

ЭЛЕКТРОННЫЕ, СПИНОВЫЕ И КВАНТОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

1994



2019

Сборник тезисов докладов и сообщений

***Всероссийской конференции-школы
с международным участием***

посвященной 25-летию

**Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
и 100-летию создания**

Уфимского физического института (1919-1937 гг.)

Уфа - 2019

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Отделение физических наук Российской академии наук
Академия наук Республики Башкортостан
Уфимский федеральный исследовательский центр РАН
Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
Институт математики с вычислительным центром УФИЦ РАН
Башкирский государственный университет

**Всероссийская конференция-школа
с международным участием**

**ЭЛЕКТРОННЫЕ, СПИНОВЫЕ И
КВАНТОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В
МОЛЕКУЛЯРНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
СИСТЕМАХ**



Сборник тезисов докладов и сообщений
22–25 мая 2019 года

Уфа–2019

УДК 53
ББК 22.3
Э 45

Э 45 **Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах:** Сб. тезисов докладов и сообщений на Всерос. конф. – Уфа: Изд-во БГПУ, 2019. – 158 с.

ISBN 978-5-907176-12-6

Сборник подготовлен по материалам, предоставленным участниками Всероссийской конференции-школы с международным участием "Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах", приуроченной к 25-летию Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН и 100-летию создания Уфимского физического института (1919–1937 гг.) и проводимой с 22 по 25 мая 2019 года в ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа. Конференция охватывает широкий спектр актуальных фундаментальных и прикладных проблем, связанных с электронными, спиновыми и квантовыми процессами, происходящих в молекулярных структурах, органических, магнитных, наноструктурных материалах и жидких кристаллах.

Издание предназначено для научных сотрудников, аспирантов и студентов физических и физико-химических специальностей.

**Конференция проводится при поддержке Главы Республики
Башкортостан**

Материалы сборника напечатаны с представленных авторами оригиналов на основании решения рецензионной комиссии.

Рецензионная комиссия: д.ф.-м.н. Асфандиаров Н.Л., д.ф.-м.н. Гареева З.В., д.ф.-м.н. Гундеров Д.В., д.ф.-м.н. Лачинов А.Н., д.ф.-м.н. Скалдин О.А.

Редакционная коллегия: Пшеничнюк С.А., Цеplin Е.Е., Хатымов Р.В.

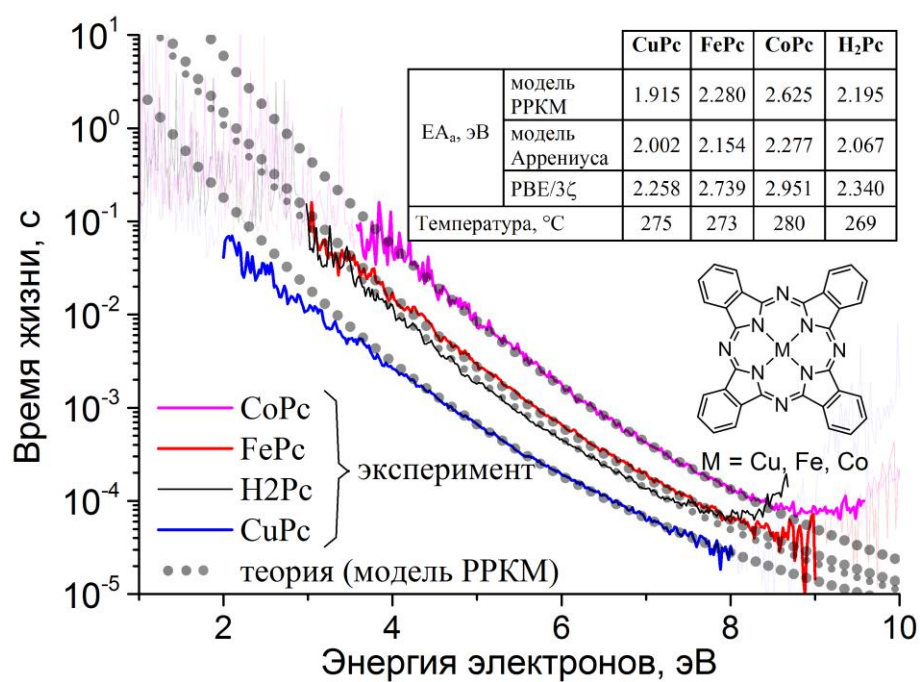
ISBN 978-5-907176-12-6

© ИФМК УФИЦ РАН, 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Спектроскопия и масс-спектрометрия.....	5
2. Свойства перспективных органических материалов.....	29
3. Магнитные явления.....	42
4. Физика жидких кристаллов.....	56
5. Электрон-стимулированные процессы в молекулярных системах.....	69
6. Явления на поверхности, границах раздела и в пленках.....	74
7. Математические и квантово-химические методы в физике молекул и кристаллов.....	100
8. Теория солитонов.....	112
9. Наноструктурные материалы.....	124
Авторский указатель.....	155

Спектроскопия и масс-спектрометрия



ELECTRON IMPACT EXCITATION AND DISSOCIATIVE EXCITATION PROCESSES TO MOLECULES ¹

Matejčík Š., Ďurian M., Országh J.

*Department of Experimental Physics, Comenius University Bratislava, Slovakia,
e-mail: matejcik@fmph.uniba.sk*

The fundamental data regarding the electron – molecule interactions are of vital interest in several fields of the science such as plasma physics, radiation chemistry, astrophysics, etc. The Electron Induced Fluorescence (EIF) technique is a suitable instrument which can be applied to explore such electron interactions like the electronic excitation and dissociative excitation of molecules as well as other electron interaction associated with emission of photons e.g., electron ionisation and dissociative ionisation associated with excitation of ionic states. In this contribution we are going to present the implementation of the EIF technique at Comenius University in Bratislava [1-3]. The experimental setup includes trochoidal electron monochromator and UV-VIS optical monochromators (0.25m and 1.5m) equipped with photomultiplier detectors. We are going to present recent achievements including examples of electron molecule interactions with such molecules like H₂, D₂, H₂O, C₂H₂.

References:

1. Danko M. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2013. V. 46. P. 045203.
2. Danko M., Ribar A., Ďurian M., Országh J., Matejčík Š. // Plasma Sources Sci. and Technol. 2016. V. 25. P. 065007.
3. Országh J., Danko M., Čechvala P., Matejčík Š. // Astrophys. J. 2017. V. 17. P. 841.

¹ We acknowledge support by Slovak research and development agency under contract no. apvv-15-0580.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ТОКИ НА УТРОЕННОЙ ЧАСТОТОЙ В КРИСТАЛЛАХ С НЕПАРАБОЛИЧЕСКИМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Амонов А.К., Носиров Б.А.

*Самаркандский филиал Ташкентский университет информационных технологий имени Мухаммада Ал-Хоразмий. г. Самарканд. Узбекистан,
e-mail: adkham1972@gmail.com*

Закон дисперсии электронов в кристаллах типа вюрцита с энергиями близкими к экстремальной, имеет вид [1,2]

$$\varepsilon_{1,2} = (\hbar^2 \left[(k_1 \mp k_1(0))^2 \right] / (2m_1) + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2}) \quad (1)$$

Целью настоящей работы является исследование особенностей временной зависимости тока в полупроводнике с законом дисперсии ε_2 при воздействии на него гармонического электрического поля.

Используя метод нелинейной спектроскопии, получим выражение для плотности тока:

$$j_1 x = \sigma E_1(0) e^{i\omega t} + \sigma (E_1(0)^2) / (E_1(0)^2) E_1(0) e^{i\omega t} \quad (2)$$

Для оценки величины E_* примем $\Delta \approx 10^{-4}$ эВ, $m_{\perp} \approx 10^{-27}$ г., $k_B T_3 \approx \Delta/2$, тогда для E , получаем значение около 10 В/см.

Таким образом, в образце размером 0,1 см при приложении внешнего напряжения амплитудой 0,1 В будет генерироваться напряжение на утроенной частоте с амплитудой 3 мВ. Итак, если приложить излучение в диапазоне длин волн $\lambda \approx 4 \div 0,5$ мм, то в пленках с законом дисперсии (1) возможна генерация излучения субмиллиметрового диапазона.

Установлено, что умножение частоты в миллиметровом диапазоне длин волн происходит за счет непараболичности зоны проводимости [3].

Список литературы:

1. Рашба Э.И., Шека В.И. //Физика твердого тела: Сб. статей. 1959. Т.2. С. 162.
2. Пикус Г.Е. //ЖЭТФ. 1961. Т. 41. С. 1507.
3. Мусаев П.Х., Амонов А.К. //Изв. ВУЗов Радиофизика. 1999. Т.17. № 12. С.1197.

О ВЛИЯНИИ ПРОЦЕССА ИЗМЕРЕНИЯ НА ЕГО РЕЗУЛЬТАТЫ НА ПРИМЕРЕ СПЕКТРОСКОПИИ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ¹

Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Рахмеев Р.Г., Нафикова Е.П., Галеев Р.В.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, nail@anrb.ru

Спектроскопия диссоциативного захвата электронов (ДЗЭ) технически может быть реализована на приборах с времяпролетными, квадрупольными или магнитными масс-анализаторами. Они различаются временными окнами измерения спектров, а именно временем вытягивания ионов из камеры ионизации t^{ext} и временем пролета ионов до момента детектирования t^f . Сечения образования временно-живущих молекулярных M^- и стабильных осколочных R^- ионов связаны с полным сечением захвата электронов σ_{cap} соответствующими кинетическими уравнениями. Наблюдаемая в эксперименте интенсивность молекулярных и осколочных ионов

$$I(M^-) = \int_0^{t^f} M^-(t) dt, \quad (1)$$

$$I(R^-) = \int_0^{t^{ext}} R^-(t) dt \quad (2)$$

будет функцией этих времен. Такой эффект наблюдается в спектрах ДЗЭ галоген-производных анизола [1] и 4-бромбифенила [2].

Основным выводом работы является то, что спектры ДЗЭ, полученные в различных экспериментальных условиях, закономерно отличаются друг от друга, если процессы их распада происходят на временах автоотщепления $1/k_a$ и диссоциации $1/k_d$, сопоставимых с характерными временными окнами прибора t^{ext} и t^f .

Список литературы:

1. Asfandiarov N. L., Muftakhov M.V., Pshenichnyuk S. A., Papp P., Danko M., Lacko M., Blaško J., Matejčík Š., Modelli A. // J. Chem. Phys. 2017. 147. 234302.
2. Asfandiarov N.L., Pshenichnyuk S.A., Rakhmееv R.G., Tuktarov R.F., Zaitsev N.L., Vorob'ev A.S., Kočíšek J., Fedor J., Modelli A. // J. Chem. Phys. 2019. 150. 114304.

¹ Работа поддержана РФФИ, проект № 18-03-00179.

**ВАРЬИРОВАНИЕ ГАЛОИДНОГО АНИОНА – ЭФФЕКТИВНЫЙ
СПОСОБ РЕГУЛИРОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНО-ЯРКОСТНЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ДВУХВАЛЕНТНОГО
ЕВРОПИЯ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ**

Булгаков Р.Г.^а, Якупова С.М.^б, Галимов Д.И.^б

^а *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450054, г. Уфа, пр. Октября, 71, e-mail: profbulgakov@yandex.ru*

^б *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, пр. Октября, 141, e-mail: galimovdi@mail.ru*

В жидкофазной системе $(EuI_2 \cdot (THF)_2 \cdot O_2) - (i-C_4H_9)_2AlH$ обнаружена очень яркая, видимая на свету не вооруженным глазом, зеленая ($\lambda_{max} = 530$ нм) хемилюминесценция (ХЛ) иона европия Eu^{2+} , излучающее $5d^1$ -возбужденное состояние которого генерируется за счет акцептирования энергии от триплетно-возбужденного изомасляного альдегида. Последний образуется в реакции диспропорционирования пероксильных радикалов $i-C_4H_9OO\cdot$ – продуктов окисления $(i-C_4H_9)_2AlH$ кислородом. В родственных системах $(EuX_2 \cdot (THF)_2 \cdot O_2) - (i-C_4H_9)_2Al$ ($X = Cl$ и Br), отличающихся только природой аниона галоида (X) также обнаружено излучение света (менее яркое) от возбужденного иона Eu^{2+*} (переход $d-f$), но в более коротковолновой области ($\lambda_{max} = 468$ и 470 нм, соответственно). Измеренные квантовые выходы ХЛ в зависимости от природы галоида (X) уменьшаются в ряду: 0.48% ($X = I$) $>$ 0.027% ($X = Cl$) $>$ 0.015% ($X = Br$). Измерены спектры ХЛ, возбуждения и излучения фотолюминесценции, а также времена жизни возбужденных состояний иона Eu^{2+} в исходных комплексах и в реакционных растворах. Обнаруженные в работе светоизлучающие системы, отличающиеся легким регулированием яркости и цвета люминесценции, перспективны для создания новых химических источников света.

ПРИРОДНЫЕ БИОТЕХНОЛОГИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ КОНКРЕЦИЙ МЕТАЛЛОВ

Елькин Ю.Н.

Тихоокеанский институт биоорганической химии ДВО РАН, Владивосток

e-mail: yurielkin@list.ru

Молодь морских ежей семейства *Scutellidae* выбирает из донного песка минеральные частицы и накапливает их в дивертикуле (аппендиксе) кишечного тракта как балласт. Однако, *Scaphechinus mirabilis*, эндемик Японского моря, даже явно взрослый еще сохраняет песчинки в дивертикуле. Обзор песчинок в его дивертикуле и в морском дне обнаружил в балласте только цирконы и ильмениты. В песчаном дне их на четыре порядка меньше, чем кварца и полевого шпата – основных минералов.

Обзор фекалий ежей показал, что они потребляет все минералы донного песка наряду с основным питанием – диатомами. Минерализованные перекисью водорода фекалии содержат 40 об.% тонкой суспендированной фракции. Значительная часть этой фракции приходится на аморфный кремнезем фруструл диатомей. Тогда как в донном песке тонкая фракция составляет всего 0.1 об.% и представляет собой глинистые продукты выветривания горных пород. Микровизуализация (SEM), энергодисперсионный (EDX) и элементный (ICP MS) анализы тонкой фракции фекалий обнаружили наряду с деградированными частицами минералов, продукты биотехнологии выщелачивания – силикатные конкреции со значительным содержанием серебра, железа и титана. Этот факт позволяет предположить, что кишечный микробиом назначает через наружный орган (мириады микроигл и подий) «меню» организму-хозяину – песчаному доллару *Scaphechinus mirabilis*.

Рассматривается возможность применения микробиома ежей для технологий освоения минеральных ресурсов Океана или переработки металл содержащих отходов.

СТРУКТУРА ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СЛАБОСВЯЗАННЫХ ЧЕТЫРЕХАТОМНЫХ КОМПЛЕКСОВ МОЛЕКУЛЫ ЙОДА С АТОМАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ¹

Жиронкин А.И., Батуро В.В., Лукашов С.С., Порецкий С.А., Правиков А.М.

*Санкт-Петербургский Государственный университет, 199034,
Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9, e-mail: anazhironkin@gmail.com.*

Исследования ван-дер-Ваальсовых (ВДВ) комплексов молекул галогенов с атомами инертных газов позволяют получить информацию об эффектах слабого межмолекулярного взаимодействия на внутримолекулярную динамику партнеров по комплексу, на перераспределение энергии возбуждения, а также как меняются эти эффекты с увеличением количества степеней свободы. Данная информация имеет особенное значение для практического применения в фотофизике и фотохимии сложных систем.

В данной работе представлены результаты и анализ экспериментальных исследований четырёхатомных ВДВ комплексов молекулы I_2 и атомов Ne в возбужденных электронных состояниях, проведенных методом лазерной флуоресцентной спектроскопии (LIF). Эксперименты проводились на установке по формированию сверхзвукового молекулярного пучка. Для возбуждения ВДВ комплексов использовалась система из двух перестраиваемых лазеров на красителях, с помощью которых применялась схема возбуждения двойного оптического резонанса (OODR).

Для интерпретации полученных экспериментальных данных нами были построены поверхности потенциальной энергии комплекса в исследуемых состояниях и произведены теоретические расчеты их колебательной структуры.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №18-33-01014.

АНАЛИЗ СПЕКТРА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ 6-МЕТИЛ-1-(ТИЕТАН-3-ИЛ) ПИРИМИДИН-2,4(1Н,3Н)-ДИОНА²

Лазарев В.В.^а, Катаев В.А.^б

^а *Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. К. Маркса, д. 12,
e-mail: lvlad@inbox.ru*

^б *Башкирский государственный медицинский университет*

Спектры комбинационного рассеяния (КР) 6-метил-1-(тиетан-3-ил) пиримидин-2,4(1Н,3Н)-диона получены на Фурье-спектрометре FT-Raman NXR 9650 в области 70–3800 см⁻¹ с разрешением 2 см⁻¹. В приближении B3LYP/6-311++G(d,p) рассчитаны частоты нормальных колебаний (КР и ИК спектры) молекулы 6-метил-1-(тиетан-3-ил) пиримидин-2,4(1Н,3Н)-диона в гармоническом приближении для мономера и димера, и частоты колебаний с учетом «спектроскопической массы» водорода, а также дано их отнесение по рассчитанным коэффициентам форм нормальных колебаний.

