этого впервые разработана феноменологическая модель твердых растворов системы «квантовый параэлектрик – сегнетоэлектрик» на основе титаната стронция-свинца. Термодинамический потенциал твердого раствора SPT определен для всего диапазона концентраций компонентов. Построена фазовая диаграмма, содержащая: критическую точку, в которой линия фазовых переходов второго рода переходит в линию переходов первого рода между кубической и тетрагональной фазами; трикритическая точка, в которой сходятся кубическая, тетрагональная и ромбоэдрическая фазы; мультикритическая точка, в которой при низких температурах сходятся шесть фаз по линиям переходов второго рода. Полученная T - x фазовая диаграмма системы твердых растворов SPT показывает возможность существования сегнетоэлектрических фаз, которые ранее не наблюдались в экспериментах.

Для проверки теоретической фазовой диаграммы были синтезированы твердые растворы титаната стронция-свинца с малыми концентрациями свинца в структуре (0,5; 1; 2; 3; 4%) по стандартной твердофазной методике. Полученные образцы были исследованы с помощью дифракции синхротронного излучения в температурном диапазоне 15 – 250 К. Данные

дифракции не выявили отчетливо наблюдаемого изменения дифракционной картины при понижении температуры и увеличении концентрации ионов свинца. Однако, форма дифракционных максимумов претерпевала изменения. Анализ температурной и концентрационной зависимости дифракционных картин полнопрофильным методом Ритвельда с учетом микроструктурных характеристик, влияющих на уширение дифракционных максимумов, показал, что с понижением температуры и ростом концентрации ионов свинца изменяется распределение микронапряжений по кристаллографическим направлениям кубической кристаллической структуры, благодаря чему можно идентифицировать сингонии низкосимметричных фаз при малых искажениях исходной высокосимметричной кубической структуры. Используя предложенный подход, были найдены свидетельства структурного перехода в одну из ромбоэдрических фаз для твердых растворов $\text{Sr}_{1-x}\text{Pb}_x\text{TiO}_3$ с $x = 0,03; 0,04$ ниже 50 К, подтверждающие результаты феноменологической теории.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-12-00314.

Список литературы

1. Noheda B., Cereceda N., Iglesias T., Lifante G., Gonzalo J.A., Chen H.T., Wang Y.L., Composition dependence of the ferroelectric-paraelectric transition in the mixed system $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$, *Phys. Rev. B*, V. 51, 16388–16391, 1995
2. Presas A., Luo Y., Wang Z., Valentin D., Egusquiza M., A Review of PZT Patches Applications in Submerged Systems, *Sensors*, V. 18, 2251, 2018
3. Müller K.A., Burkard H., SrTiO_3 : An intrinsic quantum paraelectric below 4 K, *Phys. Rev. B*, V. 19, 3593–3602, 1979
4. Huang X.-X., Zhang T.-F., Tang X.-G., Jiang Y.-P., Liu Q.-X., Feng Z.-Y., Zhou Q.-F., Dielectric relaxation and pinning phenomenon of $(\text{Sr,Pb})\text{TiO}_3$ ceramics for dielectric tunable device application, *Sci. Rep.*, V. 6, 31960, 2016
5. Tagantsev A.K., Sherman V.O., Astafiev K.F., Venkatesh J., Setter N., Ferroelectric Materials for Microwave Tunable Applications, *J. Electroceramics*, V. 11, 5–66, 2003

Атомная физика и физика элементарных частиц

Измерение спектра электронных антинейтрино ^{144}Ce - ^{144}Pr при помощи полупроводниковых спектрометров

Ниязова Н. В.¹, Дербин А. В.¹, Драчнев И. С.¹, Ломская И. С.¹, Котина И. М.¹, Муратова В. Н.¹, Трушин М. В.¹, Унжаков Е. В.¹

¹Петербургский Институт Ядерной физики, Гатчина, Национальный исследовательский центр “Курчатовский Институт”, Россия

e-mail: niyazova_nv@pnpi.nrcki.ru

В настоящее время одной из актуальных задач нейтринной физики является поиск четвертого, так называемого «стерильного» состояния нейтрино, практически не подверженного слабому взаимодействию. Такая особенность стерильного нейтрино делает достаточно затруднительным его экспериментальное обнаружение. Тем не менее, существует возможность осцилляций известных трех типов активных нейтрино в стерильное состояние. Так, например, наблюдаемые реакторная и галлиевая аномалии могут быть объяснены осцилляциями электронных нейтрино в стерильное состояние с массой порядка ~ 1 эВ.

Одним из экспериментов, направленных на поиск таких осцилляций, планировался эксперимент *Borexino_SOX* на сцинтилляционном детекторе *Borexino* в лаборатории Гран-Сассо, Италия [1]. В рамках данного эксперимента предполагалось измерение потока антинейтрино от источника ^{144}Ce - ^{144}Pr в реакции обратного бета-распада (ОБР). Данный источник является наиболее подходящим, так как граничная энергия бета-распада ^{144}Ce - ^{144}Pr составляет 3 МэВ. К сожалению, было принято решение о приостановке эксперимента *Borexino_SOX*, однако источник ^{144}Ce - ^{144}Pr остается одним из самых перспективных источников для поиска легких стерильных нейтрино.

Для моделирования осцилляций антинейтрино источника ^{144}Ce - ^{144}Pr необходимо с высокой точностью измерить форму бета-спектра ^{144}Pr и, как результат, восстановить спектр антинейтрино. Для этой цели в лаборатории низкофоновых измерений ОПЯД ПИЯФ были созданы два типа бета-спектрометров, основанные на полупроводниковых детекторах. Первый спектрометр типа «мишень-детектор» представлял собой Si(Li)-детектор полного поглощения, толщиной 10 мм и диаметром чувствительной области 20 мм, над поверхностью которого располагался источник ^{144}Ce , толщиной 1 мкм, нанесенный на лавсановую подложку. Дополнительно в систему подключался сцинтилляционный детектор ВГО для отслеживания гамма- и рентгеновской активности. Вся система помещалась в вакуумный криостат и охлаждалась до температуры жидкого азота. Детектор был оснащен зарядочувствительным преусилителем, сигнал с которого поступал в цифровой преобразователь [2].

Спектрометр второго типа, имеющий 4π геометрию, представлял собой два Si(Li) детектора толщиной 10 мм и диаметрами чувствительной области 20 и 18 мм, приведенный в плотный контакт друг с другом [3-4]. В одном из детекторов была вышлифована лунка, в которую, путем высушивания из раствора, был нанесен источник ^{144}Ce . Такая геометрия детектора, в отличие от схемы «мишень-детектор», позволяла регистрировать полную энергию электрона, исключая неполный сигнал от обратно-рассеянных электронов от поверхности кристалла. Аналогично первому типу, спектрометр помещался в вакуумный криостат и охлаждался до температуры жидкого азота. Измерительный тракт был аналогичен тракту спектрометра первого типа.

Для каждого измеренного бета-спектра, при помощи метода Монте-Карло, было получено выражение для функции ядерного форм-фактора: $C_{\text{мд}}(W) = 1 + (-0.0226 \pm 0.054)W + (-0.1657 \pm 0.0918)W^{-1}$ и $C_{4\pi}(W) = 1 + (-0.02877 \pm 0.000288)W + (-0.117229 \pm 0.002972)W^{-1}$ для спектрометров первого и второго типа соответственно. Полученные параметры согласуются друг с другом в пределах ошибок, а также со значениями, полученными ранее в работах [5-6].

Спектр антинейтрино был получен из измеренного спектра электронов бета-распада ^{144}Ce - ^{144}Pr . Доля спектра выше порога регистрации нейтрино в реакции ОБР 1.8 МэВ составила 0.2891 ± 0.0002 , оценка сечения взаимодействия нейтрино $(0.3484 \pm 0.0002) \cdot 10^{-43} \text{см}^2 \text{распад}^{-1}$. Полученное значение пропорционально ожидаемой скорости счета нейтрино в эксперименте по поиску стерильного состояния. Точность полученного значения составила 0.06%, что почти на порядок лучше, чем достигнутая точность калориметров, произведенных для эксперимента Borexino_SOX.

Таким образом, в настоящей работе бета-спектр источника ^{144}Ce - ^{144}Pr измерен с наилучшей точностью, полученные результаты могут быть использованы в будущих экспериментах по поиску осцилляций нейтрино в стерильное состояние.

Список литературы

1. Bellini G. et al. SOX: Short distance neutrino Oscillations with BoreXino //Journal of High Energy Physics. – 2013. – Т. 2013. – №. 8. – С. 1-14.
2. Alexeev I. E. et al. Beta-spectrometer with Si-detectors for the study of ^{144}Ce – ^{144}Pr decays //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2018. – Т. 890. – С. 64-67.
3. Alekseev I. E. et al. A Silicon 4π Spectrometer of β -Decay Electrons with Energies of up to 3 MeV //Instruments and Experimental Techniques. – 2021. – Т. 64. – С. 190-194.
4. Alekseev I. E. et al. ^{144}Ce - ^{144}Pr spectrum measurement with 4π semiconductor β -spectrometer //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 2103. – №. 1. – С. 012141.
5. Nagarajan T., Ravindranath M., Venkata Reddy K. The $O \rightarrow O^+$ decay of ^{144}Pr and the pseudoscalar interaction //Nuovo Cimento A Serie. – 1971. – Т. 3. – №. 3. – С. 699-708.
6. Daniel H., Kaschl G. T. Spektralformen von $(0 \rightarrow 0)$ - β -Übergängen mit paritätswechsel: ^{144}Ce , ^{144}Pr und ^{166}Ho //Nuclear Physics. – 1966. – Т. 76. – №. 1. – С. 97-117.

The new wave-packet reprojection method for inelastic atomic collisions within the Born-Oppenheimer approach

Яковлев М. Ю.¹, Беляев А.К.¹, Яковлева С.А.¹,
¹РГПУ

e-mail: *yakovlev.max2000@yandex.ru*

Получение характеристик неупругих процессов при столкновениях атомов, ионов, молекул является важным для определения свойств газовых и плазменных сред. Это востребованные данные, применяемые в различных областях современной науки. Особую роль они играют в астрофизике, поскольку позволяют проводить физически корректное моделирование атмосферы звёзд.

Самым распространённым методом для исследования неупругих столкновений является подход Борна-Оппенгеймера. В рамках данного подхода выделяется две задачи: 1) расчёт электронной структуры при неподвижных ядрах; 2) исследование ядерной динамики. Первоначально подход Борна-Оппенгеймера применялся вместе с рядом приближений и приводил к разумным физическим значениям рассчитываемых данных. Ожидалось, что с развитием компьютерной техники и программных продуктов стандартный подход Борна-Оппенгеймера позволит получить более точные результаты. Однако, выяснилось, что некоторые неадиабатические взаимодействия остаются ненулевыми в асимптотической области [1, 2], и попытки рассчитать вероятности неупругих процессов и сечений приводят к парадоксальной ситуации, когда сечения неограниченно возрастают, и результаты теряют физический смысл [3].

В данном докладе предлагается один из возможных методов исследования ядерной динамики неупругих атомных столкновений в рамках подхода Борна-Оппенгеймера – метод волновых пакетов [4]. Метод волновых пакетов – это квантовый метод, заключающийся в решении нестационарного уравнения Шрёдингера, в котором волновая функция выбирается в виде волнового пакета и в дальнейшем преобразуется действием унитарного оператора эволюции. Данный подход позволяет не только получить корректные данные, но и провести моделирование исследуемого квантового процесса, включая возможность визуализации. Это делает его применимым не только в рамках конкретных научных задач, но и для создания демонстрационных примеров.

Одной из фундаментальных проблем, возникающих при исследовании ядерной динамики, является наличие неадиабатических взаимодействий при любых, сколь угодно больших межъядерных расстояниях [1-3] и, как следствие, неограниченный рост сечений неупругих процессов при учёте бесконечно большого числа парциальных волн. Решение указанной проблемы в рамках стационарного подхода было предложено в виде метода перепроецирования [1-3], заключающегося в использовании различных координат для описания волновых функций в асимптотической области и в области взаимодействий, а также в проецировании асимптотических волновых функций, описывающих каналы рассеяния, на волновые функции молекулярных состояний в области взаимодействий. В данном докладе предлагается обобщение квантового метода перепроецирования на случай решения нестационарного уравнения Шрёдингера методом волновых пакетов.

Список литературы

1. Grosser, J. Approach to electron translation in low-energy atomic collisions / J. Grosser, T. Menzel, A. K. Belyaev // Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics. – 1999. – Vol. 59, No. 2-3. – P. 1309-1316. – DOI 10.1103/PhysRevA.59.1309. – EDN LFIOVP.
2. Belyaev A. K. et al. Electron translation and asymptotic couplings in low-energy atomic collisions //Physical Review A. – 2001. – T. 64. – №. 5. – C. 052701.
3. Belyaev A. K. Revised Born-Oppenheimer approach and a reprojection method for inelastic collisions //Physical Review A. – 2010. – T. 82. – №. 6. – C. 060701.
4. Balakrishnan N., Kalyanaraman C., Sathyamurthy N. Time-dependent quantum mechanical approach to reactive scattering and related processes //Physics reports. – 1997. – T. 280. – №. 2. – C. 79-144.

Разработка модели гиперспектрального счётчика гамма-квантов

Флусова Д. С.¹, Гоголев А.С.¹, Бикметов Н.Р.

¹Томский политехнический университет.

e-mail: *dsf7@tpu.ru*

В настоящей работе осуществляется разработка рабочего прототипа спектрального восьмиканального счётчика со скоростью считывания до 1 МГц/канал и двумя порогами на каждом канале. Технология спектральной регистрации данных получает всё более широкое применение в различных областях: промышленная интроскопия, макроскопические исследования свойств материалов и многое другое. Счётчик состоит из сцинтилляционного кристалла YAP:Ce, кремниевого ФЭУ и считывающей электроники. Возможности современных АЦП позволяют работать счётчику в счётном режиме для отдельных фотонов. Разработка такого счётчика является актуальной задачей для нужд ЦКП СКИФ, комплексов астрофизических экспериментов (например, TAIGA, H.E.S.S., MAGIC и т.д.). Конечная цель использования таких счётчиков является создание новых установок и телескопов с более высоким спектральным разрешением. Кроме того, подобные системы могут найти применение в ядерной медицине.