Теоретический анализ колебательного спектра свободной молекулы 6-метил-1-(тиетан-3-ил)пиримидин-2,4(1Н,3Н)-диона дает отклонение от экспериментального значения валентного колебания $\nu_s(\text{NH}) \sim 540 \text{ см}^{-1}$. Интерпретация экспериментального спектра фундаментальных колебаний 6-метил-1-(тиетан-3-ил)пиримидин-2,4(1Н,3Н)-диона основана на анализе спектра в предположении, что молекулы в кристалле образуют комплексы (димеры) с водородной связью и находятся в связанном состоянии. Частичный учет механического ангармонизма в применении к димеру существенно улучшил согласие измеренных и вычисленных частот в высокочастотной и средней областях колебательного спектра. Обсуждается возможность образования в образце и более сложных Н-ассоциатов, состоящих из большего числа молекул.

² Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации проекта № 16.1969.2017.4.6

ПРОБЛЕМА ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

Лукин В.Г., Хвостенко О.Г., Туймедов Г.М.

ИФМК УФИЦ РАН, Россия 450075, Уфа, Проспект Октября, 151

e-mail: Lukin@anrb.ru

Общеизвестная проблема в исследованиях среднего времени жизни (τ_a) отрицательных ионов (ОИ) – невоспроизводимость экспериментальных величин τ_a как на времяпролетных и статических масс-спектрометрах (МС) [1, 2], так и на других приборах: ИЦР, ELISA, ловушки Пеннинга. Последние исследования, выполненные на статическом МС МИ-1201В [3, 4], указывают на то, что основная причина разброса экспериментальных величин τ_a

заключается в процессах, происходящих в камере ионизации источника ионов Нира (5-7, 9 на рис. 1). Таковыми являются процессы адсорбции ОИ на стенках камеры ионизации, где ионы частично нейтрализуются, а частично десорбируются как «вечноживущие» ($\tau_a = \infty$). Вклад «вечноживущих» ионов, смешивающихся с газофазными, приводит к искажению

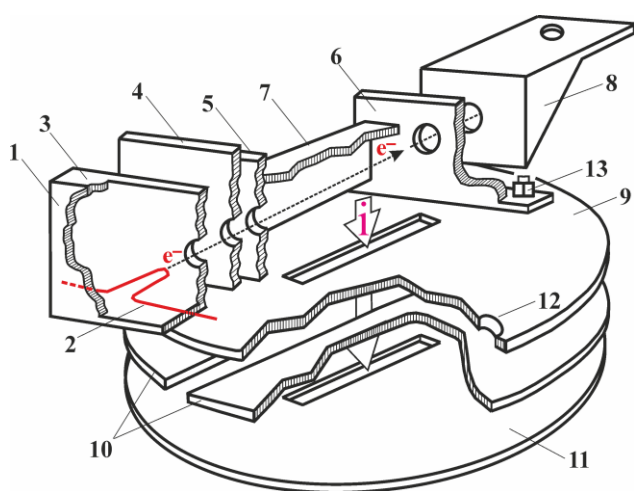


Рис. 1. Источник ионов Нира повышенной светосилы.

измеряемой величины τ_a .

Список литературы:

1. Edelson D., Griffiths J. E., McAfee K.B. // J. Chem. Phys. 1962. Т. 37. Р. 917.
2. Хвостенко В.И. и др. // Изв. АН СССР сер. хим. 1973. №3. С. 681.
3. Лукин В.Г., Туймедов Г.М. // ПТЭ. 2013. № 5. С. 77.
4. Лукин В.Г., Хвостенко О.Г. // УФН. 2017. 187. № 9. С. 981.

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВОЗБУЖДЕНИЯ ВАЛЕНТНОГО КОЛЕБАНИЯ ОН ГРУППЫ ФЕНОЛА**

Михайлов Г.П.

*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа,
e-mail: gpmihailov@mail.ru*

Эффект внутримолекулярного колебательного перераспределения (intramolecular vibrational redistribution, IVR) – фундаментальное явление, присущее любой многоатомной молекуле, если она достаточно сильно возбуждена. Несмотря на определяющую роль экспериментальных методов (например, метод фемтосекундной ИК накачки–зондирования) важны методы неравновесной молекулярной динамики (МД) позволяющие получать уникальную информацию о процессах IVR и более того, в некоторых случаях именно МД позволяет правильно интерпретировать получаемые в эксперименте данные. При возбуждении валентного колебания гидроксильной группы молекулы возникает процесс внутримолекулярного V-V- обмена энергией между колебаниями. Цель работы - исследование временной эволюции флуктуаций кинетической составляющей колебательной энергии молекулы фенола от степени колебательного возбуждения валентного колебания гидроксильной группы и оценка нижней границы времени внутримолекулярного обмена энергий между модами (τ_{VV}). Представлены результаты расчетов временной эволюции длин связей, энергий и числа возбужденных колебательных мод молекулы фенола методом Хартри-Фока в полуэмпирической параметризации RM3, совместно с классической МД, и оценена энергия стохастизации колебательного возбуждения. Установлено, что время τ_{VV} зависит от энергии колебательного возбуждения и значительно увеличено для дейтерированной молекулы фенола.

ИК СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛ ТИОГЛИКОЛИЕВОЙ КИСЛОТЫ, ПАССИВИРУЮЩИХ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ Ag_2S ¹

Овчинников О.В., Кондратенко Т.С., Гревцева И.Г., Смирнов М.С.,
Ерина О.В., Хохлов В.Ю.

*Воронежский государственный университет, 394018, Воронеж, Россия,
e-mail: ovchinnikov_o_v@rambler.ru*

В данной работе выполнено исследование ИК спектров молекул тиогликолевой кислоты (TGA), записанных для различных концентраций и значений pH раствора, а также для случая пассивации ими интерфейсов коллоидных квантовых точек Ag_2S . Интерпретация основывалась на результатах численного моделирования в рамках метода функционала плотности (DFT/B3LYP/6-31+G(d)). Показано, что основными проявлениями димеризации молекул TGA в растворе является поведение полос валентных колебаний $\nu(\text{OH})$, принадлежащих фрагменту COOH , участвующему в образовании димеров (3320 см^{-1} и 2980 см^{-1}), а также молекул воды, расположенных вблизи TGA и способствующих формированию мостиков Н-связи (3440 см^{-1}). В области деформационных колебаний данных групп подтверждением димеризации являются полосы 1714 см^{-1} с особенностью 1700 см^{-1} , 900 см^{-1} , относящиеся к колебаниям циклического димера, а также сложные составные колебания $\delta(\text{CH}_2)+\delta(\text{COH})+\nu(\text{C-O})$, $\nu(\text{C-O})+\text{tw}(\text{CH}_2)$, $\nu(\text{C-O})+\omega(\text{CH}_2)$ с соответствующими пиками в 1400 см^{-1} , 1187 см^{-1} и 1294 см^{-1} , характерные только для димеров и их определенной симметрии. При увеличении показателя pH, приводящего к депротонированию TGA, интенсивность указанных полос существенно уменьшается. При пассивации молекулами TGA квантовых точек Ag_2S исчезал пик, соответствующий колебаниям S-H группы TGA (2567 см^{-1}). Кроме того, отмечен значительный ($15\text{-}20\text{ см}^{-1}$) высокочастотный сдвиг полосы ассиметричного колебания карбоксилат-аниона TGA (COO^-) (1567 см^{-1}).

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-12-00266

ФОТОСТАБИЛЬНОСТЬ ИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S ¹

Овчинников О.В., Гревцева И.Г., Смирнов М.С., Асланов С.В.,
Перепелица А.С. Кондратенко Т.С.

*Воронежский государственный университет, 394018, Воронеж, Россия,
e-mail: ovchinnikov_o_v@rambler.ru*

Известно, что при интенсивном лазерном облучении изменяется квантовый выход фотолюминесценции полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ). Детальное исследование и понимание механизмов и факторов, вызывающих нестабильность люминесцентных свойств КТ при воздействии возбуждающего лазерного излучения необходимо для эффективного управления оптическими свойствами КТ. В данной работе обсуждаются закономерности деградации ИК люминесценции ансамблей коллоидных КТ Ag_2S , пассивированных тиокарбоновыми кислотами (тиогликолевой (TGA), меркаптоуксусной (2-MPA) кислотой и L-цистеином (L-cis)).

Установлено, что наименьшей фотостабильностью квантового выхода люминесценции обладают коллоидные КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{TGA}$. В этих коллоидных растворах под действием возбуждающего излучения с длинами волн 400 – 600 нм при падающей мощности 60-200 мВт в температурном интервале 77-350 К наблюдается падение интенсивности ИК люминесценции КТ, достигающее 70-80%. Получены экспериментальные доказательства того, что в основе механизма фотодеградации ИК люминесценции коллоидных КТ Ag_2S лежит фотохимический процесс формирования центров безызлучательной рекомбинации, конкурирующих с центрами ИК рекомбинационной люминесценции. Найденная зависимость степени фотодеградации от типа молекул-пассиваторов КТ указывает на их участие в структуре центров рекомбинации и инициируемых фотопроцессов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-12-00266

**СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕДКИХ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ ФТОРУРАЦИЛОВ
В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ¹**

Остахов С.С., Овчинников М.Ю., Масягутова Г.А., Хурсан С.Л.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН

450054, Уфа, пр. Октября, 71

e-mail: chemlum@anrb.ru

В настоящей работе зарегистрированы и идентифицированы спектры флюоресценции (FL) таутомеров 5-фторурацила (FU): 5-фтор-пиримидин-2,4(1*H*,3*H*)-диона (**A**), 5-фтор-2-гидрокси-пиримидин-4(3*H*)-она (**B**) и 5-фтор-4-гидрокси-пиримидин-2(1*H*)-она (**D**), а также соответствующих **A** и **D** таутомеров 1-(тетрагидрофуранил-2)-5-фторурацила и 1-метил-5-фторурацила, **A** и **B** таутомеров 3-метил-5-фторурацила и дикето-таутомера 1,3-диметил-5-фторурацила. Показано, что FL редких таутомеров производных FU осуществляется по механизму акцептирования энергии возбуждения гомоассоциатами урацила с последующим внутримолекулярным переносом протона (ВПП), с образованием пары редких таутомеров и излучательной дезактивацией одного из них. Оценены квантовые выходы FL, которые для редких таутомеров включают в себя вероятность ВПП в гомоассоциате. DFT расчетами в приближении TPSS/6-311+G(d,p) определены относительные энергии таутомеров, ассоциированных форм FU, их спектральные свойства, согласующиеся с наблюдаемой люминесцентной картиной.

¹ Работа выполнена в рамках Государственного задания по теме НИР УФИХ УФИЦ РАН АААА-А17-117011910028-7 (серийный номер 0246-2018-0018).

НОВЫЙ УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ЗАКОН ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ¹

Разумов В.Ф.

Институт проблем химической физики РАН; Московский физико-технический институт; Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова.

e-mail: razumov@icp.ac.ru

Люминесценция является ярким примером тесной взаимосвязи фундаментальных и прикладных исследований. С одной стороны, люминесценция играет большую роль с точки зрения практического применения, а с другой стороны, благодаря исследованиям люминесценции, были не только открыты новые физические явления, но и сам люминесцентный метод стал мощным инструментом изучения структуры и свойств вещества.

В данном докладе, наряду с кратким обзором современного состояния фундаментальных и прикладных исследований в области создания новых люминофоров, в контексте исторической ретроспективы развития науки о люминесценции обсуждается новый универсальный закон фотолюминесценции, в соответствии с которым для любого люминесцирующего тела отношение спектра люминесценции $PL(\lambda_0, \lambda, t)$ в момент времени t при возбуждении на заданной длине волны λ_0 к спектру возбуждения люминесценции $P(\lambda, \lambda_0, t)$ при наблюдении в тот же момент времени t на той же длине волны λ_0 является универсальной функцией, определяемой спектром излучения абсолютно черного тела $P(\lambda, T)$:

$$\frac{PL(\lambda_0, \lambda, t)}{P(\lambda, \lambda_0, t)} = \frac{P(\lambda, T)}{P(\lambda_0, T)} \approx \frac{\lambda_0^4}{\lambda^4} \exp \left[\frac{hc}{k_B T} \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) \right]$$

Это универсальное соотношение основывается на принципе детального равновесия для фотолюминесценции, которое в конечном счете является обобщением фундаментального закона Кирхгоффа применительно к любым материальным телам, в том числе и люминесцирующим.

¹ Работа выполнена по теме гос. задания (№0089-2019-0003) и при финансовой поддержке Российской Федерации (Соглашение № 074-02-2018-286).

СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ КАЛИЕВОАЛЮМОБОРАТНЫХ СТЕКОЛ С ДОБАВКАМИ ОКСИДА ЖЕЛЕЗА ПРИ РАДИАЦИОННЫХ И ТЕРМОРАДИАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Салахитдинов А.Н.^а, Мирзокулов Х.Б.^а, Салахитдинова М.К.^б

^а Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий имени Мухаммада ал-Хоразмий, Самарканд, Узбекистан

^б Самаркандский государственный университет, Самарканд, Узбекистан
e-mail: liverpool_2592@mail.ru

Калиевоалюмоборатные (КАБ) стекла содержащие ионы железа (Fe^{2+} , Fe^{3+}) широко используются в магнитооптике, оптоэлектронике и дозиметрии ионизирующего излучения. Перспективность их применений в различных отраслях науки, техники и производства, в том числе и в области компьютерной технологии навела на мысль модифицировать структуру и свойства КАБ стекол [1-2].

В качестве объекта исследования использовались стекло состава $22.5K_2O \cdot 25Al_2O_3 \cdot 50B_2O_3$ (мол.%)–КАБ50 с добавками Fe_2O_3 от 0,1 до 3 % по массе сверх 100 % основного состава стекла. Производилась термообработка стекла в гамма поле ^{60}Co с мощностью 236 Р/с и без поля. Термообработка проводилась при одинаковых условиях с температурами 150, 200, 250, 300°C. Исходные стекла были получены при $(1430 \pm 5)^\circ C$. Гамма облучение проводили в ИЯФ АН РУз.

Оказалось, что терморadiационные условия создают равномерно распределенные по всему объему стекла ловушки дырок $[BO_4]^{e+}$, $[AlO_4]^{e+}$, в трех координированных боратных и «железных» октоэдрических центров $[Fe^{3+}O_6]^{e-}$. В спектре поглощения эти явления проявляются в том, что наведённая полоса поглощения ($\lambda = 550$ нм) уширяется и также более широкой становится полоса поглощения ($\lambda = 420$ нм) ионов Fe^{3+} .

Список литературы:

1. Ibragimova E.M., Salakhitdinov A.N., Salakhitdinova M.K., et al. // JMMM 2018. V. 459. P. 12.
2. Salakhitdinov A.N., Ibragimova E.M., Salakhitdinova M.K. // Applied Physics A 2018. 124:187.

ПРОЯВЛЕНИЕ ПЕРЕНОСА КОГЕРЕНТНОСТИ В СПЕКТРОСКОПИИ

Салихов К.М.

*Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань,
e-mail: kevsalikhov@mail.ru*

На примере разбавленных растворов парамагнитных частиц будет продемонстрировано, что перенос квантовой когерентности, в этих системах квантовой спиновой когерентности, вызванный бимолекулярными столкновениями, приводит к ряду удивительных эффектов. Происходит сдвиг резонансных частот электронных спинов, резонансные линии в стационарных спектрах ЭПР могут приобрести смешанную форму – сумму лоренцевой линии поглощения и лоренцевой линии дисперсии (типа эффекта Фано в газах или дайсоновской линии спектров ЭПР в металлах), при достаточно частых случайных столкновениях происходит коллапс всего спектра ЭПР в одну узкую линию в центре тяжести спектра.

В интенсивных СВЧ полях спины и СВЧ поле создают коллективные состояния типа поляритонов. В итоге оказывается, что интенсивное поле не только уширяет резонансы, но изменяет частоту резонансов. В интенсивных полях существенно изменяется условие появления коллапса спектра.

Все эти проявления переноса спиновой когерентности являются следствием того, что перенос когерентности при случайных бимолекулярных столкновениях приводит к формированию коллективных мод движения квантовой когерентности.

Список литературы:

1. Salikhov K.M. // Appl. Magn. Reson. 2016. V. 47. P. 1207.
2. Salikhov K.M. // Appl. Magn. Reson. 2018. V. 49. № 12. P. 1417.

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПИРЕНА В МИЦЕЛЛЯРНОМ РАСТВОРЕ

Татаринов Д.А., Сокольникова С.Р., Мыслицкая Н.А.