Разработка спектрального рентгеновского счётчика включает в себя проектирование схемы прототипа 8-канального счётчика, создание цифрового двойника, проверку на экспериментальном стенде. В настоящее время разработана цифровая модель, симулирующая влияние температуры на отклик кремневых ФЭУ и считывающей электроники. Изначально заявлены требования к температурному диапазону рабочего режима счётчика от -50 до +70 °С. В качестве калибровочного образца использовался кристалл LaBr₃, так как этот кристалл обладает большим световыходом.

Важным шагом в моделировании детектирующей системы является симуляция эффектов, оказывающих влияние на форму сигнала и, как следствие итоговую форму и разрешение спектра, шумы электроники, выбор ФЭУ и кристалла (YAP:Ce, LaBr₃), влияние температуры на формирование сигнала в электронике.

В результате было осуществлено моделирование регистрирующей системы спектрального рентгеновского восьмиканального счётчика. Преимущество разработанной симуляции заключается в гибкости разработки счётных систем: возможна замена сцинтилляционного кристалла, ФЭУ. Результаты моделирования были соотнесены с данными с экспериментального стенда. В дальнейшем будет разработан прототип на основе кристалла YAP:Ce, кремниевого ФЭУ и считывающей электроники.

Список литературы

1. Gress O. и др. Tunka-HiSCORE – A new array for multi-TeV γ - ray astronomy and cosmic-ray physics, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. Т. 732. С. 290–294. 2013.
2. Budnev N. M. и др. TAIGA - a hybrid detector complex for high energy gamma-ray astro-physics and cosmic ray physics in the Tunka valley, Proceedings of 35th International Cosmic Ray Conference — PoS(ICRC2017). Bexco, Busan, Korea: Sissa Medialab, С. 768. 2017.

Другие вопросы физики

Методы исследования кинетики самосборки мягкой материи во внешних управляющих полях с помощью алгоритмов машинного обучения

Симкин И. В.¹, Яковлев Е.В., Драгун М.А., Крючков Н.П., Либет П.А., Широкова А.А., Юрченко С.О.

¹МГТУ им. Н. Э. Баумана

e-mail: vanyasimkin@gmail.com

Важной задачей обработки экспериментальных видеоданных является получение физических параметров систем. Современные методы обработки позволяют изучать морфологические изменения в клетках в живой мягкой материи [1], параметры пузырей в микрофлюидных чипах [2, 3], в биореакторах [4], а также структурные параметры и фазовые превращения в коллоидных системах микрочастиц во внешних управляющих полях [5, 6], которые широко применяются в качестве модельных систем для изучения фундаментальных явлений [7, 8].

Для решения большого класса задач, связанных с цифровыми видеоданными, широко применяются подходы классического компьютерного зрения [9, 10], а также машинного обучения [11, 12]. В настоящей работе рассматриваются методы для детекции объектов при использовании видеомикроскопии, а именно, определение их положений, траекторий движения, скоростей, размеров каждого индивидуального объекта, их формы и эволюция этих параметров с течением времени. Эти методы основаны на пороговых значениях интенсивности пикселей, а также на обученных нейронных сетях. Преимуществом первого метода является отсутствие трудозатрат на подготовку обучающей выборки и высокая воспроизводимость результатов, в отличие от обученной нейронной сети, которая в зависимости от выборки может демонстрировать разные результаты. Преимущество второго метода заключается в универсальности обученной модели и возможности сегментировать объекты сложной формы, что трудно выполнимо в методе сегментации по пороговым интенсивностям пикселей. Значения порога интенсивности могут отличаться на различных областях объекта, что наблюдается в живой мягкой материи, состоящих из структур с отличающейся степенью поглощения света. С полученными данными о местоположении исследуемых объектов необходимо провести дальнейшую обработку.

В работе показано применение методов для исследования кинетики самосборки и критических явлений в мягкой материи при помещении их во внешние управляющие поля. В результате, была построена фазовая диаграмма в системе коллоидных частиц во внешних вращающихся конических магнитных полях с помощью адаптированного метода разбиения на ячейки Вороного [13]. В такой системе с увеличением магнитуды управляющего поля притяжение между частицами или живыми объектами мягкой материи растет [7], и происходят фазовые превращения – газоподобное состояние при выключенном поле переходит в жидкоподобное, а при дальнейшем увеличении магнитуды управляющего поля в кристаллическоподобное. Было показано, как определить положение критической точки на фазовой диаграмме с помощью разработанного нами метода вычисления корреляционных длин. Также впервые была построена фазовая диаграмма в системе коллоидных частиц в вертикальных магнитных полях. При увеличении магнитуды взаимодействия в такой системе частицы выстраиваются в вертикальные структуры. Был разработан оригинальный алгоритм для вычисления количества частиц в образованной вертикальной структуре и установлено, что распределение по длинам в данной системе носит экспоненциальный характер. Вся описанная обработка была проведена на

экспериментах, выполненных в МГТУ им. Н.Э. Баумана, НОЦ “Мягкая материя и физика флюидов”.

Таким образом, в настоящей работе показано, как методы обработки с помощью машинного обучения позволяют устанавливать взаимосвязи между физическими параметрами исследуемых систем мягкой материи и внешним управляющим воздействием. Такие взаимосвязи позволяют создавать цифровые двойники систем для моделирования физических процессов в мягкой материи, а также получать физические параметры процессов при самосборке мягкой материи на более глубоком уровне. Детальное исследование живой и модельной мягкой материи во внешних управляющих полях и их цифровых двойников позволят развивать технологии 3D-биопринтинга и «органа-на-чипе».

"Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ № 22-72-10128 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана".

Список литературы

1. Verhoef J. M. J., Meissner M., Kooij T. W. A. Organelle dynamics in apicomplexan parasites //Mbio. – 2021. – Т. 12. – №. 4. – С. e01409-21.
2. Mahdi Y., Daoud K. Microdroplet size prediction in microfluidic systems via artificial neural network modeling for water-in-oil emulsion formulation //Journal of Dispersion Science and Technology. – 2017. – Т. 38. – №. 10. – С. 1501-1508.
3. Stoecklein D. et al. Deep learning for flow sculpting: Insights into efficient learning using scientific simulation data //Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-11.
4. Nizovtseva I. et al. Assessing the Mass Transfer Coefficient in Jet Bioreactors with Classical Computer Vision Methods and Neural Networks Algorithms //Algorithms. – 2023. – Т. 16. – №. 3. – С. 125.
5. Dmitryuk N. A. et al. Diffusion mobility increases linearly on liquid binodals above triple point //Scientific Reports. – 2023. – Т. 13. – №. 1. – С. 2815.
6. Tsiok E. N. et al. The role of attraction in the phase diagrams and melting scenarios of generalized 2D Lennard-Jones systems //The Journal of Chemical Physics. – 2022. – Т. 156. – №. 11. – С. 114703.
7. Yakovlev E. V. et al. 2D colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions //Journal of Colloid and Interface Science. – 2022. – Т. 608. – С. 564-574.
8. Muller K. et al. Pattern formation and coarse-graining in two-dimensional colloids driven by multiaxial magnetic fields //Langmuir. – 2014. – Т. 30. – №. 18. – С. 5088-5096.
9. Connell H. C. The study and treatment of cancer by proteolytic enzymes: preliminary report //Canadian Medical Association Journal. – 1935. – Т. 33. – №. 4. – С. 364.
10. Mittal A. et al. Automated analysis of blood smear images for leukemia detection: a comprehensive review //ACM Computing Surveys (CSUR). – 2022. – Т. 54. – №. 11s. – С. 1-37.
11. Al-Kofahi Y. et al. A deep learning-based algorithm for 2-D cell segmentation in microscopy images //BMC bioinformatics. – 2018. – Т. 19. – №. 1. – С. 1-11.
12. Wang A. et al. A novel deep learning-based 3D cell segmentation framework for future image-based disease detection //Scientific Reports. – 2022. – Т. 12. – №. 1. – С. 1-15.
13. Ovcharov P. V. et al. Particle-resolved phase identification in two-dimensional condensable systems //The Journal of Physical Chemistry C. – 2017. – Т. 121. – №. 48. – С. 26860-26868.