Калининградский ГТУ, Калининград. e-mail: dannii_039@mail.ru

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) - одни из самых распространенных канцерогенов. Наиболее опасным является бенз(а)пирен (БП), его опасность проявляется даже в малых концентрациях [1]. В проведенном эксперименте применен люминесцентный метод анализа, в качестве объекта исследования был выбран пирен - представитель ПАУ, обладающий схожими люминесцентными свойствами с БП [2]. Результаты

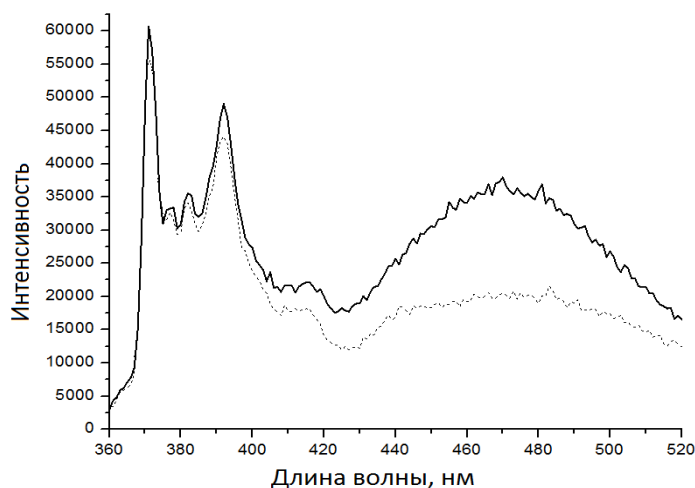


Рис. 1. Спектры люминесценции: 1) пирена в р-ре ДСН - пунктирная линия; 2) пирена в р-ре ДСН при добавлении НЧ - сплошная линия.

исследования представлены на рис. 1. Для экстракции ПАУ использован мицеллярный р-р диоктил сульфосукцината натрия (ДСН) в концентрации 0.1 моль/л, для усиления люминесценции добавлены наночастицы Ag (НЧ) в концентрации $3.75 \cdot 10^{-10}$ моль/л.

Выводы: концентрирование

молекул пирена в мицеллярном растворе с добавлением НЧ в малых концентрациях позволяет увеличить интенсивность люминесценции. Данные результаты можно использовать для проведения экономичных экспресс-анализов растворов на предмет содержания ПАУ.

Список литературы:

1. Горшков, М. В. Экологический мониторинг. Учеб. пособие. Владивосток: Изд-во ТГЭУ, 2010. – 313 с.
2. Кипер Р. А. Свойства веществ: справочник по химии. Хабаровск, 2013. - 1016 с.

ПЕРВЫЙ ТРИПЛЕТ ТЕТРАЦИАНОХИНОДИМЕТАНА (TCNQ)¹

Хатымова Л.З., Кинзябулатов Р.Р., Хатымов Р.В., Хвостенко О.Г.

ИФМК УФИЦ РАН, Россия 450075, Уфа, Проспект Октября, 151

e-mail: lesya0706@ya.

Работа посвящена определению энергии первого триплета (T_1) TCNQ, и была мотивирована тем, что информация о T_1 TCNQ необходима для понимания ряда процессов, в частности, – происходящих в электронных устройствах, содержащих это соединение. Известна энергия T_1 TCNQ ~ 2 эВ для тонкой плёнки, полученная методом потери энергии (energy loss) [1]. Однако, это значение могло отличаться от энергии T_1 изолированной молекулы из-за взаимодействий между электронными оболочками молекул TCNQ, близко расположенных друг к другу в пленке.

T_1 изолированной молекулы TCNQ определен нами при 1.96 эВ в УФ спектрах оптического поглощения, записанных в Br-пропане и в 1,2-ди-Br-этаноле, в 100 мм кювете [2]. Интенсивность полосы T_1 в спектрах обеспечивалась способностью тяжелого атома, в данном случае Br, увеличивать вероятность триплетного перехода и большой длиной оптического пути 100-мм кюветы. Отнесение соответствующей УФ-полосы к T_1 проводилось с учетом того факта, что эта полоса появлялась только в спектрах, записанных в Br-содержащих растворителях, но не в спектрах, записанных в других растворителях, не содержащих тяжелого атома. В работе, помимо T_1 , зарегистрированы и отнесены синглетные полосы TCNQ, а также полоса отрицательного иона TCNQ^- , соответствующая переходу иона из основного в первое электронно-возбужденное состояние. Везде применялись расчеты B3LYP/6-31G.

Список литературы:

1. Ritsko J.J.; Brillson L.J.; Sandman D.J. // Solid State Commun. 1977. V. 24. P. 109.
2. Khvostenko O.G., Kinzyabulatov R.R., Khatymova L.Z., Tseplin E. E. // The Journal of Physical Chemistry A. 2017. V. 121. P. 7349.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-42-020643

АВТОНЕЙТРАЛИЗАЦИОННОЕ ВРЕМЯ ЖИЗНИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНА И ЭЛЕКТРОННОЕ СРОДСТВО МОЛЕКУЛ¹

Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Щукин П.В., Панкратьев Е.Ю.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
г. Уфа, Пр. Октября, 151, rustem@anrb.ru.*

В разных областях науки, техники и медицины макроциклические металлокомплексы представляют особый интерес благодаря уникальным физико-химическим свойствам. Исследованы процессы взаимодействия молекул фталоцианинов меди, железа и кобальта (MPc, M = Cu, Fe и Co) с электронами низких энергий ($E_e = 0 - 15$ эВ). Как и сам фталоцианин (H_2Pc) [1], молекулы MPc в широком интервале E_e 0 – 10 эВ образуют долгоживущие молекулярные отрицательные ионы с чрезвычайно большим временем жизни относительно автоотщепления электрона (τ_a) (рис. 1). Измеренные в идентичных экспериментальных условиях величины τ_a для соединений, различающихся всего одним атомом (металла), отличаются, возрастая в последовательности $CuPc \rightarrow FePc \rightarrow CoPc$ и не коррелируя с индивидуальными

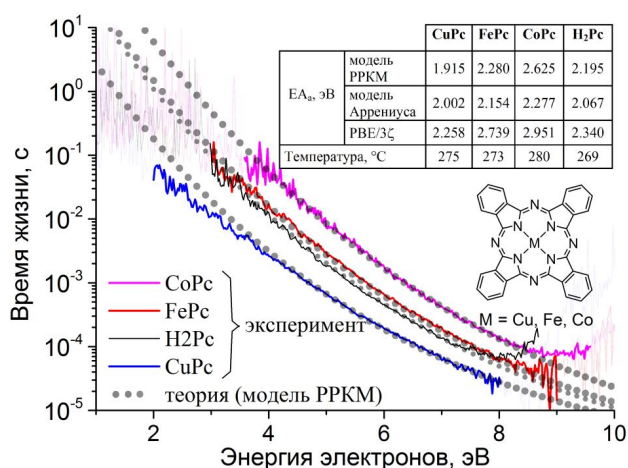


Рис. 1. Время жизни МОИ и электронное сродство молекул MPc.

химическими расчетами в приближении РВЕ/3ζ (см. табл. на рис. 1).

электроноакцепторными свойствами атомов металлов. Это может быть обусловлено только различиями в адиабатическом электронном сродстве (EA_a) молекул как целых. Данное предположение подтверждается оценками величины EA_a молекул с помощью статистических моделей, а также теоретическими квантово-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Республики Башкортостан, грант № 17-42-020643р_а

СМЕШЕНИЕ СОСТОЯНИЙ ОДНОЙ СИММЕТРИИ В ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНАХ¹

Хвостенко О.Г., Хатымова Л.З. Лукин В.Г.

ИФМК УФИЦ РАН, Россия 450075, Уфа, Проспект Октября, 151

e-mail: khv@mail.ru

Долгоживущие отрицательные молекулярные ионы M^- зарегистрированы в тетрацианохинодиметане (TCNQ) при энергии электронов (E_{el}) 0–4 эВ и разделены на две группы различного происхождения [1]: i) при $E_{el} < 1,96$ эВ и ii) при $E_{el} > 1,96$ эВ (3,6 эВ; CEFR₃₇ на рис. 1), где 1,96 эВ – энергия первого триплета (T_1) TCNQ [2]. Ионы первой группы определены как ионы $^4M^-$,

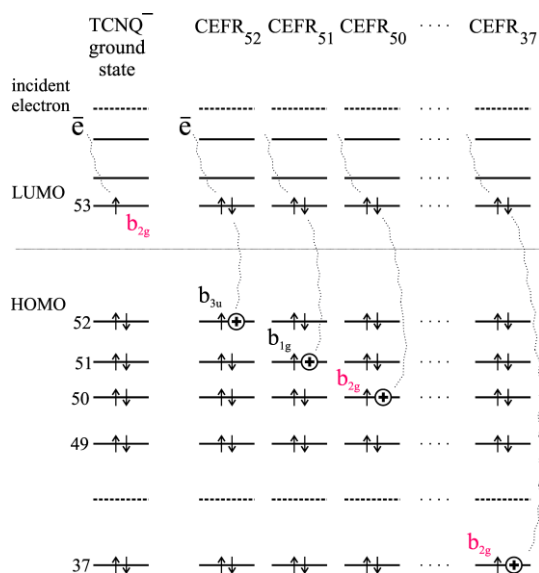


Рис. 1. Серия электронно-возбужденных фешбаховских резонансов (core-excited Feshbach resonances – CEFR) TCNQ.

большое время жизни (τ_A) которых обусловлено спиновым запретом. Большое τ_A ионов при 3,6 эВ, где спиновый запрет не действует ввиду неравенства $3,6 \text{ эВ} > E(T_1)$, отнесено на счет примеси к CEFR₃₇ долгоживущего иона основного состояния, что обусловлено совпадением их симметрий (b_{2g} , рис. 1). Симметрии определены при использовании расчетов B3LYP/6-31G и фотоэлектронной спектроскопии как дополнительного метода.

Список литературы:

1. Khvostenko O.G., Khatymova L.Z., Lukin V.G., Kinzyabulatov R.R., Tuimedov G.M., Tseplin E.E., Tseplina S.N. // Chem. Phys. Lett. 2018. V. 711. P. 81.
2. Khvostenko O.G., Kinzyabulatov R.R., Khatymova L.Z., Tseplin E.E. // J. Phys. Chem. A. 2017. V. 121. P. 7349.

¹ Работа выполнена в рамках темы государственного задания № АААА-А17-117021310237-8

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ КАК МЕХАНИЗМ СПЕЦИФИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ В СПЕКТРАХ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН

г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: tzeplin@mail.ru

В полярных растворителях наблюдаются сдвиги полос поглощения по сравнению с неполярными, обусловленные изменением межмолекулярного взаимодействия между молекулами растворенного вещества и молекулами растворителя. При этом, как правило, более сильное влияние на сдвиги полос в полярном растворителе оказывает образование молекулярных комплексов (специфические эффекты растворителя), и в частности – комплекса с образованием водородных связей [1].

В работе показано, что образование водородного комплекса молекулы с молекулами растворителя приводит к изменению энергий молекулярных орбиталей молекулы и, как следствие, изменяется энергетическое расстояние между занятой молекулярной орбиталью (ЗМО) и вакантной молекулярной орбиталью (ВМО). Это изменение энергетической щели между ЗМО и ВМО приводит к соответствующему изменению энергии электронного перехода в полярном растворителе. Результат получен на примере ряда хинонов, при сравнении их спектров поглощения в полярном растворителе (метаноле) и в неполярном (н-гексане) [2-3]. Для расчета геометрии исследуемых молекул и их молекулярных орбиталей применялся метод теории функционала плотности с гибридным функционалом B3LYP и базисным набором 6-311+G(d, p). Расчет электронных спектров исследуемых молекул был выполнен методом TDDFT B3LYP/6-311+G(d, p).

Список литературы:

1. Reichardt C. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. Weinheim WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003. p.598.
2. Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г. // Опт. и спектр. 2011. Т. 110. № 6. С. 956.
3. Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г. // Опт. и спектр. 2016 – Т. 120. № 2. С. 286.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТА ПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ПРИРОДЫ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ ФТАЛИДА

Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: SN_Tseplina@mail.ru*

Как правило, при переходе от неполярного растворителя к полярному, $\pi\pi^*$ полосы поглощения испытывают гипсохромный сдвиг, а $\pi\pi^*$ полосы – батохромный сдвиг, что дает дополнительный инструмент для интерпретации полос поглощения [1].

В настоящей работе получены спектры оптического поглощения фталида в растворе *n*-гексана и метанола. Впервые зарегистрированы слабоинтенсивные полосы поглощения фталида с максимумами при энергиях 3.51 эВ и 3.96 эВ. На основе анализа сдвига полос в различных растворителях и расчетных данных показано, что эти полосы соответствуют синглет-триплетным переходам в состоянии T_1 и T_2 [2].

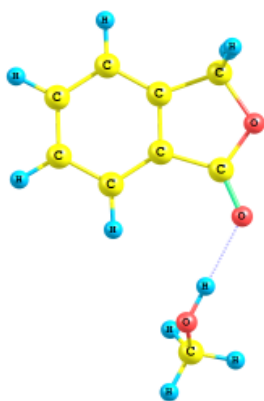


Рис. 1. Структура водородного комплекса молекулы фталида с молекулой метанола

Для расчета электронных спектров использовался метод TDDFT B3LYP/6-311+G(d, p). При этом для моделирования общих эффектов растворителя в работе применялась модель поляризуемого континуума (PCM) в приближении линейного отклика (LR). А для учета специфических взаимодействий была определена ближайшая сольватная оболочка молекул фталида в растворе метанола, состоящая из одной молекулы метанола, образующей водородную связь с атомом кислорода карбонильной группы (**Рис. 1**).

Список литературы:

4. Reichardt C. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. Weinheim WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003. p.598.
5. Tseplin E.E., Tseplina S.N. // Chem. Phys. Lett. 2019. V. 716. P. 142.

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ТРИФЕНИЛМЕТАНА И ТРИФЕНИЛКАРБИНОЛА. МОНОМЕРЫ И ТЕТРАМЕРЫ¹

Шишлов Н. М.^a, Хурсан С.Л.^a, Лазарев В.В.^b

^a Уфимский институт химии УФИЦ РАН, e-mail: shishlov@anrb.ru

^b Уфимский государственный авиационный технический университет

Зарегистрированы ИК и КР спектры поликристаллических трифенилметана (ТФМ) и трифенилкарбинола (ТФК) при комнатной температуре в диапазоне 4000 - 400 см⁻¹. Методом VZLYP/6-311G(d,p) рассчитаны оптимальные структуры и колебательные спектры (КР и ИК) мономеров и тетрамеров ТФМ и ТФК в гармоническом приближении. Тетрамерные кластеры выбраны в качестве модели соответствующих молекулярных кристаллов для оценки влияния межмолекулярного связывания, слабого – в случае ТФМ и сильного, водородного – в случае ТФК, на колебательные спектры твердофазных ТФМ и ТФК. При построении тетрамеров использованы литературные данные по РСА ТФМ и ТФК.

Теоретические ИК спектры мономеров использованы для интерпретации литературных экспериментальных ИК спектров ТФМ и ТФК в газовой фазе. Теоретические ИК и КР спектры тетрамеров позволяют объяснить некоторые особенности соответствующих твердофазных спектров поликристаллических ТФМ и ТФК. На основании визуализации колебаний теоретические моды и соответствующие им экспериментальные полосы колебательных спектров отнесены к валентным и деформационным колебаниям определенных связей в молекулах ТФМ и ТФК. Наиболее интенсивные полосы в спектрах КР ТФМ и ТФК обусловлены колебаниями в монозамещенных бензольных кольцах. Часть теоретических мод и соответствующих им экспериментальных полос в колебательных спектрах отнесена к бензольным модам в нотации Вильсона. Обсуждаются возможные причины неполного соответствия теоретических кластерных и экспериментальных колебательных спектров ТФМ и ТФК.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, проект №16.1969.2017/4.6

ФРАГМЕНТАЦИЯ МОЛЕКУЛ ТИМИДИНА И СТАВУДИНА В РЕАКЦИЯХ РЕЗОНАНСНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Щукин П.В., Муфтахов М.В.

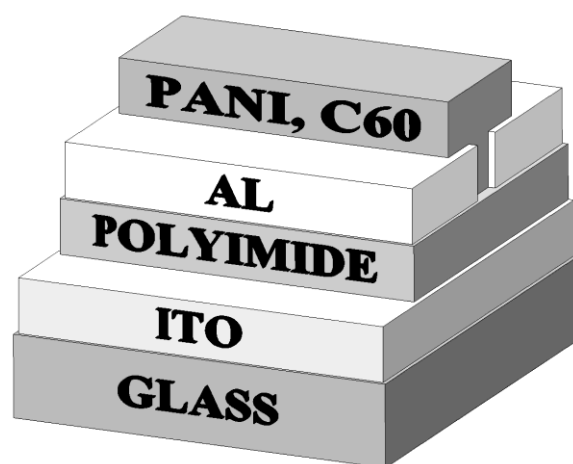
ИФМК УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: pavel@anrb.ru

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов исследованы процессы резонансного присоединения электронов молекулами нуклеозида тимидина и его производного – ставудина, являющегося антиретровирусным препаратом используемым для профилактики и лечения ВИЧ/СПИД. В обоих соединениях реакции диссоциативного захвата электронов происходят в широком диапазоне энергий 0-14 эВ. В тимидине в низкоэнергетической области доминирует процесс дегидрирования молекулярных отрицательных ионов с выходом ионов $[M-H]^-$, тогда как в области 6-7 эВ наиболее эффективно генерируются ионы OCN^- и $[M-R]^-$ (где R – фрагмент сахара). Оцененное сечение диссоциативного захвата электронов для последнего составляет $\sim 0.9 \times 10^{-18} \text{ см}^2$. В целом процессы ионообразования в тимидине во многом схожи с таковыми для ранее исследованного нуклеозида уридина [1]. Масс-спектр отрицательных ионов ставудина, напротив, отличается от спектров исследованных нуклеозидов. Наиболее значительное отличие демонстрирует кривая выхода ионов $[M-R]^-$, что проявляется в виде дополнительного резонансного пика при энергии 0.78 эВ с сечением образования $\sim 3.6 \times 10^{-17} \text{ см}^2$. Предполагается, что этот разительный контраст является следствием отличий в электронной структуре молекул тимидина и ставудина, обусловленных наличием двойной C=C-связи во фрагменте модифицированного углевода ставудина. Предполагается, что интенсивный процесс элиминирования фрагмента модифицированного сахара в ставудине в области энергии ниже 5 эВ может быть ассоциирован с побочными эффектами использования этого препарата при лечении ВИЧ/СПИД.

Список литературы:

1. Муфтахов М.В., Щукин П.В. // Масс-спектрометрия. 2013. №10 (1). С.39.

Свойства перспективных органических материалов



ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА

Галиев А.Ф., Гадиев Р.М., Лачинов А.Н.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450054, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: azat-red@ya.ru*

В пленках полимеров из класса полиарилефталидов существует круг явлений (эффекты переключения), позволяющие создавать электропроводящие нанометровые области (каналы) в диэлектрической матрице [1,2]. Важной задачей остается исследование электрофизических свойств данных полимеров в состоянии с высокой проводимостью. Решение данной задачи позволит выйти

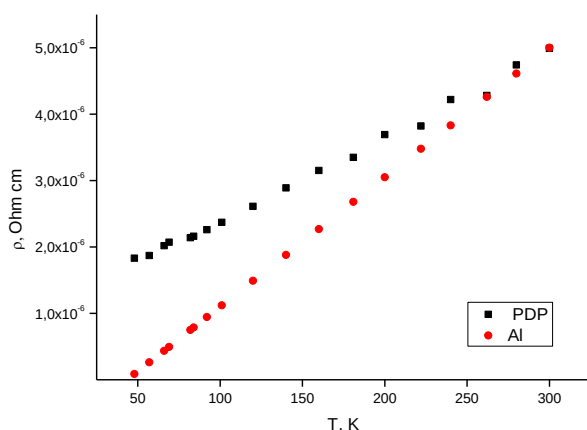


Рис. 1. Зависимость удельного сопротивления полимерной пленки от температуры

на определение механизмов локального изменения проводимости, а в более широком смысле — определить механизмы генерации и переноса заряда в тонких слоях органических диэлектриков. В работе исследована температурная зависимость проводимости пленок полидифениленфталида

четырехзондовым методом. Установлено, что температурная зависимость удельного сопротивления в интервале температур 48 К — 300 К имеет металлический тип (рис. 1.). Подобный тип зависимости может быть обусловлен переносом носителей заряда по узкой наведенной зоне проводимости, расположенной в середине запрещенной зоны полимера.

Список литературы:

1. Скалдин О.А., Жеребов А.Ю., Делев В.В., Лачинов А.Н., Чувывров А.Н., // Письма в ЖЭТФ 1990. Т.51. В.3. С.141.
2. Лачинов А.Н., Жеребов А.Ю., Корнилов В.М. // Письма в ЖЭТФ 1990. Т.52. В.2. С.742.

ЧАШЕОБРАЗНЫЕ ПОЛИЕНЫ: СТРОЕНИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА¹

Горюнков А.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

Пирамидализованные полиены, образованные сочленением шестичленных и пятичленных циклов, характеризуются непланарной π -системой, которая может быть полностью замкнутой (фуллерены) или частично разомкнутой (чашеобразные полиены, англ. *buckybowls*). Варьирование числа и взаимного расположения пятичленных циклов в углеродном скелете позволяют управлять электроноакцепторными и оптическими свойствами полиенов, что делает эти соединения перспективными строительными блоками для органической оптоэлектроники. Новая стратегия направленного синтеза чашеобразных полиенов значительно расширила набор доступных чашеобразных полиенов с заданным строением углеродного каркаса и требуемыми периферическими заместителями [1]. В настоящем сообщении представлены первые результаты структурных и спектральных исследований чашеобразных полиенов индацинопиценового, диинденохризенового и тетраинденопиренового рядов. Методом циклической вольтамперометрии определены потенциалы восстановления и окисления синтезированных полиенов, что в сочетании с данными квантово-химического моделирования на уровне теории функционала плотности позволило выявить влияние мотива расположения пятичленных циклов и периферических заместителей на электронное строение соединений.

Список литературы:

1. Papaianina O., Akhmetov V.A., Goryunkov A.A., Hampel F., Heinemann F., Amsharov K.Yu. // *Angew Chem Int Ed.* 2017. V. 56. P. 4834.

¹ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00337)/

СТРУКТУРА И АТОМНЫЙ СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК РЕСВЕРАТРОЛА НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА¹

Комолов А.С.^а, Лазнева Э.Ф.^а, Пшеничнюк С.А.^б, Асфандиаров Н.Л.^б,
Соболев В.С.^а

^а *Санкт-Петербургский Государственный университет, Университетская наб.
7/9, СПб, 199034, e-mail: a.komolov@spbu.ru*

^б *Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное
подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН,
пр. Октября 151, 450075, г. Уфа*

Атомный состав термически напыленных на поверхность окисленного кремния пленок полифенольного антиоксиданта, ресвератрола, толщиной до 50 нм, исследовали методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS). Приведены результаты по изучению стабильности пленок ресвератрола при обработке поверхности ионами Ag⁺ с энергией 3 кэВ. Отношение концентраций атомов С к О в пленке ресвератрола как до ионной обработки поверхности, так и после нее соответствовало химической формуле молекул. Методом атомно-силовой микроскопии в контактной моде с размером области сканирования порядка 10 мкм x 10 мкм исследованы покрытия ресвератрола на поверхности окисленного кремния и поликристаллического Au. Обнаружено, что пленки ресвератрола создают зернистое и пористое покрытие поверхности подложек. Характерный размер зерен составлял 150-300 нм в плоскости поверхности образца, а характерный перепад высот достигал 30 нм. Обсуждаются возможные методы подготовки поверхностей полупроводниковых и металлических подложек, включая нанесение промежуточного слоя оксида графена.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 18-03-00020 и № 18-03-00179. Использовали оборудование Научного Парка СПбГУ «Физические методы исследования поверхности» и «Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники».

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА
ПОВЕРХНОСТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР
НА ОСНОВЕ СОПРЯЖЕННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ¹**

Комолов А.С.^a, Пшеничнюк С.А.^б, Лазнева Э.Ф.^a, Герасимова Н.Б.^a,
Панина Ю.А.^a

^a *Санкт-Петербургский Государственный университет, Университетская наб.
7/9, СПб, 199034, e-mail: a.komolov@spbu.ru*

^б *Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное
подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН,
пр. Октября 151, 450075 Уфа.*

Представлены результаты по изучению сопряженных органических материалов и ультра-тонких пленок на твердотельных поверхностях. Электронные свойства поверхностных органических слоев можно модифицировать путем изменения материала подложки и путем введения функциональных групп, включая полярные заместители, в молекулы. Проводили исследования плотности незаполненных электронных состояний (DOUS), обнаруженной экспериментально с использованием измерений методом спектроскопии полного тока (TCS) и с использованием теоретических расчетов из первых принципов. Представлены результаты по DOUS и переносу заряда на интерфейсах гексадекафторофталоцианина меди и незамещенного фталоцианина меди и на интерфейсе органических пленок сопряженных олигомеров, молекул на основе фталида и перилена с поверхностью оксида кремния. Обсуждается влияние электроактивных функциональных групп в молекулах на DOUS молекулярных пленок в области энергий π^* и низколежащих σ^* молекулярных орбиталей.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 18-03-00020 и № 18-03-00179. TCS исследования пленок на основе фталидов поддержаны Российским научным фондом, проект № 19-13-00021. Использовали оборудование Научного Парка СПбГУ «Физические методы исследования поверхности».

ВЛИЯНИЕ ДИКАРБОКСИЛЬНОГО И ТЕТРАКАРБОКСИЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ МОЛЕКУЛ НАФТАЛИНА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК ЭТИХ МОЛЕКУЛ ¹

Лазнева Э.Ф.^a, Комолов А.С.^a, Пшеничнюк С.А.^b, Соболев В.С.^a,
Барамыгин А.В.^a

^a *Санкт-Петербургский Государственный университет, Университетская наб.
7/9, СПб, 199034, e-mail: a.komolov@spbu.ru*

^b *Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное
подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН,
пр. Октября 151, 450075 Уфа.*

Ультра-тонкие пленки, полученные из перилен-тетракарбонового диангидрида (PTCDA) и нафталин-тетракарбонового диангидрида (NTCDA) представляют интерес в качестве электрон акцепторных слоев для устройств органической электроники. Представлены результаты исследований электронной структуры зоны проводимости пленок на основе дикарбоновой кислоты нафталина (NDCA), нанесенных на поверхность окисленного Si, с использованием метода спектроскопии полного тока (TCS) в диапазоне энергий электронов от 5 эВ до 20 эВ выше уровня Ферми. На основе экспериментальных и теоретических результатов было установлено положение энергии основных пиков плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) пленки NDCA и проведено сравнение с положением DOUS пика тетракарбоновой кислоты нафталина (NTCDA). Теоретический анализ включал расчет энергий и пространственного распределения молекулярных орбиталей с использованием метода теории функционала плотности на уровне B3LYP/6-31G (d) и последующего метода корректировки вычисленных значений энергии орбиталей, применяемого, для малых сопряженных органических молекул.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 18-03-00020 и № 18-03-00179.

К ВОПРОСУ О МЕХАНИЗМЕ ЭФФЕКТА ОГРОМНОГО МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ

Лачинов А.А.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450054, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: alex_nineteen85@mail.ru*

В устройствах записи и хранения информации одними из перспективных технологий считаются системы на эффекте огромного магнетосопротивления. Такое явление также наблюдается в многослойных структурах на основе полимерных материалов [1]. До сих пор отсутствует общепринятое объяснение данного эффекта. В настоящем докладе приведены результаты изучения огромного магнетосопротивления в структуре металл/полимер/металл. Это явление характеризуется отрицательным коэффициентом МС в полях до 500 мТл. Установлены закономерности изменения подвижности и концентрации носителей заряда, и потенциальных барьеров в магнитном поле. Для объяснения обнаруженного явления привлекается модель, предложенная в работе [2]. Авторы рассматривают эффект магнетосопротивления как изменение подвижности носителей зарядов под действием внешнего магнитного поля. Согласно их расчетам максимальное значение эффекта возможно при максимальной концентрации носителей заряда. Влияние магнитного поля увеличивается из-за спиновой зависимости рекомбинации электронов с ионизированными состояниями донора и подавления сверхтонкого спинового взаимодействия внешним магнитным полем.

Список литературы:

1. Lachinov A.N., Vorob'eva N.V., Lachinov A.A. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques 2016. V. 10. No. 2. p. 292.
2. Kersten S.P., Meskers S.C.J., Bobbert P.A. // Physical Review B V. 86. P. 1-6 [045210].

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ЛОВУШЕЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В СОПОЛИМЕРАХ ФТАЛИДСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИАРИЛЕНЭФИРКЕТОНОВ

Мошелёв А.В.^а, Пономарёв А.Ф.^а, Лачинов А.Н.^б

^а Бирский Филиал БашГУ, г. Бирск, Россия, e-mail: moshelev-alexey@mail.ru

^б Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Полиариленфталиды привлекают большое внимание своими необычными электронными свойствами [1]. В работе [2], установлена перспективность сополиариленэфиркетона (со-ПАЭК) в качестве электроактивных полимеров. Целью настоящей работы явилось исследование параметров локализованных электронных состояний (ЛЭС) в тонких пленках со-ПАЭК в зависимости от их химического строения (Рис.1). В качестве метода исследования был выбран метод термостимулированных токов (ТСТ).

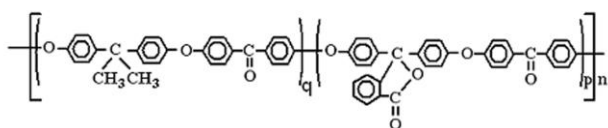


Рис. 1. Структурная формула сополиариленэфиркетона (со-ПАЭК) статистические со-ПАЭК при p/q от 0.99/0.01 до 0.5/0.5 мол.

Установлено, что полимерные образцы независимо от их химического строения имеют схожий вид спектра ТСТ. Оценки энергетических характеристик ЛЭС показали, что энергия активации

ловушек немотонно изменяется при изменении содержания фталидсодержащих фрагментов со-ПАЭК. При этом общий вид зависимости хорошо коррелирует с поведением других электронных характеристик полимерных материалов. В докладе обсуждается физический механизм, обнаруженной взаимосвязи.

Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. // УФН 2006. Т. 176. № 12. С.1249.
2. Салазкин С.Н., Шапошникова В.В., Мачуленко Л.Н., Гилева Н.Г., Крайкин В.А., Лачинов А.Н. // Высокомолек. Соед. А 2008. Т. 50 № 3. С. 399.

ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.

*Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия,
e-mail: ilnur9409@mail.ru.*

Органическая электроника связана с созданием новых электронных устройств: тонкопленочных полевых транзисторов, светодиодов, сенсоров и солнечных элементов на основе органических соединений [1-2]. В данной работе представлены результаты исследований, показывающих возможность создания органических полевых транзисторов на основе тонких пленок полианилинов (PANI) и фуллеренов (C60).

Полевые транзисторы (рис. 1) сформированы на основе стеклянных пластин с покрытием ИТО в виде многослойных пленочных структур. Сначала методом центрифугирования наносилась полиимидная пленка в качестве подзатворного диэлектрика. Сверху были нанесены алюминиевые электроды методом термического распыления в вакуумной камере. В область зазора между электродами шириной в 50 мкм напылялись пленки PANI или C60 методом вакуумного термического распыления из ячейки Кнудсена.

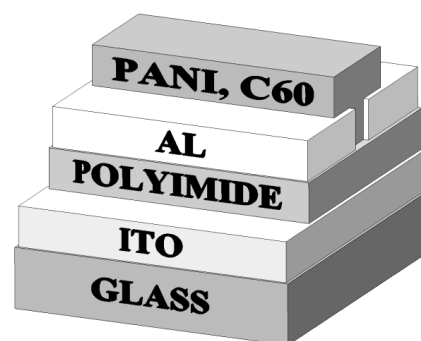


Рис. 1. Структура тонкопленочного полевого транзистора

Измерены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики полученных транзисторов. Проведена оценка подвижностей носителей заряда в тонких пленках PANI и C60.

Список литературы:

1. Salikhov R.B., Biglova Yu.N., Salikhov T.R., Yumaguzin Yu.M. // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. 2015. V. 9. № 6. P. 792.
2. Salikhov T.R., Yumaguzin Yu.M., Salikhov R.B. // International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON 2015. IEEE Proceedings 2015. P. 7147207.

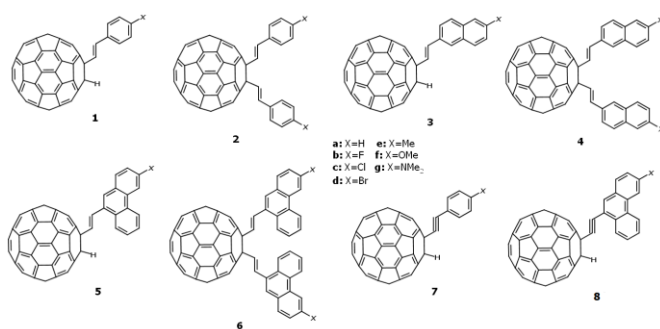
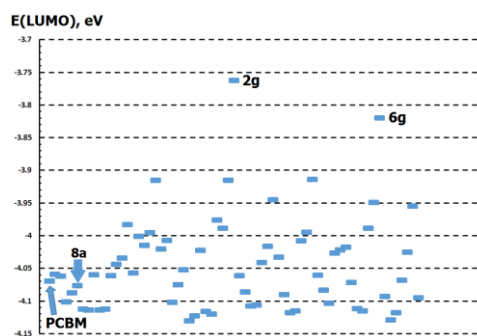
УДК 54.03

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ *n*-ПОЛУПРОВОДНИКИ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ НА ОСНОВЕ СОПРЯЖЕННЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ¹

Окользина А.И., Тулябаев А.Р., Туктаров А.Р., Халилов Л.М.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, пр. Октября, 141,
e-mail: tulebeich@gmail.com.

Органические солнечные батареи, в которых производные фуллеренов используются в качестве акцепторных компонентов, привлекают большой интерес, т.к. на их основе можно получить дешёвые и лёгкие устройства для преобразования солнечного света [1]. Существенной проблемой при разработке таких устройств является достижение их высокой эффективности, одним из путей решения которой является увеличение энергии НВМО производных фуллеренов, максимально приближенной к энергии ВЗМО донорного полимера. В данной работе приводится теоретическая оценка энергии НВМО новых моно- и дизамещенных 1,2-дигидрофуллеренов **1–8** (Рис. 1), несущих ароматические фрагменты и сопряженных с фуллереновым каркасом через двойные или тройные связи. Согласно теоретическим данным (РВЕРВЕ/6-311G(d,p)), наибольшей энергией НВМО из рассмотренного ряда характеризуются соединения **2g** и **6g** (Рис. 2), перспективные в качестве акцепторных компонентов органических солнечных батарей.

Рис. 1. Структуры соединений **1–8**.Рис. 2. Энергия НВМО для **1–8**.