Экспериментальное исследование трехмерной самосборки коллоидных структур в коническом магнитном поле

Широкова А. А.^{1,2}, Кохановская А. В.¹, Либет П. А.¹, Симкин И. В.¹, Насыров А. Д.¹, Юрченко С. О.¹, Яковлев Е. В.¹

¹МГТУ им. Н. Э. Баумана

²Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН

e-mail: shirokova2001@yandex.ru

Введение. Материи с регулируемым межчастичным взаимодействием, такие как коллоиды, в настоящее время имеют высокую популярность ввиду широкого спектра возможностей. Изучение таких материй имеет большое значение для фундаментальных [1] и прикладных [2] исследований. Большие размеры коллоидных частиц позволяют проводить экспериментальные исследования в режиме реального времени [3], что является важным преимуществом по сравнению с классической конденсированной материей. Перспективными методами управления явлением самосборки являются использование внешних электрических [4], магнитных [5], гравитационных полей [6] и т.д.

Метод управления самосборкой с использованием внешних магнитных полей обладает существенными преимуществами. Среди них возможность организации трехмерных полей при помощи нескольких катушек. В данной работе описана разработанная экспериментальная установка для генерации конического вращающегося магнитного поля, приведены пространственные распределения генерируемого магнитного поля, полученные при помощи моделирования методом конечных элементов, и изучена динамика самосборки коллоидных частиц в магнитном поле.

Методы и материалы. Разработанная установка состоит из независимо управляемых групп катушек: четырех катушек в горизонтальной плоскости и двух катушек в вертикальной плоскости. С помощью тока, подаваемого на катушки, осуществляется управление вектором магнитной индукции магнитного поля. Так как вертикальные и горизонтальные катушки управляются независимо, то путем задания соотношения силы тока на соответствующих группах катушек можно обеспечивать нужный угол прецессии вектора магнитной индукции. Генерируемое магнитное поле, в свою очередь, индуцирует управляемое взаимодействие между частицами.

Для экспериментов использовались объемно наполненные оксидом железа суперпарамагнитные частицы диоксида кремния или полистирола диспергированные в деионизированной воде.

Для изучения динамики самосборки коллоидных частиц были проведены эксперименты для различных углов прецессии вектора магнитной индукции конического поля.

При углах прецессии от 90° до 72.3° наблюдалась типичная картина сборки частиц в кластеры с гексагональной структурой. При дальнейшем изменении угла помимо кластеров частиц наблюдались перешейки – однорядные цепочки из частиц. При достижении магического угла $54,7^\circ$ наблюдалось кардинальное изменение поведения в системе частиц: частицы вместо самосборки в кластеры образовывали вертикальные структуры. Для всех углов прецессии были построены фазовые диаграммы системы частиц и определены положения критической и тройной точек.

Явление образования вертикальных структур также было подробно изучено. Для этого наблюдался процесс образования и разборки вертикальных структур. Показано, что структуры образовывались путем подползания частиц снизу. А также были построены гистограммы распределения количества частиц в вертикальных структурах в зависимости от магнитуды управляющего поля.

Также во внешних вертикальных полях было обнаружено образование горизонтальных змеевидных структур. «Змейки» представляют из себя цепочки из частиц, расположенных на двух разных уровнях относительно друг друга. Для их подробного изучения были проведены эксперименты при различной величине вертикального магнитного поля. После этого полученные видео подвергались компьютерной обработке, в результате которой определялись группы частиц, принадлежащих тем или иным «змейкам».

Заключение. В результате работы были рассмотрены процессы самосборки при различных значениях угла прецессии. Для углов прецессии от 90° до $54,7^\circ$ была построена фазовая диаграмма и определены положения критической и тройной точки. Для угла прецессии 0° была проведена серия экспериментов, в результате которой были получены вертикальные и змеевидные структуры. Такие эксперименты были обработаны, и в них были выделены группы частиц, принадлежащих тем или иным «змейкам».

Экспериментальные исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ № 22-72-10128 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Список литературы

1. Du D. et al. Two-dimensional melting of colloids with long-range attractive interactions //Soft Matter. – 2017. – Т. 13. – №. 8. – С. 1548-
2. Zhao J., Shi Z., Zhang Q. Synthesis and characterization of different morphologies of Ni (OH) 2 nanocrystals by a gas-liquid diffusion method at room temperature and supercapacitive properties //Journal of Alloys and Compounds. – 2016. – Т. 668. – С. 176-186.
3. Prasad V., Semwogerere D., Weeks E. R. Confocal microscopy of colloids //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – Т. 19. – №. 11. – С.
4. Yakovlev E. V. et al. 2D colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions //Journal of Colloid and Interface Science. – 2022. – Т. 608. – С. 564-574.
5. Li D. D. et al. Controlling the clustering behavior of particulate colloidal systems using alternating and rotating magnetic fields //Computational Particle Mechanics. – 2022. – Т. 9. – №. 2. – С. 315-333.
6. Zhou Q. et al. Study on the sedimentation self-assembly of colloidal SiO2 particles under gravitational field //Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2005. – Т. 253. – №. 1-3. – С. 169-174.

Голографические решетки в средах на основе фенотиазиновых красителей в полимерных матрицах

Лантух Ю. Д.¹, Раздобреев Д.А.¹

¹ОГУ

e-mail: *lantukh@yandex.ru*

Метиленовый голубой и другие фенотиазиновые красители благодаря своим фотохимическим свойствам [1] интенсивно исследуются и применяются как фотоантимикробные соединения, сенсibilизаторы синглетного кислорода в ФДТ, инициаторы фотополимеризации, фотосенсibilизаторы в реакциях переноса электрона.

В последнее время интерес к тиазиновым красителям связан с применением последних для фотосенсibilизации полимерных структур к красной области спектра, в частности, к излучению полупроводниковых и He-Ne лазеров.

Целью настоящей работы являлось исследование свойств регистрирующих сред на основе фенотиазиновых красителей в полимерных матрицах на основе желатина и поливинилового спирта и повышение светочувствительности таких сред.