Список литературы:

1. Ganesamoorthy R. et al. // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2017. 161. С. 102.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-03-00092 А и 18-33-20027 мол_а_вед).

ДАТЧИК ВЛАЖНОСТИ НА ОСНОВЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

Салихов Т.Р., Муллағалиев И.Н.

*Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия,
e-mail: timur-salikhov@ya.ru.*

Химические сенсоры применяются в различных областях, таких как медицина, безопасность в быту и на производстве, контроль за загрязнением окружающей среды и многие другие. В датчиках применяют неорганические материалы и органические полимерные сорбенты [1-2]. На базе полимера полианилина конструируют различные типы сенсоров [3].

Структура транзистора представляла собой стеклянные пластины с омическим контактом в виде ИТО, на него методом центрифугирования наносился слой подзатворного диэлектрика - полиимидная плёнка. Сверху были нанесены алюминиевые контакты сток-исток методом термического распыления в вакуумной камере. В области зазора образцов между электродами в 50 мкм наносилась пленка PANI методом термического распыления из ячейки Кнудсена. Получены и проанализированы выходные (рис. 1) и передаточные вольтамперные характеристики. При повышении влажности воздуха увеличивается крутизна характеристик и величина выходного тока.

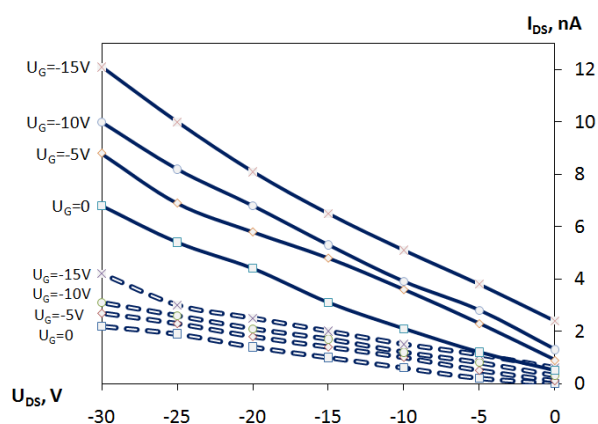


Рис. 1. Семейство выходных характеристик полевого транзистора. Сплошные линии – 65% влажности, пунктирные – 50%.

Список литературы:

1. Salikhov R.B., Lachinov A.N. // Advances in chemical sensors ed. by Wen Wang. –Rijeka. 2012. P. 215-234.
2. Салихов Р.Б., Лачинов А.Н., Рахмеев Р.Г., Гадиев Р.М., Юсупов А.Р., Салазкин С.Н. // Измерительная техника. 2009. № 4. С. 62-64.
3. Salikhov T.R., Yumaguzin Y. M., Salikhov R.B. // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). IEEE Proceedings. 2015. P. 7147207.

СОЛНЕЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Сафаргалин И.Н., Салихов Т.Р.

*Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия,
e-mail: idrissafaralin@gmail.com*

Преобразование солнечной энергии в электрическую – одна из глобальных проблем современности. Для этих целей используются солнечные батареи, в частности, органические фотопреобразователи солнечной энергии (ФСЭ) [1-3].

В данной работе использованы электронодонорные материалы как о-толуидин, высокомолекулярные фуллеренсодержащие соединения акцепторного типа. Сначала была отработана методика получения тонких пленок растворимых форм о-толуидина и фуллеренсодержащих полимеров методом центрифугирования. Следующий этап заключался в формировании пробных образцов органических ФСЭ на стеклянной подложке со слоем ITO на основе донорно-акцепторных полимерных систем, описанных выше. На слой ITO дополнительно наносилась полимерная пленка PEDOT-PSS. В качестве верхнего электрода использовались пленки Al, полученные термическим напылением в вакууме (рис. 1). На завершающей стадии работы были измерены вольтамперные характеристики всех приготовленных образцов ФСЭ.

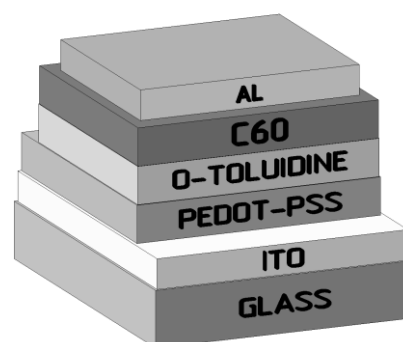


Рис. 1. Структура ФСЭ

Список литературы:

1. Salikhov R.B., Biglova Y.N., Yumaguzin Y.M., Salikhov T.R., Miftakhov M.S., Mustafin A.G. // Technical Physics Letters. 2013. V. 39. № 10. P. 854.
2. Salikhov T.R., Yumaguzin Y. M., Salikhov R.B. // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). IEEE Proceedings. 2015. P. 7147207.
3. Salikhov R.B., Biglova YU.N., Salikhov T.R., Yumaguzin YU.M. // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. 2015. V. 9. № 6. P. 792.

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРИРОВАНИЯ ОЛИГОНУКЛЕОТИДОВ ПРИ ИХ ИММОБИЛИЗАЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ СЛЮДЫ¹

Шарипов Т.И.^а, Гарафутдинов Р.Р.^б, Бахтизин Р.З.^а

^а *Башкирский государственный университет, Уфа, e-mail: sha-t@yandex.ru*

^б *Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа*

Одним из методов, пополнившим арсенал исследователей, работающих в области наук о жизни, стала атомно-силовая микроскопия. С ее помощью получают уникальные изображения, визуализирующие биологические объекты, изучается взаимодействие между собой биомакромолекул, структурирование нуклеиновых кислот, исследуются различные свойства [1, 2].

В докладе будут представлены результаты исследования агрегации олигонуклеотидов на поверхности слюды. Нами была изучена иммобилизация синтетических олигонуклеотидов на поверхности слюды с дальнейшим образованием поверхностных наноструктур. Получены достаточно отчетливые АСМ-изображения олигонуклеотидов, расположенных на поверхности слюды, как в единичном состоянии, так и в виде агрегатов – объединений нескольких единичных молекул. Измерены латеральные размеры и высоты единичных молекул и некоторых агрегатов.

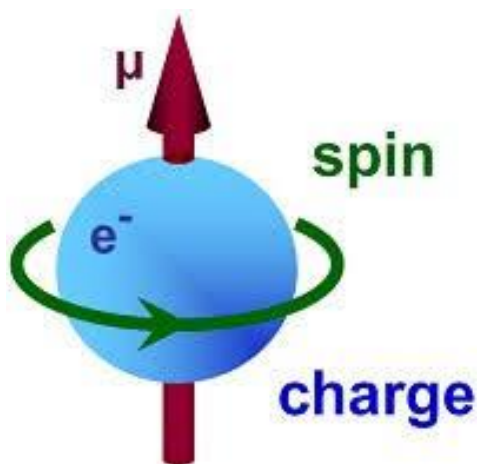
Таким образом, атомно-силовая микроскопия надежно входит в перечень современных методов экспериментальной биологии и открывает новые горизонты в исследовании живых систем.

Список литературы:

1. Sharipov T.I., Bakhtizin R.Z. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2017. 256. 012009.
2. Sharipov T.I., Dolomatov M.Yu., Bakhtizin R.Z. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2018. 443. 012028

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Республики Башкортостан молодым ученым (2019 год), договор №29ГР.

Магнитные явления



ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В (011) - ПЛЕНКЕ ФЕРРИТОВ - ГРАНАТОВ

Акчулпанова Ю.Ф., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р.

БаиГУ, г. Уфа ул. Заки Валиди, 32, e-mail: VakhitovRM@Yahoo.com

В настоящее время возрос интерес к изучению свойств плёнок ферритов-гранатов, в связи с обнаружением в них магнитоэлектрических эффектов [1]. В частности, в работе [2] в этих плёнках наблюдали явление смещения доменных границ (ДГ) под действием электрического поля, характер которого зависел от ориентации развитой поверхности плёнок (флексомангнитоэлектрический эффект). Было высказано предположение, что найденная закономерность в конечном счёте определяется структурой ДГ в изучаемых плёнках, анализ которой практически не проводился.

В данной работе исследуется структура магнитных неоднородностей, возможных в (011)-ориентированной плёнке ферритов-гранатов. В полной энергии такого магнетика были учтены наряду с наведённой одноосной и естественная кубическая анизотропии, причём первый тип анизотропии имеет две компоненты: перпендикулярную и ромбическую. Из анализа уравнений Эйлера-Лагранжа следует, что в области устойчивости магнитной фазы $P_{[011]}$ с $\mathbf{M} \parallel [011]$ возможно существование двух видов 180° ДГ блоховского типа с $\mathbf{M} \parallel [011]$ в доменах, которые различаются ориентацией плоскости стенки относительно кристаллографических осей. Расчет показывает, что на этом участке происходит переориентация 180° ДГ от одной плоскости к другой, сопровождающая трансформацией структуры ДГ из блоховской в квазиблоховскую. Учет неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия в полной энергии (001) - пленки приводит к усилению флексомангнитоэлектрического эффекта в них.

Список литературы:

1. А.П. Пятаков, А.К. Звездин УФН, 2012, т. 182, с. 593.
2. A.S. Logginov and etal Appl.Phys.Lett., 2008, v. 93, p. 182510.

**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ФЕРРИМАГНЕТИКА FeCr_2S_4 ,
ЛЕГИРОВАННОГО МЕДЬЮ И ИНДИЕМ.¹**

Аминов Т.Г., Бушева Е.В., Шабунина Г.Г.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
Россия 119991, Москва, Ленинский проспект д.31,
e-mail: aminov@igic.ras.ru, тел. 8(495) 9543841*

В тioxромите FeCr_2S_4 высокая коэрцитивная сила представляет интерес не только как полезный параметр, но и как фундаментальное свойство уникального магнитного материала. В работе приводятся результаты исследования коэрцитивности твердых растворов $\text{Fe}_x(\text{Cu}_{0,5}\text{In}_{0,5})_{1-x}\text{Cr}_2\text{S}_4$ ($x = 0.6 - 1$) между ферримагнитным полупроводником FeCr_2S_4 ($T_C = 170 \text{ K}$) и антиферромагнитным сегнетоэлектриком $\text{Cu}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{Cr}_2\text{S}_4$ ($T_N = 28 \text{ K}$).

Известно, что основной причиной большой коэрцитивной силы в случае однородного магнетика FeCr_2S_4 является его значительная низкотемпературная магнитная анизотропия. Однако в неоднородных магнетиках – данных твердых растворах на основе FeCr_2S_4 – причина повышенной коэрцитивности образца может быть иной, а именно из-за присутствия немагнитных ионов индия и меди, ответственных за возникновение новых пиннинговых центров для доменных стенок. Экспериментальные данные анализировали с учетом различия между величинами и температурой вариации коэрцитивных сил синтезированных образцов в виде разницы между намагниченностями $\sigma(T)_{ZFC}$ и $\sigma(T)_{FC}$, измеряемыми при охлаждении без поля и в поле. Установлено, что все образцы обнаруживают необратимость между температурными зависимостями намагниченностей ZFC и FC. Среди них наиболее выделяются составы с $x = 0.6$ и 0.7 , в которых коэрцитивная сила формируется как за счет магнетокристаллической анизотропии образца, так и благодаря пиннингу доменных магнитных стенок диамагнитными ионами индия и меди.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 18 - 03-01070.

ВИХРЕПОДОБНЫЕ ОБРАЗОВАНИЯ НА ДЕФЕКТАХ ФЕРРИТ-ГРАНАТОВЫХ ПЛЁНОК

Вахитов Р.М.^а, Билалов И.В.^а, Солонецкий Р.В.², Ахметова А.А.^а

^а БашГУ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: printreplac@mail.ru

^б УГАТУ, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12

Как известно, плёнки ферритов-гранатов обладают рядом уникальных магнитных свойств, которые находят практическое применение в устройствах микро- и наноэлектроники [1]. При наличии в данных плёнках перпендикулярной анизотропии и дефектов типа “потенциальная яма” (создаваемые фотолитографическим способом [2] или сфокусированным лазерным облучением [3]), возможно наблюдение новых интересных явлений, связанных с обнаружением на них магнитных скирмионов-вихреподобных неоднородностей, несущих топологический заряд. Исследования показывают [2,4], что они существуют в широком диапазоне значений материальных параметров и могут быть устойчивыми образованиями даже при “включении” магнитного поля. Однако в пленках ферритов-гранатов существенное влияние на структуру магнитных неоднородностей оказывает наличие в них кубической анизотропии.

В данной работе исследована топология вихреподобных неоднородностей, локализованных на дефекте в (001)-ориентированных пленках ферритов-гранатов скомбинированной анизотропией. Показано, что учет кубической анизотропии в рассматриваемых пленках приводит к трансформации начального вихревого состояния и сказывается на его характеристиках.

Список литературы:

1. Hubert A., Schafer R., Magnetic Domains. Springer, Berlin, Heidelberg, N.Y. 3rd Printing 2009. 707 p.
2. Sapozhnikov M., Vdovichev S.N., Ermolaeva O.L., Gusev N.S., Fraerman A.A., Gusev S.A., Petrov Yu.V. // Appl. Phys. Lett. 2016. V.109. P.042406 (1-5).
3. Davies C.S., Prabhakara K.H. and et al. // Phys. Rev. Lett. 2019, V.122,P. 027202 (1-7)/
4. Вахитов Р.М., Солонецкий Р.В., Ахметова А.А. //ФТТ. 2019. Т.61. № 3. С.453.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ

ФЛЕКСОМАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ В НЕОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ¹

Вахитов Р.М.^а, Гареева З.В.^б, Солонецкий Р.В.^в, Мажитова Ф.А.^а

^а БашГУ, г. Уфа; ^б ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа; ^в УГАТУ, г. Уфа,
e-mail: ya.filuza2012@yandex.ru

В последнее время повышенное внимание вызывают исследования магнитоэлектрических явлений, возникающих в мультиферроиках. Такой интерес обусловлен возможностью управлять трансформацией доменной структуры и её динамическими процессами в них с помощью электрического поля.

В пленках ферритов-гранатов, которые так же относятся к мультиферроикам, было обнаружено смещение доменных границ (ДГ) под действием неоднородного электрического поля [1]. Было высказано предположение, что полученные экспериментальные данные можно объяснить наличием в пленках неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия. В работе [2] было теоретически исследовано влияние электрического поля на структуру и свойства магнитных неоднородностей на основе подхода, предложенного в [1]. В данной работе продолжены эти исследования, но с акцентом на неоднородность электрического поля, действующего на образец. В частности, было найдено новое решение уравнений Эйлера-Лагранжа для рассматриваемых пленок, которое соответствует 0^0 ДГ неелевского типа. Характерной её особенностью является тот факт, что она существует только при действии неоднородного электрического поля. В работе изучены и другие особенности ДГ, возникающих в рассматриваемых магнетиках в неоднородном электрическом поле.

Список литературы:

1. Logginov A.S., Meshkov G.A., et al. // APL. 2008. V. 93. P. 182510.
2. Вахитов Р.М., Гареева З.В., Солонецкий Р.В., Мажитова Ф.А. // ФТТ. 2019. Т. 61. С. 1120.

ЦИКЛОИДАЛЬНЫЙ ПОРЯДОК В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ

Звездин А.К.^a, Гареева З.В.^b

^a *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, ул. Вавилова 38,
e-mail: zvezdin@gmail.com*

^b *ИФМК УФИЦ РАН, Уфа, пр. Октября 151*

Мультиферроики с циклоидной структурой являются интересным объектом для фундаментальных и прикладных исследований [1]. К ним относятся мультиферроики типа BiFeO_3 , ряд редкоземельных ортоферритов, проявляющих магнитоэлектрические свойства в определенном диапазоне температур, а также наноструктуры, реализующиеся в многослойных системах из-за сильного спин – орбитального взаимодействия.

С точки зрения симметрии реализация киральных длинопериодических магнитных структур возможна в нецентросимметричных кристаллах, в группе симметрии которых отсутствует операция пространственной инверсии. В этом случае свободная энергия магнетика включает инвариант Лифшица

$$\Phi_{me} = \gamma \mathbf{P}(\boldsymbol{\mu} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\mu}) - (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla) \cdot \boldsymbol{\mu})$$

где γ - параметр магнитоэлектрического взаимодействия, $\mathbf{P}$ - электрическая поляризация, $\boldsymbol{\mu}$ - магнитный параметр порядка, наличие которого приводит к стабилизации длинопериодических модулированных фаз.

В работе рассмотрен механизм возникновения циклоидального магнитного порядка в мультиферроиках типа BiFeO_3 , проведено сравнения условий, необходимых для реализации спиновых циклоид и геликоид, рассмотрены особенности циклоидного порядка в пленках BiFeO_3 по сравнению с монокристаллами, обсуждается новый тип конических циклоид и фазовые переходы внутри циклоидных фаз.

Список литературы:

1. Spaldin N.A., Ramesh R. // Nature Materials 2019. V. 18. P. 203.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА КАЧЕСТВО НЕФТИ

Каримова Г.И., Ковалева Л.А.

*ФГБОУ ВО Башкирский государственный университет
450074, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, (347) 229-96-43, kafedrapf@rambler.ru
8927-940-60-68 gulshat-karimova-1993@mail.ru*

В Энергетической стратегии России на период до 2030 года заявлено, что актуальной является концепция увеличения количества и качества транспортируемых углеводородов. Качественных улучшений нефти можно достигнуть путем различных видов воздействий: магнитных, электрических, химических, электромагнитных и т.д.[1].

Работа посвящена исследованиям влияния электромагнитной (ЭМ) обработки на реологические свойства нефти. Представлены результаты проведения лабораторных испытаний воздействия электромагнитного излучения на свойства нефти различных сортов. Выполнена попытка анализа факторов, определяющих результаты ЭМ воздействия, время релаксации свойств нефти после обработки.

В результате экспериментальных исследований было выявлено улучшение реологических свойств нефти под влиянием электромагнитного поля. Степень качественных изменений нефти определялась составом подвергаемого воздействию образца, в частности, содержанием парафинов, смол и асфальтенов. С повышением температуры обрабатываемой нефти, эффективность электромагнитной обработки снижалась, так как доминирующее влияние оказывало тепловое воздействие, при котором в веществе происходило хаотичное тепловое движение частиц.

Список литературы:

1. Осташенко Б.А. Изменение реологических свойств нефти// Вестник института геологии Коми научного центра Уральского отделения РАН. 2007. №4. С. 2.

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Каюмов И.Р.

ИФМК УФИЦ РАН, Уфа, e-mail: kayumovir@mail.ru

Быстродействие многих технических устройств определяется скоростью намагничивания и перемангничивания. Процесс перемангничивания можно рассматривать как фазовый переход, происходящий путем образования и роста зародышей, активными центрами которых являются дефекты, как в объеме, так и на поверхности образца. В отсутствие дефектов зародыши новой фазы могут образоваться флуктуационным путем, которые через некоторое время после зарождения преобразуются в домен обратной намагниченности. Этот временной интервал уменьшается с ростом напряженности внешнего поля. Далее этот процесс сопровождается взаимодействием движущихся навстречу друг другу доменных стенок.

Работа посвящена рассмотрению нелинейной динамики двумерных магнитных неоднородностей в магнетиках в магнитном поле. Рассматриваемая в работе ситуация может реализоваться в двух случаях. Во-первых, магнетик, помещенный во внешнее магнитное поле, после воздействия перемангничивающего импульса может находиться в метастабильном состоянии в течение некоторого времени [1]. При этом в образце могут возникать зародыши фазы, соответствующей устойчивому состоянию. Во-вторых, в магнитном поле в образце с доменной структурой в метастабильном состоянии находятся домены с намагниченностью, антипараллельной внешнему магнитному полю.

Список литературы:

1. Шамсутдинов М.А., Ломакина И.Ю., Назаров В.Н., Харисов А.Т., Шамсутдинов Д.М. Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны. М.: Наука. 2009.

ОПТИЧЕСКАЯ ОРИЕНТАЦИЯ СПИНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ¹

Кусраев Ю.Г.

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург,
ул. Политехническая 26, e-mail: kusrayev@orient.ioffe.ru*

В последнее время спиновые явления в полупроводниках и полупроводниковых наноструктурах находятся под пристальным вниманием исследователей. Интерес связан не только с фундаментальной ролью спина частицы в физических процессах, но и с идеей использования дополнительной спиновой степени свободы в различных электронных устройствах, в частности, устройствах спиновой логики. Для реализации этой идеи необходимо разработать эффективные способы генерации и детектирования спина, управления спиновым состоянием. В настоящем докладе речь пойдет об оптической ориентации спинов, как о наиболее эффективном способе решения этих проблем и, в частности, исследования спин зависимых явлений в полупроводниках. Рассмотрены основные спиновые взаимодействия, их роль в различных спин зависимых явлениях. Так, например, при пропускании тока через полупроводник на боковых гранях образца происходит накопление спиновой поляризации (спиновый эффект Холла). В силу ограничения движения носителей и модификации спин орбитального взаимодействия, квантоворазмерные структуры предоставляют дополнительные возможности для управления спинами.

Взаимодействия спинов друг с другом, а также спинов с окружением (кристаллическое и внешние поля) во многом определяют спиновую динамику. Если кристаллическая матрица содержит магнитные ионы (такие соединения называют разбавленными магнитными полупроводниками – РМП), то имеет место s-d и p-d (f) обменные взаимодействия носителей с d- или f-электронами магнитного иона, также влияющими на спиновую динамику. В докладе обсуждаются особенности оптической ориентации спинов в РМП.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного Фонда, проект № 18-12-00352

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК ИТТРИЕВОГО ФЕРРИТА-ГРАНАТА

Серегин С.В., Дорошенко Р.А.

ИФМК УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: srgnsv@mail.ru

Исследованы магнитные свойства керамик иттриевого феррита-граната (ИФГ), полученных спеканием порошков при различных температурах. Исходные порошки синтезированы методом пиролиза полимерно-солевой композиции.

В магнитных полях H до 2 кЭ методом автогенератора определены полевые зависимости радиочастотной магнитной восприимчивости. Магнитная анизотропия H_a получена аппроксимацией поперечной восприимчивости зависимостью $\chi \sim (H_a + H)^{-1}$ в интервале от 1 до 2 кЭ. Особенности закона приближения намагниченности к насыщению определены по изменениям продольной восприимчивости в том же интервале.

Магнитная анизотропия уменьшается с увеличением температуры спекания. Минимальное значение поля анизотропии наблюдается в образце, полученном в результате спекания при температурах 1100⁰С и 1400⁰С в течение трех часов. Увеличение температуры спекания приводит к уменьшению показателя степени в законе приближения к насыщению.

Повышение температуры спекания приводит к уменьшению количества пор и увеличению плотности упаковки кристаллитов, образуется плотная керамика с зеркальной поверхностью на сколе.

Наблюдаемые изменения закона приближения к насыщению рассматриваются как результат перехода от системы изолированных магнитных зерен, вследствие увеличения количество обменных связей между зернами, к системе с трехмерной упаковкой магнитных зерен.

Проведено сравнение с магнитными свойствами ранее исследованных керамик ИФГ, полученных в результате интенсивной пластической деформации.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МАГНЕТИТА В ШИРОКОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБЛАСТИ

Уринов Х.О., Уринов Ж.О., Эшмирзаев М.Р.

Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий имени Мухаммада Ал-Хоразмий. г. Самарканд. Узбекистан
e-mail: u-jamshid@mail.ru

Исследования гальваномагнитных свойств магнитоупорядоченных веществ дают важную информацию об их зонной структуре, взаимосвязи магнитных и электрических свойств. Поскольку эффект магнитосопротивления близок к изотропному, причину указанного явления следует искать в анализе процессов рассеяния носителей тока, не зависящих от ориентации магнитного поля. Одним из механизмов этого явления может быть влияние магнитного порядка на процессы рассеяния. В котором относительно широкая *s*-зона перекрывается с почти заполненной узкой *d*-зоной. Намагниченность при этом определяется как разность концентраций *d*-дырок с противоположными спинами за счет обменного расщепления подзон. Поскольку время релаксации рассеяния *s*-электрона на *d*-электроне обратно пропорционально плотности состояний, то соответственно без учета процессов переброса *s*-электроны с противоположными спинами будут вносить разный вклад в *s*-*d*-рассеяние и, следовательно, в проводимость. Конечное выражение для сопротивления имеет вид

$$P = c \left[\frac{1}{(1+z_0)^{1/3} + \alpha} + \frac{1}{(1-z_0)^{1/3} + \alpha} \right]^{-1}.$$

Здесь *c* — некоторая константа, α — отношение вероятностей *s*-*s*- и *s*-*d*-рассеяния, z_0 — относительная намагниченность.

В заключение стоит отметить, что неограниченный рост магнитосопротивления вблизи абсолютного нуля не имеет физического смысла, так как должно существовать критическое магнитное поле, обеспечивающее полное заполнение одной из подзон и приводящее к насыщению эффекта. Напряженность этого поля зависит от степени обменного расщепления подзон или в конечном итоге от температуры.

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ. СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ТЕХНИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Уринов Х.О., Уринов Ж.О., Эшмирзаев М.Р.

*Самаркандский филиал Ташкентский университет информационных технологий имени Мухаммада Ал-Хоразми. г. Самарканд. Узбекистан
e-mail: u-jamshid@mail.ru*

Изложена теория магнитокалорического эффекта в кубическом, одноосном и поликристаллическом ферромагнетиках с учетом вращения намагниченности. Обсуждены вопросы создания новых холодильных машин, использующих магнитокалорический эффект.

Сделаем оценки изменения температуры рабочего тела за период:

$$M_{1,2} \approx 10^4 \text{ Гс}, \quad \frac{dk_{1,2}}{dT} \approx 10^2 \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot \text{К}}, \quad \frac{dM_{1,2}}{dT} = 10^{-1} \frac{\text{Гс}}{\text{К}}, \quad T \approx 10^2 \text{ К}, \quad \delta T = 10^{-2} \text{ К}.$$

В магнитном поле по порядку величины соответствует магнитокалорическому эффекту, связанному с изменением магнитной части энтропии изотропного образца при намагничивании. Существенной особенностью этой холодильной машины является непрерывное охлаждение рабочего тела.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

- исследован магнитокалорический эффект в магнитоупорядоченных монокристаллах с учетом процессов вращения намагниченности;
- получено выражение для магнитокалорического эффекта в ферромагнитном поликристалле, хорошо описывающее экспериментальные результаты;
- предложен новый принцип работы магнитной холодильной машины, рабочим телом которой является композиционный ферромагнетик с взаимно перпендикулярными осями легкого намагничивания. Охлаждение рабочего тела реализуется при его вращении в синхронно изменяющемся по амплитуде внешнем магнитном поле.

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПИН-ПСЕВДОСПИНОВОЙ СИСТЕМЕ

Шадрин А.В., Панов Ю.Д.

*Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, e-mail: fynjygame@rambler.ru*

Магнитокалорический эффект является интересной областью исследования физики низких температур. В данный момент существует множество различных материалов, в которых наблюдается данный эффект, и они активно используются в охлаждающих установках. С другой стороны, спин-псевдоспиновая система используется для описания высокотемпературной сверхпроводимости в купратах типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [1]. Данная работа рассказывает о взаимосвязи данной системы с рассматриваемым явлением.

Для описания системы купратов вводится спин-псевдоспиновый формализм $S = 1$, которым описывается зарядовый триплет $(0, \pm 1)$ в плоскостях CuO_2 . Гамильтониан системы зависит от псевдоспинового взаимодействия внутри узла и между узлами, а именно от параметров отталкивания зарядов Δ и V , а также от обменного взаимодействия спинов J . Для решения задачи о моделировании системы используется алгоритм CUDA (Compute Unified Device Architecture) для видеокарт NVIDIA, где реализуются состояния решетки в соответствии с алгоритмом Метрополиса в классическом методе Монте-Карло при плавном понижении температуры вплоть до основного состояния. Метод позволяет получать термодинамические характеристики, необходимые для исследования системы.

В данной работе показан магнитокалорический эффект при разных концентрациях немагнитных примесей. Показывается возможность построения холодильной машины в спин-псевдоспиновой системе.

Список литературы:

1. Panov Y.D., Moskvina A.S., Chikov A.A., Avvakumov I.L. // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 2016. V. 29(4) P. 1077.

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ДВУХСЛОЙНОЙ ОБМЕННО-СВЯЗАННОЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПЛЁНКИ

Шульга Н.В., Дорошенко Р.А.

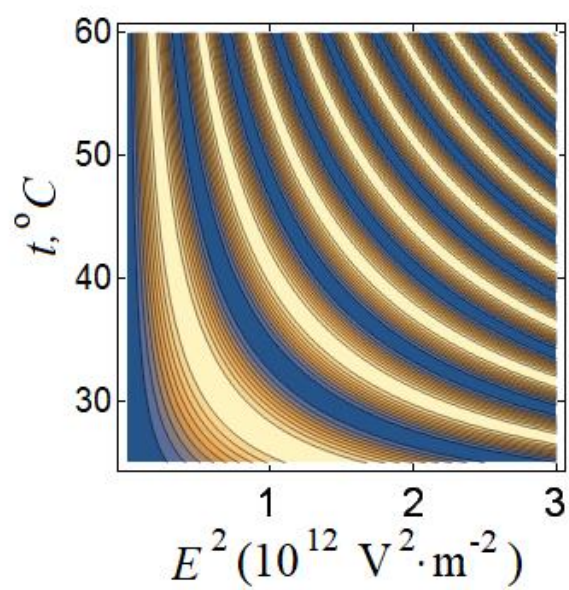
*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: shulga@anrb.ru.*

Проведено численное исследование основного состояния двухслойной ферромагнитной ограниченной плёнки. Слои плёнки обладают одноосной анизотропией “легкая плоскость” и “легкая ось”. Все расчёты были проведены для плёнок ферритов-гранатов. Исследуемые образцы представляли собой прямоугольные наностолбики, их поперечные размеры варьировались от 200 до 500 нм, а толщины от 120 до 300 нм. Расчет основного состояния проводился с использованием пакета трехмерного микромагнитного моделирования OOMMF [1]. Как показали расчёты, в отсутствии внешнего магнитного поля в плёнке наряду с однородным основным состоянием может реализовываться вихревое распределение намагниченности, которое является метастабильным. Для вихревого распределения рассчитана электрическая поляризация. Обнаружено, что компонента вектора поляризации плёнки перпендикулярная плоскости плёнки отлична от нуля. Это объясняется наличием ядра вихря. Исследовано изменение электрической поляризации при перемагничивании плёнки внешним магнитным полем. Показано, что с увеличением поля модуль поляризации возрастает до определённых значений поля, а затем уменьшается до нуля. Обнаружено, что при уменьшении размеров плёнки величина максимума поляризации возрастает.

Список литературы:

1. Donahue M.J., Porter D.G. // OOMMF User's Guide. Version 1.0 NISTIR 6376. National institute of standards and technology. Gaithersburg, MD. 1999.

Физика жидких кристаллов



РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИРЕКТОРА В “ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ” КАПЛЯХ-ПЕРЕТЯЖКАХ НЕМАТИКА В ИЗОТРОПНОМ ОКРУЖЕНИИ¹

Басырова Е.Р., Хазимуллин М.В., Скалдин О.А.

*ИФМК УФИЦ РАН, 450075, Уфа, Проспект Октября, 151,
e-mail: Gareeva_e82@mail.ru*

Перспективы появления новых технологий в фотонике и исследованиях биологических систем вызывают активный интерес к изучению ансамблей жидкокристаллических (ЖК) капель в изотропном окружении. Оптические свойства таких систем определяются пространственным распределением средней молекулярной ориентации ЖК (характеризуемой единичным вектором - директором), зависящим от материальных параметров жидкого кристалла и условий на границах.

В работе теоретически исследуется ориентационная структура цилиндрических жидкокристаллических капель в изотропном окружении между двумя твердыми плоскопараллельными подложками. Пространственное распределение поля директора определяется при помощи численного решения уравнений ориентационного равновесия с учетом анизотропии упругости, поверхностной энергии и смачиваемости на границе с подложками. Для сопоставления результатов расчетов с доступными экспериментальными данными были смоделированы поляризационно-оптические изображения ЖК-капель. Результаты показали, что величина поверхностной энергии и контактный угол на границе капли и твердой подложки существенным образом влияют на оптическую картину, что необходимо учитывать при анализе экспериментальных данных.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №~18-32-00805 мол-а). В исследованиях использовалось оборудование ЦКП "Спектр" ИФМК УФИЦ РАН и РЦКП "Агидель".

ЛИНЕЙНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДЕФЕКТЫ ПРИ ЭЛЕКТРОКОНВЕКЦИИ В ЗАКРУЧЕННЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ⁶

Делев В.А., Крехов А.П., Тимиров Ю.И.

ИФМК УФИЦ РАН, 450075, Уфа, Проспект Октября, 151, delev@anrb.ru

Исследуются линейные фазовые дефекты (ЛФД) в доменных структурах, закрученных нематических жидких кристаллов (НЖК). При $U \geq U_c$ в НЖК образуется одномерная структура доменов, при этом ориентация их осей перпендикулярна директору $\mathbf{n}$ (единичный вектор, характеризующий преимущественную ориентацию молекул в слое НЖК) в середине ЖК-слоя и составляет углы -45° и 45° соответственно с ориентацией директора на верхней

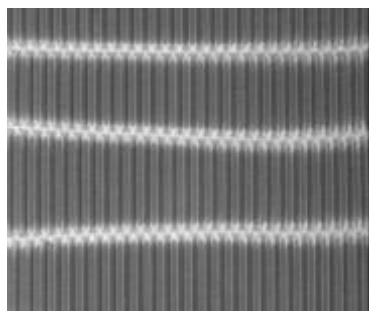
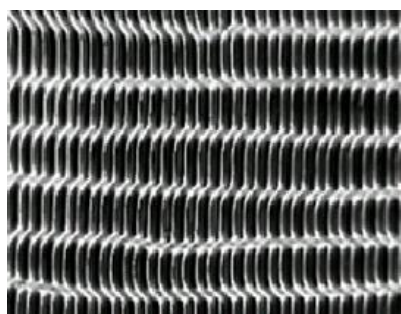


Рис. 1. Линейные фазовые дефекты в доменной структуре НЖК (МББА) при углах закрутки $\Phi_T = 60^\circ$ (сверху) и $\Phi_T = 90^\circ$ (снизу).