В работе представлены результаты экспериментов по голографической записи в биополимерных пленках желатина (Ж), хитозана (Х) и смеси желатина с хитозаном, содержащих краситель метиленовый голубой (МГ). Голографические решетки записывались излучением непрерывного (532 нм) лазера по схеме в попутных пучках (равной интенсивности) на пространственной частоте 360 см^{-1} [2]. Измерялась интенсивность I пучка в первом порядке самодифракции. Дифракционная эффективность (η) оценивалась как отношение I к интенсивности I_0 одного из записываемых пучков. Дифракционная эффективность голограмм-решеток в пленке МГ-Х/Ж составила $0,9 \times 10^{-5} \%$, а в образце МГ-Ж - $0,8 \times 10^{-6} \%$.

Тип записи – амплитудный вследствие фотохимического обесцвечивания красителя. В работе [3] нами было показано, что фотообесцвечивание тиазиновых красителей в твердой гидроксилсодержащей пленке происходит вследствие образования лейкоформы красителя.

Более высокая эффективность голограмм-решеток в пленке МГ-Х/Ж с массовым отношением Х/Ж равным 0,05 по сравнению с МГ-Ж достигнута, по нашему мнению, благодаря эффективному заполнению молекулами красителей соответствующих сайтов связывания на желатине и уменьшением количества димеров [4]. Отметим, что в образце МГ-хитозан фотохимические голограммы не записывались.

Ранее [3] нами был предложен механизм фотовосстановления тионина в твердой гидроксидсодержащей матрице. Было показано, что:

- ассоциаты (димеры) красителей существенно влияют на кинетику обесцвечивания,
- реакция обесцвечивания метиленового голубого наряду с фотовосстановлением включает параллельные процессы деметилирования,

- добавление в пленки малых количеств глицерина позволяет управлять соотношением констант скоростей реакционной схемы, а также приводит к полному разрушению решеток после окончания записи.

Список литературы

1. Кричевский Г.Е. Фотохимические превращения красителей и светостабилизация окрашенных материалов / Г.Е. Кричевский—М.: Химия, 1986.— 248 с.
2. Лантух, Ю. Д. Модификация структуры желатиновых пленок для создания голографических регистрирующих сред и других оптоэлектронных материалов / Ю. Д. Лантух, С. Н. Летута, С. Н. Пашкевич, Э. К. Алиджанов, Г. А. Тихонов // HOLOEXPO 2019 : XVI международная конференция по голографии и прикладным оптическим технологиям : Тезисы докладов. — М. : МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2019. — С. 318–323.
3. Лантух Ю.Д. Использование среды тиазиновой краситель – поливиниловый спирт для записи голограмм / Ю.Д. Лантух, Г.А. Кецле, С.Н. Пашкевич //Оптический Журнал.— 2006.— Том 73.— № 7.— С. 70–74.
4. Лантух Ю.Д, Летута С.Н., Пашкевич С.Н.,и др. Высокоэффективный излучатель на основе пленок желатина с модифицированной структурой // Оптический журнал. 2019. Т. 86. № 9. С. 63-67.Ф

Влияние структурного состояния на упругие и микропластические свойства алюминиевого сплава АД1.

Нарыкова М. В.¹, Кардашев Б.К.¹, Бетехтин В.И.¹, Кадомцев А.Г.¹, Лихачев А.И.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: *Maria.Narykova@mail.ioffe.ru*

Исследование проводилось на техническом алюминии марки АД1. В состоянии поставки (исходное состояние) алюминиевый сплав был представлен в виде прутка круглого сечения диаметром 30 mm. По режиму механо-термической обработки, разработанному для формирования ультрамелкозернистой структуры в титане [1], было сформировано два состояния, обозначаемых далее как СМК-1 и СМК-2. Механо-термическая обработка состояла из нескольких этапов, сочетающих поперечно-винтовую и продольную прокатки с продольной сортовой прокаткой. После прокаток прутки имели форму стержня круглого сечения диаметром около 7 mm. Отличие в процессе формирования субмикроструктурной структуры для указанных двух состояний состояло в температуре при финишной прокатке: СМК-1 проводилось при комнатной температуре, СМК-2 – с применением дополнительного охлаждения в жидком азоте. Из СМК-1 отжигом при температуре 250°C в течении одного часа было сформировано рекристаллизованное микроструктурное состояние, обозначаемое далее МК.

Структурные исследования проводились с использованием просвечивающей растровой электронной микроскопии. Упругие и микропластические свойства (модуль Юнга E , амплитудно-независимый декремент упругих колебаний δ и напряжение микропластического течения σ) определялись резонансным методом составного пьезоэлектрического вибратора [2].

В исходном состоянии (до прокаток) структура представлена зернами преимущественно от 2 до 7 μm (рис. 1) с преобладанием малоугловых межзеренных границ. При прокатке на СМК-1 состояние была сформирована зеренная структура со средним значением размера зерна около 470 nm и относительно небольшой (~10%) долей зерен размером более 1 μm в поперечном сечении. Применение жидкого азота на финишном этапе прокатки для формирования структуры СМК-2 привело к некоторому увеличению среднего размера зерна – до 500 nm, однако размер крупных зерен не превышает 1.8 μm и в целом структура более однородна в сравнении с состоянием СМК-1. В рекристаллизованном МК состоянии средний размер зерен составляет около 1.5 μm (в поперечном сечении согласно данным просвечивающей электронной микроскопии), кроме того обнаружено, что размеры отдельных зерен достигают 7 μm .

Формирование ультрамелкозернистой структуры в техническом алюминии АД1 привело к изменению упругих и микропластических свойств. Наблюдается небольшое повышение модуля упругости для СМК-1 относительно исходного состояния – от 69.20 до 69.33 GPa. Применение дополнительного охлаждения при прокатке (СМК-2) привело к уменьшению модуля до 68.80 GPa (относительно исходного состояния 69.20 GPa). После рекристаллизованного отжига значение модуля существенно уменьшилось и составило величину даже ниже, чем в состоянии поставки - до 68.16 GPa.

Основным фактором, влияющим на изменение модуля Юнга в настоящей работе, является уровень внутренних напряжений. Более высокое значение в состоянии СМК-1 обусловлено именно влиянием далекодействующих полей высоких внутренних напряжений. Наблюдается заметное увеличение напряжения микропластического течения в ультрамелкозернистом

состоянии и стабильность логарифмического декремента для СМК-1 во всем диапазоне амплитуд колебательной деформации.

Список литературы

1. М.Б. Иванов, А.В. Пенкин, Ю.Р. Колобов, Е.В. Голосов, Д.А. Нечаенко, С.А. Божко. Теплая поперечно-винтовая прокатка в валках конической формы как метод интенсивной пластической деформации // Деформация и разрушение материалов. – 2010, №9. – стр. 13-18.
2. Никаноров С.П., Кардашев Б.К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М.: Наука, 1985. 254 с.

Влияние одноосной деформации вдоль тригональной оси на зонную структуру кристалла висмута

Гергега В. А.¹, Суслов А.В.¹, Степанов Р.С.¹, Комаров В.А.¹, Грабов В.М.¹, Колобов А.В.¹

¹РГПУ

e-mail: *gerega.vasilisa96@gmail.com*

Непрямое перекрытие потолка валентной зоны и дна зоны проводимости висмута, а также малая прямая запрещенная зона, чувствительная к внешним воздействиям, представляет большой интерес для деформационной инженерии зонной структуры [1,2]. Использование деформации открывает возможности для исследования перехода полуметалл-полупроводник и, возможно, перехода в нетривиальное топологическое состояние. Однако для расчетов из первых принципов исследование влияния деформаций на зонную структуру остается довольно сложной задачей. В некоторых работах на основе расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) сообщается, что в объеме зонная структура кристалла висмута тривиальна, но при этом одноосная деформация кристаллической решетки вдоль тригональной оси порядка 10 % приводит к появлению нетривиальных состояний [3], однако такие деформации экспериментально не достижимы. С другой стороны, в работе [4] показано, что определение с помощью расчетов в рамках DFT величины деформаций сжатия и растяжения, приводящих к возникновению топологически нетривиального состояния в точке L или открытию запрещенной зоны, может существенно зависеть от выбранного подхода.

Существенный интерес с экспериментальной точки зрения представляет исследование именно одноосной деформации вдоль тригональной оси кристалла, которая в общем случае соответствует деформации в тригональной плоскости, так как пленки висмута преимущественно вырастают так, что тригональная плоскость кристалла параллельна подложке [5]. В данной работе представлены результаты моделирования зонной структуры кристалла висмута в широком диапазоне деформаций вдоль тригональной оси. Полученные зависимости изменения величины непрямого перекрытия валентной зоны и зоны проводимости в зависимости от знака деформации качественно согласуются с экспериментальными зависимостями, получаемыми на основе феноменологических представлений. Показан переход в полупроводниковое состояние при деформации сжатия кристалла вдоль тригональной оси более 2 %, а также переход к бесщелевому состоянию в точке L при деформации растяжения кристалла вдоль тригональной оси. С учетом того, что величина непрямого перекрытия и прямой запрещенной зоны завышены в рамках использовавшегося подхода, можно ожидать наблюдение таких переходов в деформационных экспериментах с тонкими пленками висмута.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766).

Список литературы

1. Wu C. Y., Han J. C., Sun L., Gong H. R., Liang C. P. Effects of trigonal deformation on electronic structure and thermoelectric properties of bismuth // *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 30, No 28, pp. 285504 (2018).
2. Suslov A. V., Grabov V. M., Komarov V. A., Demidov E. V., Senkevich S. V., Suslov M. V. The band-structure parameters of $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($0 \leq x \leq 0.15$) thin films on substrates with different thermal-expansion coefficients // *Semiconductors*, Vol. 53, No 5, pp. 611–614 (2019).
3. Chang T.-R., Lu Q., Wang X., Lin H., Miller T., Chiang T.-R., Bian G. Band topology of bismuth quantum films // *Crystals*, Vol. 9, No 10, pp. 510, (2019).

4. Aguilera I., Friedrich C., Blügel S. Electronic phase transitions of bismuth under strain from relativistic self-consistent GW calculations // *Phys. Rev. B*, Vol. 91, No 12, pp. 125129 (2015).
5. Krushelnitskii A. N., Demidov E. V., Ivanova E. K., Kablukova N. S., Komarov V. A. Dependence of the surface morphology of ultrathin bismuth films on mica substrates on the film thickness // *Semiconductors*, Vol. 51, No 7, pp. 876–878 (2017).

Вакуумный отжиг Cr-SiC(4H) диодов Шоттки

Стрельчук А. М.¹, Калинина Е.В.¹, С.А.Сныткина¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: anatoly.strelchuk@mail.ioffe.ru

Ранее, при исследовании диодов Шоттки на основе эпитаксиальных слоев 4H-SiC, был обнаружен ряд эффектов, обусловленных, вероятно, дефектностью эпитаксиальных слоев ([1, 2] и ссылки в [1, 2]). Для определения некоторых параметров барьера Шоттки проводились измерения вольт-амперных (IV) характеристик при повышенных температурах, при этом, после каждого этапа нагрева диод охлаждался до комнатной температуры и вновь характеризовался. Таким образом был обнаружен эффект отжига диодов, приводящий к значительному изменению высоты барьера Шоттки в результате нагрева. В работах [1, 2] и др. (см. ссылки в [1, 2]) отжиг производился в воздушной атмосфере (что ограничивало температуру отжига ~200°C), а режим отжига можно рассматривать как близкий к изохронному, но без жесткой фиксации времени отжига. В настоящей работе, для более корректной характеристики эффекта, отжиг производился в течение жестко фиксированного времени (30 мин.) с шагом 100° до температур 400-500°C, не приводящих к физической деградации диодов, т.к. в отличие от предыдущих экспериментов, отжиг производился в вакууме. Исследовались I-V характеристики диодов Шоттки двух площадей, различающихся на два порядка, на основе одного коммерческого слаболегированного эпитаксиального слоя 4H-SiC с концентрацией нескомпенсированных доноров $N_d - N_a \sim 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Пленка Cr для создания Шоттки контакта (толщина пленки 0.1 мкм) наносилась термическим распылением в вакууме при температуре, близкой к комнатной.

Установлено, что до отжига прямой ток в области малых токов зависит от напряжения экспоненциально $I = I_0 \exp(qU/nkT)$, коэффициент идеальности n близок к 1, однако, как и ранее, было обнаружено, что IV характеристики различных диодов на одном и том же эпитаксиальном слое не совпадают и могут быть заметно сдвинуты друг относительно друга для диодов малой площади (до 3-4 порядков по току). Разброс IV характеристик диодов большой площади значительно меньше, однако все IV характеристики сдвинуты в область меньших напряжений на 0,3-0,4 В. Наблюдение за IV характеристиками отдельных диодов, а также усредненного эффекта, показывает, что при температурах отжига 100°-300°C эффект отжига заметен, но меньше, чем при более высоких температурах отжига. После отжига при максимальных температурах сдвиг IV характеристик может достигать 6-8 порядков по току и до 0,4-0,5 В по напряжению. Поскольку диоды Шоттки близки к идеальным, то даже при используемом низкотемпературном (100-500°C) отжиге эффект следует связывать скорее с изменением высоты барьера Шоттки (его уменьшением на 0,3-0,4 эВ при увеличении температуры отжига, обусловленным, по-видимому, изменением свойств границы раздела хром-карбид кремния), а не площади.

Список литературы

1. A.M. Strel'chuk and E.V. Kalinina, Schottky diodes based on 4H-SiC epitaxial layers, J. Phys.: Conf. Ser. 2103 012235 (2021).
2. A.M. Strel'chuk and E.V. Kalinina, Current-voltage characteristics of Cr/SiC(4H) Schottky diodes, Physica.SPb-2022.

Влияние комбинированной радиационной стерилизации на структурно-функциональные характеристики поверхности костных имплантатов

Николаева Н. А.¹, Розанов В.В.², Черняев А.П.², Мамаева С.Н.¹

¹Северо-Восточный федеральный университет имени М. К. Аммосова

²МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: larsoon696@mail.ru

Ключевые слова: костные имплантаты, комбинированная стерилизация, радиационная обработка, озоновое воздействие, биоимплантология

На сегодняшний день потребность в пластическом материале для проведения реконструктивно-восстановительных операций значительно возросла [1]. Подобная тенденция объясняется высоким уровнем заболеваний опорно-двигательного аппарата, производственного травматизма, увеличением количества операций, связанных с костной пластикой, эндопротезированием и последствием военных конфликтов [2-4]. Существует хроническая нехватка человеческих трансплантатов для лечения тканевой недостаточности. Для решения этой задачи установлены факторы, определяющие эффективность выполнения оперативных вмешательств, созданию и практической реализации новых подходов на этапах изготовления биоимплантатов, их стерилизации и хранения [4].