и нижней подложках. Показано хорошее соответствие теоретических оценок пороговых характеристик наблюдаемых доменных структур с экспериментальными данными. Доменные структуры при углах закрутки $45^\circ < \Phi_T \leq 90^\circ$ характеризуются наличием упорядоченных ЛФД (рис. 1). При этом домены выше ЛФД смещены относительно доменов ниже ЛФД на половину пространственного периода, т.е. наблюдается изменение фазы пространственной модуляции на π (скачок фазы) [1]. При $U > U_c$ в ЛФД возникают *зиг-заг* осцилляции. Границами между *зиг* и *заг* состояниями являются классические дислокации с топологическими зарядами $S = \pm 1$. Обсуждается

модель для описания динамики каскада дислокаций в наблюдаемых ЛФД.

Список литературы:

1. Delev V.A., Tóth P. and Krekhov A.P. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2000. V. 351. P. 179.
2. Tatsumi S., Sano M., Rossberg A.G. // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. P. 011704-1-8.
3. Делев В.А., Скалдин О.А., Батыршин Э.С и др. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109. С.84.

⁶ Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №18-32-00805 мол-а). В исследованиях использовалось оборудование ЦКП "Спектр" ИФМК УФИЦ РАН и РЦКП "Агидель"

ЭФФЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СМЕСЯХ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Князева Л.И., Макаров Д.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, e-mail: knlola090699@gmail.com, dmakarov@psu.ru*

Предложена континуальная теория, описывающая ориентационную структуру бинарной смеси холестерических жидких кристаллов в магнитном поле. Учитывается конечная энергия сцепления между подсистемами в рамках двухдиректорной модели. В работе проанализировано основное состояние (в отсутствие поля) смеси холестериков для планарного и гомеотропного типов сцепления между ее компонентами. Установлено, что при планарном типе сцепления нетривиальные решения уравнений ориентационного равновесия для основного состояния бинарной смеси существуют только в приближении однодиректорного векторного поля. В этом случае наблюдается спирально закрученная в пространстве структура, значение шага спирали которой совпадает с классическим результатом [1].

Изучено раскручивание спиральной структуры бинарной смеси во внешнем магнитном поле, приложенном ортогонально оси спирали, в предельном случае сильного сцепления. Найдена зависимость шага спирали как функция поля при различных материальных параметрах системы (анизотропий магнитной восприимчивости и констант упругости компонент, объемной доли примесной фазы). Получены фазовые диаграммы переходов смеси из холестерического в нематическое состояние. Показано, что в системе возможны три основных типа зависимости критического поля от объемной доли примесной компоненты. Найдены соотношения между материальными параметрами, определяющие тип этой зависимости.

Список литературы:

1. Беляков В.А., Сонин А.С. // Оптика холестерических жидких кристаллов. М.: Наука. 1982. 360с.

ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ НА ЯЧЕЙКУ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Кондратьев Д.В.^{а,б}, Исмагилова Р.Н.^в

^а ГБНУ «АН РБ»,

^б Башкирский кооперативный институт (филиал) РУК, г. Уфа, ул. Ленина, 26

^в Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
e-mail: denis.kondratyev@bk.ru

Рассматривается теоретическая модель поведения сегнетоэлектрического жидкого кристалла (ЖК), ограниченного двумя полубесконечными пластинами со слабой энергией сцепления на границах. В рассматриваемой модели магнитное поле направлено вдоль слоев образца. Получено выражение для оценки критического значения магнитного поля, для которого возможно появление периодических искажений смектических слоев.

При исследовании проблемы реализован континуальный подход, основанный на получении выражения для энергии искажений Франка в образце сегнетоэлектрика [1].

Ранее в работе [2] исследовалось поведение тонкого слоя образца раскрученного хирального смектического жидкого кристалла в геометрии «bookshelf» в одноконстантном приближении во внешнем постоянном электрическом поле, прикладываемом под разными углами к смектическим слоям образца, с учетом периодических граничных условий. Таким образом, продемонстрирован механизм появления периодических макроструктур в объеме образца сегнетоэлектрика.

Список литературы:

1. Мигранова Д. Н., Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г. // Жидк. крист. и их практич. использ. 2015. Т. 15. № 3. С. 133.
2. Мигранова Д. Н., Кондратьев Д. В., Мигранов Н. Г. // Жидк. крист. и их практич. использ. 2016. Т. 16. № 3. С. 58.

К ПРОБЛЕМЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОСТОЯННОЙ КЕРРА В ГОМЕОТРОПНОЙ ЯЧЕЙКЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Кудрейко А.А., Мигранов Н.Г., Шайхутдинова И.А.

Башкирский государственный медицинский университет,
г. Уфа, ул. Ленина д. 3, e-mail: akudreyko@bashgtmu.ru

Коэффициент светопропускания гомеотропной ячейки сегнетоэлектрического жидкого кристалла (СЖК) можно вычислить по формуле:

$$T = \sin^2 2\Psi \sin^2(\pi K_{\text{Керр}} E^2 d),$$

где Ψ - угол между направлением электрического поля (E) и плоскостью поляризации, $K_{\text{Керр}}$ - постоянная Керра, d – толщина слоя СЖК. Существует задача ослабления температурной зависимости постоянной Керра.

В работе выполнена оценка коэффициента светопропускания для СЖК-смесей от квадрата электрического поля в температурном диапазоне от 25 °С до 60 °С (Рис 1).

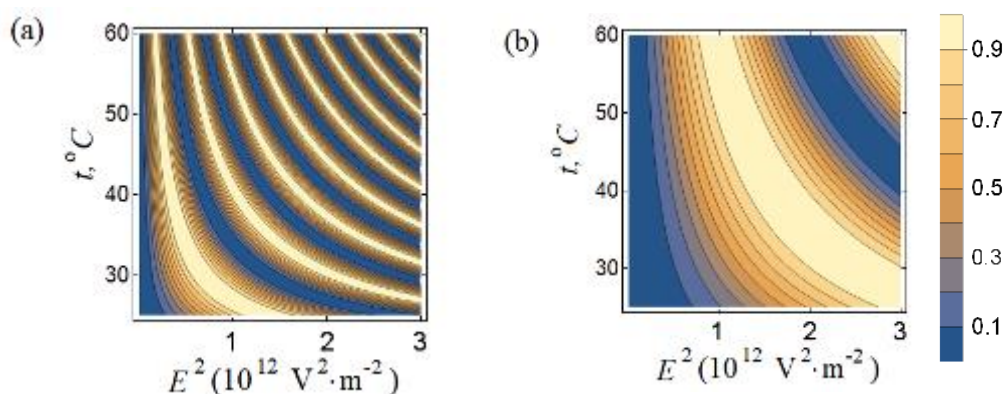


Рис. 1 Зависимости светопропускания от квадрата амплитуды напряжённости электрического поля и температуры для (а) FLC-618 и (б) FLC-587. Параметры: $d=18$ мкм, частота электрического поля – 70 Гц, длина волны – 543 нм.

Список литературы:

1. Pozhidaev E.P., Srivastava A.K., Kiselev A.D., Chigrinov V.G., Vashchenko V.V., Krivoshey A.I., Minchenko M.V., Kwok H.S. // Optics Letters. 2014. 39. 2900-2903.

ФЕРРОХОЛЕСТЕРИК В ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННОМ ВРАЩАЮЩЕМСЯ МАГНИТНОМ ПОЛЕ¹

Макаров Д.В., Караваева А.К.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, e-mail: dmakarov@psu.ru, alina.karavaeva2015@yandex.ru*

Изучена динамика ориентационной структуры феррохолестерического жидкого кристалла (ФХ), помещенного в эллиптически поляризованное вращающееся магнитное поле, перпендикулярное оси спирали. Рассмотрен ФХ с жестким планарным сцеплением между ЖК-матрицей и феррочастицами. Проанализирован нестационарный режим вращения ориентационной структуры ФХ при круговой поляризации приложенного магнитного поля. Аналитически получены решения для временных зависимостей угла поворота директора и шага спирали как функции управляющих параметров системы. Найдено время релаксации, характеризующее время выхода системы на регулярный режим.

Получено аналитическое решение уравнения динамики ориентационной структуры ФХ в слабом магнитном поле. Найдена временная зависимость шага спирали от управляющих параметров системы. Анализ формулы для шага спирали показал, что временная зависимость шага спирали ФХ носит осциллирующий характер. Найдено аналитически среднее значение шага спирали ФХ за период поворота поля. Построены и проанализированы зависимости шага спирали ФХ для различных значений управляющих параметров системы. Установлено, что среднее значение шага спирали с ростом параметра эллиптичности монотонно увеличивается при всех значениях частот, достигая максимального значения при круговой поляризации поля. При высоких частотах среднее значение шага слабо зависит от параметра эллиптичности. С увеличением скорости вращения магнитного поля среднее значение шага монотонно уменьшается.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, проект № 3.5977.2017/8.9.

КОНКУРИРУЮЩЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ СДВИГОВОГО ТЕЧЕНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ХИРАЛЬНУЮ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СУСПЕНЗИЮ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ¹

Новиков А.А., Макаров Д.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, e-mail: novikov21s@yandex.ru, dmakarov@psu.ru*

Феррохолестерик (ФХ) представляет собой жидкокристаллическую суспензию ферромагнитных наночастиц на основе холестерика. Сочетая в себе свойства обычных жидкостей (текучесть) и кристаллов (анизотропия), ФХ обладает высокой чувствительностью к внешним полям. В работе изучается процесс раскручивания спирали ФХ, вызванный совместным влиянием магнитного поля и сдвигового потока. Оба воздействия способны индуцировать переход феррохолестерик-ферронематик (ФХ-ФН), но различие между ориентацией магнитного поля и направлением ориентирующего действия потока приводит к конкуренции между магнитными и гидродинамическими механизмами влияния на ФХ структуру.

В рамках континуальной теории исследованы эффекты мягкого сцепления в ориентационных переходах между спиральной ФХ и раскрученной ФН фазами. Построены фазовые диаграммы ориентационных состояний спиральной структуры мягкого ФХ. Получена зависимость шага спирали ФХ от приложенного магнитного поля и градиента скорости сдвигового течения. Построена средняя намагниченность вдоль направления приложенного магнитного поля как функция его напряженности и градиента сдвигового течения. Исследовано раскручивание спирали ФХ сдвиговым течением. Показано, что сдвиговый поток способен привести к намагничиванию ФХ в отсутствие магнитного поля.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-02-00231

**МАГНИТООРИЕНТАЦИОННЫЙ ОТКЛИК БИНАРНОЙ СМЕСИ
УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА
С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ¹**

Петров Д.А., Скоков П.К.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, Россия, e-mail: petrovda@bk.ru*

В рамках континуальной теории исследованы индуцированные магнитным полем ориентационные переходы в бинарной смеси углеродных нанотрубок (УНТ) и нематического жидкого кристалла (ЖК). Исследовался случай мягкого планарного сцепления между молекулами ЖК и поверхностью УНТ. Предполагалось, что ЖК обладает отрицательной анизотропией диамагнитной восприимчивости, длинные оси молекул которого ориентируются ортогонально приложенному магнитному полю. Поскольку углеродные нанотрубки обладают положительной анизотропией диамагнитной восприимчивости, то они ориентируются параллельно приложенному полю, вызывая конкуренцию с упорядочением ЖК-матрицы. Показано, что в результате воздействия магнитного поля в ЖК-композите происходят два ориентационных перехода. Первый – это переход из начальной однородной планарной фазы в неоднородное состояние, где директор УНТ стремится ориентироваться в направлении внешнего поля, а директор ЖК – ортогонально ему. С ростом магнитного поля происходит следующий переход из неоднородного состояния в однородную гомеотропную фазу, где директор ЖК параллелен границам слоя (первоначальная ориентация), а директор УНТ ориентирован вдоль магнитного поля. Получены аналитические выражения для пороговых полей переходов между соответствующими ориентационными фазами как функции материальных параметров композита. Показано, что в зависимости от величины сегрегационных эффектов, эти переходы могут происходить по типу фазового перехода как первого, так и второго рода.

¹ Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00231.

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СУСПЕНЗИЯ ДИАМАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Сокольчик Д.П., Макаров Д.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, e-mail: dsokolchik@rambler.ru, dmakarov@psu.ru*

В работе теоретически исследовано поведение ориентационной структуры неограниченного образца хиральной жидкокристаллической (ХЖК) суспензии [1] диамагнитных частиц во внешнем магнитном поле, которое направлено ортогонально оси ее спиральной структуры. Сцепление между ХЖК-матрицей и примесными диамагнитными частицами предполагается конечным и гомеотропным, что приводит к конкуренции между двумя диамагнитными механизмами влияния поля на систему. В рамках континуальной теории при помощи минимизации функционала полной свободной энергии получена система уравнений ориентационного равновесия ХЖК-суспензии. Проанализировано уравнение связи для углов ориентации директоров ХЖК и диамагнитных частиц. Обнаружено два типа взаимных ориентационных состояний директоров в зависимости от отношения энергии сцепления между ними и напряженности приложенного поля. Получена система интегральных уравнений для пороговых полей перехода ХЖК-суспензии в раскрученную фазу. Исследовано поведение ЖК-суспензии в этой фазе при различных значениях напряженности магнитного поля, отношения анизотропий диамагнитных восприимчивостей и энергии сцепления между ХЖК-матрицей и внедренными в нее диамагнитными наночастицами. Выявлено критическое значение параметра диамагнитной анизотропии. Исследовано поведение углов ориентации директоров ХЖК и диамагнитных частиц от напряженности магнитного поля при различных значениях параметра анизотропии.

Список литературы:

1. Yadav S.P., Singh S. // Progress in Material Science. 2016. Т. 80. С. 38.

ЭЛЕКТРООПТИКА "КАПЕЛЬНЫХ" ДОМЕННЫХ СТРУКТУР В НЕМАТОХОЛЕСТЕРИКАХ¹

Тимиров Ю.И., Хазимуллин М.В., Скалдин О.А.

ИФМК УФИЦ РАН, Уфа, Россия, e-mail: timirov@anrb.ru.

Жидкие кристаллы (ЖК) являются уникальной системой среди многочисленных типов периодических диэлектрических материалов - метаматериалов, применяемых в фотонике. В ЖК возможно формирование различных периодических структур, которые обладают необычными оптическими свойствами при воздействии электрических и магнитных полей. Одним из типов ЖК, имеющих большой потенциал для использования в новых фотонных устройствах, являются холестерические жидкие кристаллы (ХЖК), обладающие хиральностью и высокой чувствительностью к внешним полям.

В данной работе экспериментально исследуется плоскопараллельный слой гомеотропо-ориентированного нематического ЖК МБА, допированного небольшим количеством ХЖК (холестерилхлорида). Было показано, что при увеличении толщины в однородном гомеотропном слое формируется гексагонально-упакованная периодическая система "капельных" доменов. Исходный размер доменов определяется соотношением между толщиной слоя и шагом закрутки нематохолестерической смеси. Также показано, что размером и формой доменов можно управлять при помощи переменного электрического поля. Получена зависимость размера капель от приложенного напряжения частотой 1 кГц. Результаты работы демонстрируют возможность формирования и управления свойствами системы периодических "капельных" доменов при изменении толщины слоя ЖК и в электрическом поле.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-32-00805 мол-а). В исследованиях использовалось оборудование ЦКП "Спектр" ИФМК УФИЦ РАН и РЦКП "Агидель".

ВЛИЯНИЕ ФЛЕКСОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СЛОЕ ХОЛЕСТЕРИКА¹

Уткин М.А., Макаров Д.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, e-mail: utkinmaksim@gmail.com, dmakarov@psu.ru*

В рамках континуальной теории изучены ориентационные переходы в слое холестерического жидкого кристалла (ХЖК) с конечным планарным сцеплением директора на границах при учете флексоэлектрического эффекта. Внешнее однородное электрическое поле прикладывается вдоль оси спирали ХЖК, ориентированной по нормали к поверхности. Рассмотрен случай положительной анизотропии диэлектрической проницаемости ХЖК. Исходное состояние ХЖК в отсутствие внешних полей характеризуется произвольным числом полувитков спирали внутри слоя и возможным наличием первоначальных деформаций ориентационной структуры (сжатая или растянутая спираль), обусловленных произвольностью толщины ХЖК ячейки. Получена система алгебраических уравнений для порогового поля перехода ХЖК из планарной фазы в коническую (конфокальную). Показано, что, как и в отсутствие флексоэлектрического эффекта [1], увеличение толщины слоя индуцирует скачкообразное изменение числа полувитков спирали ХЖК в слое. Это приводит к «ступенчатой» зависимости поля перехода из планарной фазы в коническую при изменении толщины слоя. Выявлено, что с увеличением флексоэлектрического параметра, величина напряженности электрического поля, при котором происходит данный переход, уменьшается. Получена система алгебраических уравнений для перехода ХЖК из конической в гомеотропную нематическую фазу. Показано, что поле перехода в этом случае непрерывным образом меняется от толщины слоя.

Список литературы:

1. Zakhlevnykh A.N., Shavkunov V.S. // Phys. Rev. E. 2016. V. 94. № 4. 042708.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, проект № 3.5977.2017/8.9.

ПЕРИОДИЧЕСКОЕ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Шапошников Н.С.

*ФГБОУ ВО «Бакирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы», г. Уфа, ул. Октябрьской революции, 3а,
e-mail: nikita.s.shaposhnikov@bk.ru*

В работе рассматривается возможность образования устойчивых периодических деформаций в нематических жидких кристаллах (НЖК) во внешнем электрическом поле, приложенном под разными углами к образцу с учетом граничных условий специального вида. При исследовании проблемы реализован континуальный подход, основанный на получении выражения для энергии искажений Франка в образце нематика [1].