Существует высокая вероятность побочных эффектов, связанных с химическими, термическими способами стерилизации и другими воздействиями, которые изменяют структуру, морфо-механические параметры, нарушают остеоиндуктивные свойства кости и др. При стандартных для радиационной стерилизации дозах облучения (25 кГр), и даже при более щадящих дозах (15 кГр), пучок ускоренных электронов деминерализует и вызывает пористость образцов, что приводит к снижению эффективности свойств биоимплантатов [2], что подтверждает необходимость уменьшения дозы облучения при сохранении эффективности стерилизации.

С помощью ИК-спектроскопии, растровой электронной и атомно-силовой микроскопии проведен сравнительный анализ влияния озонового воздействия на образцы на первом этапе обработки. Показано, что в выбранном диапазоне параметров такое воздействие не приводит к морфологическим изменениям поверхности образца, но существенно изменяет элементный состав [4]. Также отмечен рост содержания кислорода в поверхностных слоях костного образца. Полученные результаты позволяют уточнить информацию о состоянии поверхностного слоя костных имплантатов.

Результаты исследования свидетельствуют о перспективности использования двухэтапного комбинированного радиационного подхода стерилизации костных имплантатов. По результатам анализа, при озоновой стерилизации сохраняется высокая остеоиндуктивность костной ткани, концентрация кислорода возрастает, что свидетельствует о сильном взаимодействии озона с кислородом в составе кости, высокая доза облучения деминерализует и вызывает пористость образцов, что приводит к снижению эффективности свойств биоимплантатов. В предлагаемой технологии с применением на первом этапе озонового воздействия не установлены изменения элементного состава и структурно-функциональных характеристик костных образцов. При этом появляется возможность снижения дозы ионизирующего излучения на втором этапе процесса комбинированной стерилизации при радиационной обработке до значений (11 – 12) кГр, что не

вызывает существенных структурно-функциональных изменений при обеспечении необходимого уровня стерильности костных имплантатов. Максимально снизить интенсивность воздействия ионизирующего излучения на образцы возможно при комбинировании методе стерилизации.

Дальнейшие исследования структурно-функциональных характеристик костных имплантатов, элементного состава и др. при озоновом и радиационном воздействиях, а также после последовательной обработки в процессе комбинированной стерилизации позволят получить новые сведения для повышения эффективности использования их в биоимплантологии.

Список литературы

1. Матвейчук И.В., Розанов В.В., Пантелеев В.И. и др. // Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии. 2013, Т. 11, № 11, с. 92-97
2. Шангина О.Р., Нигматуллин Р.Т. // Морфология. 2006. Т. 129. №3. с. 44.
3. Матвейчук И. В., Розанов В.В., Гордонова И.К. и др. - Комбинированный способ стерилизации костных имплантатов, Патент РФ № 2630464 от 08.09.2017, Бюл. №25 с. 3.
4. Розанов В.В., Матвейчук И.В., Черняев А.П. и др. // Известия Российской академии наук. Серия физическая, 2020, том 84, № 11, с. 1589-159

Исследование тепловых свойств полимеров методом классической молекулярной динамики с использованием глубокого обучения

Шейн Д. В.¹, Завьялов Д. В.¹, Конченков В. И.¹

¹ВолГТУ

e-mail: danil.shein2013@yandex.ru

Целью работы является прояснение вопроса применимости использования нейронных сетей для предсказания сил и потенциалов межатомного взаимодействия в методе классической молекулярной динамики (МД) для нахождения тепловых свойств полимеров (на примере полифениленсульфида). В качестве исследуемых свойств были выбраны температура стеклования и коэффициент теплопроводности.

В методе классической молекулярной динамики мы численно интегрируем уравнения Ньютона для всех частиц системы. Основным недостатком этого метода является то, что потенциалы межатомного взаимодействия задаются в виде набора коэффициентов и эмпирически определённых зависимостей, что может отражаться на адекватности вычислений.

Одним из современных подходов при моделировании веществ методом классической МД является использование нейронных сетей для предсказания сил и потенциалов межатомного взаимодействия. Так с помощью пакета глубокого обучения DeePMD-kit [1] возможно построить точную и, благодаря ускорению расчётов на GPU, вычислительно очень эффективную модель силовых полей.

Объектами обучения сети являются результаты моделирования *ab initio* МД. В 1985 году Кар и Парринелло предложили метод МД [2], в котором система взаимодействующих электронов и ионов рассматривается совместно, причём движение ядер атомов, задаётся классически, а электронные степени свободы – квантово-механическими волновыми функциями. Именно этим методом моделирования *ab initio* МД мы и пользуемся в работе.

С помощью программы LAMMPS [3] было проведено моделирование полифениленсульфида методом классической МД с силовыми полями, построенными с помощью глубокого обучения. Результаты симуляции показывают стабильность системы во времени и хорошее согласие вычисляемых величин с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Wang, Han; Zhang, Linfeng; Han, Jiequn; E, Weinan (2018). DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics. Computer Physics Communications. doi:10.1016/j.cpc.2018.03.016 arXiv:1712.03641v2
2. Car, R. (1985). Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory, 55(22), 2471–2474. doi:10.1103/PhysRevLett.55.2471
3. <https://lammps.org/>

Двухзеркальный многослойный монохроматор для синхротронов поколения 4+

Глушков Е. И.¹, И. В. Малышев¹, Е. В. Петраков¹, Н. И. Чхало¹, Ю. В. Хомяков², Я. В. Ракшун², В. А. Чернов²,
И. П. Долбня³

¹ИФМ РАН

²ИЯФ СО РАН

³Diamond Light Source

e-mail: eglushkov@ipmras.ru

Разработан проект двухзеркального монохроматора (ДЗМ) для синхротрона «СКИФ» поколения 4+. Рассчитаны параметры многослойных рентгеновских зеркал (МРЗ) Mo/W4C, W/W4c и Cr/Be для монохроматизации синхротронного излучения (СИ) в диапазоне 10-30 кэВ. Для минимизации тепловой деформации рассчитаны оптимальные параметры кремниевых подложек МРЗ, содержащих проточки для достижения субмикрорадианной расходимости пучка СИ, падающего под углами скольжения 0.5°-1.3° мощностью до 200 Вт. Оценено влияние расходимости пучка СИ на выходе ДЗМ на пятно фокусировки разрабатываемой в ИФМ РАН системы Киркпатрик-Баеза (КБ). Нанометровая остаточная тепловая деформация монохроматора может быть скомпенсирована децентровкой КБ-системы на несколько микрон. В докладе будет освещён текущий статус разработки монохроматора, будет описан разрабатываемый стенд для измерения формы длинных зеркал со сшивкой кадров, методика сшивки и приведены последние результаты по полировке кремниевых подложек.

Введение. На разрабатываемом в СО РАН источнике СИ 4-го поколения «СКИФ» планируется использование МРЗ для различных приложений. В частности, на экспериментальной Станции 1-1 «Микрофокус» [1] для выделения одной гармоники СИ и отвода $\approx 96\%$ тепла в ИФМ РАН разрабатывается ДЗМ с перестраиваемой рентгеновской длиной волны [2]. В ряде экспериментов на Станции 1-1 «Микрофокус» на выходе ДЗМ будет использоваться двух-кристальный монохроматор, поэтому расходимость пучка на выходе ДЗМ не должна превышать расходимость после кристального монохроматора с СКО 1 мкрад.

Принципы устройства монохроматора. В основе монохроматора лежит следующая концепция. Для сохранения направления пучка для любой энергии используются два идентичных по параметрам плоских зеркала. Так как в процессе сканирования по энергии отраженный от первого зеркала луч изменяет направление, то второе зеркало, помимо подстройки по углу Брэгга, совершает линейное перемещение, чтобы отраженный от первого зеркала пучок попал в центр второго зеркала. В этом случае вышедший из монохроматора луч сохранит как направление движения, параллельно входящему в монохроматор пучка, так и постоянный офсет 11.5 мм. Выбор длины волны осуществляется поворотом зеркал на один угол.

Первое зеркало монохроматора установлено на системе подвижек, обеспечивающих для юстировки и сканирования по энергии следующие типы движений: — поперечное (перпендикулярно направлению распространения рентгеновского пучка) в пределах ± 25 мм с шагом 5 мкм; — вертикальное перемещение в пределах ± 25 мм с шагом 10 мкм; — поворот зеркала для установки угла Брэгга в пределах 360° с шагом 0.0001° . Вертикальное перемещение позволяет оперативно менять тип многослойного покрытия при наличии нескольких стрипов с МРЗ на одной подложке. Система подвижек второго зеркала, помимо указанных выше, включает в себя гониометр для наклона второго зеркала по отношению к первому и длинную линейную

подвижку для сканирования о энергии. Гониометр обеспечивает наклон в диапазоне $\pm 17^\circ$ с шагом 0.001° . Продольная, линейная подвижка обеспечивает перемещение на 425 мм, с шагом 0.05 мм. Сверхвысокий вакуум ($5 \cdot 10^{-9}$ мбар) будет поддерживаться двумя магниторазрядными насосами, не дающими вибрации.

Расчет параметров подложки. С учетом высоких интенсивностей пучков СИ немаловажным фактором, ограничивающим максимальный рабочий угол многослойных зеркал, является высокая плотность поглощенной мощности, приводящая к термоиндуцированной деформации поверхности и, соответственно, отраженного волнового фронта. Для решения этой задачи были проведены тепловые расчеты в SolidWorks. Зеркало представляет собой кремниевую подложку длиной 250 мм, шириной 23.5 мм, высотой 20 мм и проточками вдоль зеркала шириной 3 мм, глубиной 3.5 мм. Параметры подложки рассчитывались таким образом, чтобы расходимость пучка на выходе ДЗМ при угле скольжения 1.3° была порядка 1 мкрад, но может быть уменьшена 12% отрезанием краёв пучка на выходе до 0.5 мкрад. Расходимость для меньших углов скольжения $0.5-0.9^\circ$ составляет 0.2 – 0.3 мкрад.

Список литературы

1. Чхало, Н. И., и др. // ЖТФ, №92(8), 1261-1266 (2022).
2. Sawhney, K. J. S., et al. // Advances in X-Ray/EUV Optics and Components VI. Vol. 8139. SPIE, 2011.

Структурный фазовый переход в LiV_2O_5

Савин А. В.¹, Рогинский Е. М.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

e-mail: alekssavin97@gmail.com

В сфере развития возобновляемой энергетики самым проблемным является вопрос эффективного накапливания энергии и использования её по мере необходимости. Однако проблема выбора оптимального материала для катода до сих пор остаётся нерешенной. Наиболее широко в промышленном производстве таких аккумуляторов в качестве катодного материала используют слоистые кристаллы Li_xMO_2 (здесь М – атом переходного металла), например катод из LiFePO_4 обеспечивает ёмкость 165 mA h/g [1]. Альтернативой может служить наиболее термодинамически устойчивый оксид ванадия V_2O_5 , который имеет слоистую кристаллическую структуру, что определяет его привлекательность в качестве катодного материала.

Структура интеркалированного атомами лития синтезированного химически с помощью окислительно-восстановительной реакции иодида лития и пентоксида ванадия была определена экспериментально с помощью рентгеноструктурного анализа [2]. Однако, при определении пространственного упорядочения не удалось, основываясь только на рентгеноструктурных данных, однозначно установить группу симметрии. С целью устранения неоднозначности были выполнены квантово-химические расчеты динамики решетки. В результате *ab initio* расчетов оптимизации структурных параметров дельта фазы пентоксида ванадия интеркалированного атомами лития показано, что структура $\delta\text{-LiV}_2\text{O}_5$ сохраняет свою слоистую природу (как и в $\alpha\text{-V}_2\text{O}_5$). Расчёт фононного спектра центросимметричной структуры выявил наличие мнимых мод, что указывает на ее нестабильность, поэтому был выполнен поиск пространственного упорядочения атомов с помощью искажения структуры вдоль мнимых мод. В результате установлена пространственная группа в которой отсутствует центр инверсии. Выполнен расчет динамических свойств, который подтвердил стабильность данной фазы по отношению к колебательным состояниям. В дальнейшем был выполнен расчет электронной структуры и построена парциальная плотность электронных состояний локализованных на каждом атоме в элементарной ячейке. Показано, что в результате интеркалирования атомами лития атомы V принимают различное валентное состояние, а именно V^{4+} и V^{5+} .

Согласно фазовой диаграмме, при температуре 100 °C происходит плавное изменение структурных параметров ванадиевой бронзы, приводящее в конечном итоге к новой структуре – эпсилон фазе. Расчет динамических свойств $\epsilon\text{-LiV}_2\text{O}_5$ в пространственной группе без центра инверсии продемонстрировал устойчивость структуры по отношению к колебательным состояниям.

В фононном спектре низкотемпературной фазы обнаружено низкочастотное колебание на границе Зоны Бриллюэна, которое соответствует коллективному противофазному колебанию атомов в соседних слоях, причем данное колебание отсутствует в высокотемпературной фазе. Показано, что искажение структуры дельта фазы вдоль низкочастотного колебания приводит к взаимному смещению соседних слоев, в результате чего нарушается пространственная структура и индуцируется структурный фазовый переход в эпсилон фазу. Для экспериментального подтверждения фазового перехода был выполнен расчет спектра

комбинационного рассеяния в котором обнаружены характерные особенности для каждой из фаз.

В результате в рамках теории функционала плотности выполнен расчёт динамических свойств дельта и эpsilon фаз пентаоксида ванадия интеркалированного литием, предложена микроскопическая модель фазового перехода, сопровождаемого изменениями в спектрах комбинационного рассеяния.

Список литературы

1. Tarascon, J.-M. & Armand, M., Nature 414, 359–367 (2001).
2. Millet, P. et al., J. Solid State Chem. 136, 56–62 (1998).