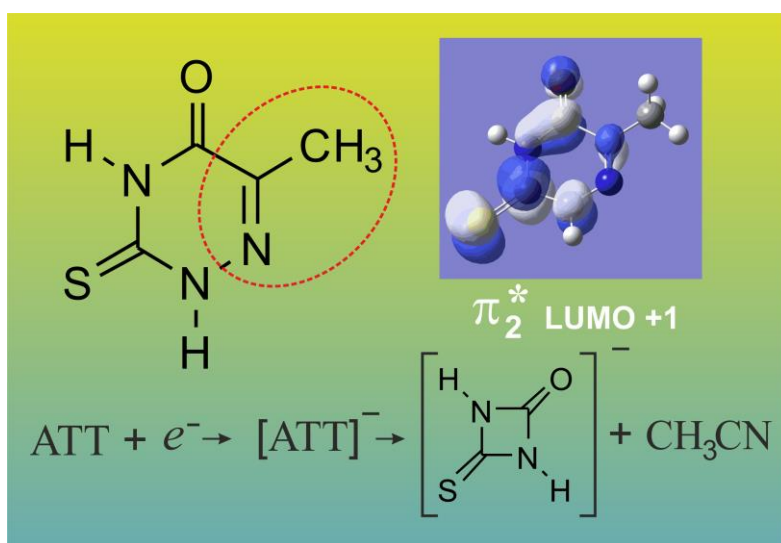
Ранее в [2] исследовалось распределение молекул НЖК ограниченного с одной стороны структурированной подложкой. Сделаны выводы о влиянии количества полос на периоде на энергию искажений Франка внутри нематика: при достаточно большом количестве полос происходило перенасыщение и начальное распределение директора на подложке, ограничивающей НЖК, уже не влияло на его распределение внутри объема. Вычисления выполнены для сильного и слабого сцепления.

В предлагаемом исследовании в отсутствии азимутальной энергии связи продемонстрирована зависимость периодических искажений от приложенного электрического поля: при увеличении напряженности электрического поля возрастает величина волнового вектора.

Список литературы:

1. Кондратьев Д.В. // Электронный журнал «Исследовано в России». 2008. 079. С. 853.
2. Мигранов Н.Г., Кондратьев Д.В. // Вестник Челябинского государственного университета. «Физика». 2010. Вып. 7. №12 (193). С.41.

Электрон-стимулированные процессы в молекулярных системах



СТИМУЛИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРОНОМ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ

$\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ ПРИ СОНОЛИЗЕ РАСТВОРОВ $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$

Абдрахманов А.М., Гареев Б.М., Якшембетова Л.Р., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Пр. Октября, 141,
e-mail: ink@anrb.ru*

Гидратированный электрон (e_{aq}) – важнейший продукт радиолиза воды, в числе продуктов сонолиза H_2O до сих пор не был обнаружен. Считалось, что при сонолизе e_{aq} образуется лишь в щелочных растворах, благодаря конвертации атома Н: $\text{H} + \text{OH}^- \rightarrow e_{\text{aq}} + \text{H}_2\text{O}$. Участие e_{aq} может изменить направления и выходы сонохимических реакций и стимулировать генерацию света в них. Нами обнаружена такая стимуляция сонохемилюминесценции (СХЛ) $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ при сонолизе водных растворов $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ и $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$. Выявленные различия влияния акцепторов e_{aq} на интенсивность многопузырьковой и однопузырьковой СХЛ (МПСХЛ и ОПСХЛ) в нейтральных и щелочных растворах $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ указывают на возможность прямой генерации e_{aq} при однопузырьковом сонолизе в процессе: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + e \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{H}_3\text{O}^+ + e_{\text{aq}} + \text{OH}^-$. Эта гипотеза подтвердилась при анализе возможных хемилюминесцентных реакций, реализуемых при много- и однопузырьковом сонолизе в кислых водных растворах $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$. Однопузырьковая СХЛ обусловлена реакцией $e_{\text{aq}} + \text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+} \rightarrow * \text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$. Ее интенсивность максимальна в начале сонолиза и монотонно снижается по мере восстановления $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$. Интенсивность СХЛ в начале многопузырькового сонолиза ниже порога регистрации в связи с отсутствием генерации e_{aq} . Свечение здесь появляется позже в результате последовательного восстановления $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$ атомом Н и протекания реакции $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+} + \text{Ru}(\text{bpy})_3^+ \rightarrow * \text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+} + \text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$. Интенсивность МПСХЛ не зависит от концентрации иона H^+ , тогда как ОПСХЛ этим ионом тушится в результате акцептирования гидратированного электрона по реакции $e_{\text{aq}} + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}$.

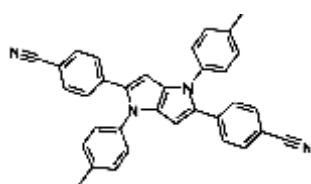
¹ Работа выполнена в рамках государственного задания (№ АААА-А19-119022290005-5).

НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ ПЕРЕНОСОМ ЭЛЕКТРОНА В ВОЗБУЖДЕННЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛАХ¹

Иванов А.И., Назаров А.Е., Малыхин Р.Е., Ткачёв В.Г.

Волгоградский государственный университет, Проспект университетский,
100, г. Волгоград, e-mail: Anatoly.Ivanov@volsu.ru

Представлена теория нарушения симметрии электронного распределения в возбужденных молекулах вида $A_L - D - A_R$, где D – донор электронов, а A_L и A_R – идентичные акцепторы (см. пример на рис.) [1].



Показано, что нарушение симметрии носит пороговый характер и возможно только, когда недиагональный матричный элемент электронного взаимодействия становится меньше определенного значения, которое зависит от энергии сольватации и энергии кулоновского отталкивания между зарядами, расположенными на A_L и A_R . Теория объясняет зависимость степени нарушения симметрии от полярности растворителя.

Во второй части доклада обсуждается теория влияния нарушения симметрии на колебательные спектры квадрупольных молекул [2]. Подход основан на разложении электронно-колебательного взаимодействия в ряд по степеням смещений колебательных мод и параметра асимметрии. Это позволяет установить связь интенсивностей и частот максимумов полос поглощения симметричных колебаний со степенью нарушения симметрии. Теория объясняет закономерности влияния нарушения симметрии на интенсивность ИК полос и их расщепление, наблюдаемое методами ИК спектроскопии с высоким временным разрешением. Представлены результаты фитинга ИК спектров молекулы, изображенной на рисунке, для серии растворителей.

Список литературы:

1. Ivanov A.I., Dereka B., Vauthey E. // J. Chem. Phys. 2017. V. 146. P. 164306.
2. Ivanov A.I. // J. Phys. Chem. C 2018. V. 122. P. 29165.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект № 16-13-10122

О ВОЗМОЖНОЙ СВЯЗИ МЕЖДУ ДИССОЦИАТИВНЫМ ЗАХВАТОМ ЭЛЕКТРОНА И БИОЛОГИЧЕСКИМ ДЕЙСТВИЕМ КСЕНОБИОТИКОВ¹

Пшеничнюк С.А.^а, Моделли А.^б, Асфандиаров Н.Л.^а, Рахмеев Р.Г.^а,
Нафикова Е.П.^а, Комолов А.С.^в, Елькин Ю.Н.^г

^а ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, e-mail: sapsh@anrb.ru

^б Болонский университет, Болонья (Италия)

^в Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

^г ТИБОХ ДВО РАН, Владивосток

На основе идей, сформулированных в работах [1-3], обсуждается связь электрон-акцепторных свойств, в частности диссоциативного захвата электронов (ДЗЭ), с биологическими эффектами ксенобиотиков. В качестве вероятных клеточных компонентов, в которых возможен захват электронов молекулами ксенобиотиков, рассматриваются митохондрии и ферменты цитохрома P450. Предполагается, что образованные в клеточной среде короткоживущие отрицательные ионы распадаются аналогично тому, как это наблюдается в газовой фазе методом спектроскопии ДЗЭ. Электрохимические исследования [4,5] свидетельствуют о том, что восстановительные процессы в растворах могут приводить к диссоциации анионов, несмотря на возможность диссипации их избыточной энергии в конденсированном состоянии. Сделаны заключения о возможной связи между ДЗЭ и биохимическими процессами.

Список литературы:

1. Szent-Györgyi A. // Bioenergetics, Academic Press, 1957.
2. Szent-Györgyi A. // Bioelectronics. A Study in Cellular Regulations, Defense, and Cancer, Academic Press, 1968.
3. Lovelock, J.E. // Nature. 1961. V. 189. P. 729.
4. Rotko G., Romańczyk P.P., Andryianau G., Kurek S.S. // Electrochem. Commun. 2014. V.43. P. 117.
5. Brett A.M.O., Ghica M.E. // Electroanalysis. 2003. V. 15. P. 1745.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №18-03-00179.

**СТИМУЛИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРОНОМ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ
П-ТЕРФЕНИЛА ПРИ СОНОТРИБОЛИЗЕ СУСПЕНЗИЙ $Tb_2(SO_4)_3$
В АРОМАТИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ¹**

Тухбатуллин А.А., Бурангулова Н.Ф., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа РАН, Россия, г. Уфа, пр. Октября, 141,
e-mail: adis0501@mail.ru*

В работе [1] при ультразвуковой обработке суспензий (сонотриболизе) сульфата тербия в ароматических углеводородах (C_6H_6 , C_7H_8 , C_8H_{10}) обнаружена люминесценция (сонотриболюминесценция, СТЛ) этих молекул при 280-290 нм. Для выяснения детального механизма возбуждения аренов при сонотриболизе изучена люминесценция при разных способах ее возбуждения в присутствии в растворах п-терфенила (сцинтилляционный активатор).

Зарегистрирована интенсивная люминесценция п-терфенила с максимумом при 350 нм во время ультразвуковой обработке суспензий сульфата тербия в растворах ароматических углеводородов. Показано, что эффект активации свечения п-терфенилом зависит от способа возбуждения. Так, отношение интенсивности свечения п-терфенила к интенсивности свечения молекул ароматического углеводорода в его отсутствие убывает в ряду: СТЛ > возбуждение X-ray > возбуждение α -частицами. На основании известных фактов убывания эффективности сцинтилляционной активации с увеличением энергии возбуждающих заряженных частиц сделан следующий вывод. Ультразвук и возникающая кавитация способствуют сильному ускорению кристаллов в суспензиях с последующей их деструкцией при столкновениях, сопровождаемых электризацией, разрядами и генерацией низкоэнергетических электронов (несколько эВ). Инжекция этих электронов в объем жидкости ведет к ее радиолюминесценции.

Список литературы:

1. Tukhbatullin A.A., et al. // Ultrasonic. Sonochem., 2019. V. 50. P. 251.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Республики Башкортостан в рамках научного проекта № 17-42-020200

Явления на поверхности, границах раздела и в пленках

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ КОМПОЗИТА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PBS И PCBM¹

Александров А.Е., Тамеев А.Р.

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина.

Россия, 119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

e-mail: alexeyalex93@mail.com

Квантовые точки (КТ) являются перспективным материалом для разработки оптоэлектронных устройств, в частности, солнечных элементов. Эффективность работы таких устройств определяется фотогенерацией и транспортом носителей заряда, которые сильно зависят от энергетического беспорядка в твердом слое КТ, обусловленного разбросом размера и энергии электронных уровней КТ. В данной работе мы изучили оптические характеристики слоев КТ такие, как поглощение, люминесценция, спектры люминесценции с временным разрешением, и электропроводность твердых слоев КТ. Слои были приготовлены из КТ PbS различного размера, а также сформированы с градиентом размера КТ по толщине слоя. Три типа наночастиц сульфида свинца PbS имели средний размер 2,9 нм, 4,1 нм и 5,1 нм. Средний размер и разброс размера КТ для каждого типа определяли исходя из данных просвечивающей электронной микроскопии. На основании измерений фотопроводимости и фотовольтаического эффекта в диодных структурах из слоев КТ было исследовано влияние энергетического беспорядка на зарядо-транспортные свойства КТ.

Таким образом, исследование тонких слоев КТ и фотовольтаических характеристик устройств показали, что снижение структурного беспорядка в слоях КТ является продуктивным способом повышения эффективности таких фотоэлектрических устройств.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований грант №. 16-29-09623.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ДВУХ ПЛЕНОК ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Алтыншина Г.Р., Лачинов А.Н.

ИФМК УФИЦ РАН, 450075 Уфа, Россия, e-mail: guzel_altynshina7@mail.ru

Ранее было обнаружено, что граница раздела некоторых полимерных диэлектриков обладает высокой электропроводностью и аномально высокой подвижностью носителей заряда [1]. В настоящее время это явление активно исследуется [2] в основном на полимерах класса полиарилефталидов (ПАФ) [3]. Используя общепринятую модель поляризационной катастрофы, объясняющей аномальные свойства границы, мы реализовали это явление на примере полиметилметакрилата (ПММА). Основанием для такого выбора явилось то, что структуре ПММА имеются боковые группы с заметным дипольным моментом. Образцы представляли собой многослойную структуру, содержащую два слоя полимера и встроенные в границу раздела медные электроды. Для моделирования дипольных эффектов использовали допирование ПММА 3,3-дифенилфталид-4',4"-дикарбоновой кислотой (ДДК). Исследование проводили методом вольт-амперных характеристик. Обнаружена аномально высокая проводимость границы раздела ПММА/ПММА, проведены оценки подвижностей носителей заряда. Достоверно установлено, что полученные результаты подтверждают идею о локализации квазидвумерного электронного газа вдоль границы раздела двух полярных диэлектриков. В докладе обсуждаются возможные применения нового явления.

Список литературы:

1. Alves H., Molinari A.S., Xie H., Morpurgo A.F. // Nature Materials 2008. V. 7. P. 574.
2. Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Корнилов В.М. и др. // Письма в ЖЭТФ 2009. Т. 90. С.821.
3. Gadiev R.M., Lachinov A.N., Kornilov V.M. and others // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 98. 173305.

УПРАВЛЕНИЕ ГАРМОНИКАМИ ТОКА ПОПЕРЕЧНЫМИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ В ПРИМЕСНОЙ ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ¹

Бадигова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А.

*Волгоградский государственный социально-педагогический университет,
пр. имени Ленина, 27, Волгоград, 400005, e-mail: polin.badicova@gmail.com*

В работе исследована зависимость амплитуд высших гармоник плотности тока в примесной двумерной графеновой сверхрешетке [1] (2D ГСР) от характеристик приложенных к системе постоянного и переменного электрических полей. Плотность тока рассчитана квазиклассически с помощью кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара-Гросса-Крука. Выявлены особенности управления амплитудами гармоник поперечными электрическими полями в ГСР при учете ионизации примесей в зависимости от концентрации. На рис.1 приведена зависимость

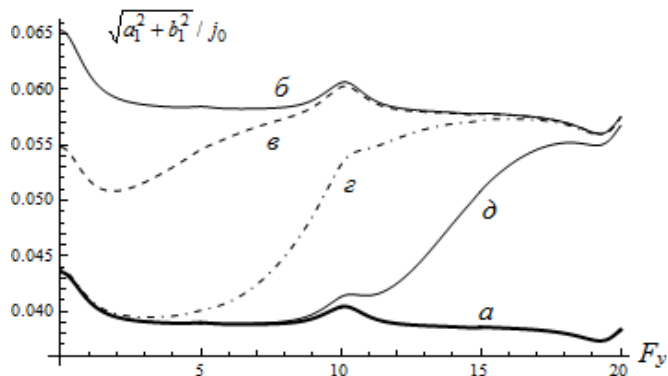


Рис. 1. Амплитуды первой гармоники при глубине залегания примеси а) $\alpha=0$; б) $\alpha=0.1\Delta$; в) $\alpha=0.2\Delta$; г) $\alpha=0.25\Delta$; д) $\alpha=0.3\Delta$.

возрастанию амплитуды гармоники (б) по сравнению с ГСР, в которой примесь отсутствует (а). С увеличением глубины залегания примеси рост амплитуд гармоник тока происходит в области более высоких напряженностей (в, г, д), с последующим насыщением.

Список литературы:

1. Бадигова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // ФТП. 2019. Т.53. В.7. С.927.

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-42-340005.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ НА РЕЗИСТИВНОЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ В ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ

Бикмухаметов Б.А., Корнилов В.М.

*БГПУ им. М. Акмуллы, г.Уфа, ул. Октябрьской Революции 3а,
e-mail: bugatti1997@rambler.ru*

В физике тонких диэлектрических слоев существует круг явлений, объединяемый общим свойством резкого и обратимого изменения проводимости диэлектриков – эффекты переключения. Наиболее интенсивно в настоящее время развивается направление, в котором резистивное переключение используется для разработки твердотельных элементов памяти. Для технологических применений еще предстоит преодолеть некоторые препятствия, такие как контроль воспроизводимости эффекта переключения и связанные с этим проблемы устойчивости и стабильности конкретных устройств.

В связи с этим были исследованы эффекты резистивного переключения в тонких пленках полидифениленфталида, сформированных на металлической подложке. В тонких пленках таких полимеров резистивное переключение может быть инициировано не только электрическим полем, но и одноосным давлением, термоионизацией ловушек, электронным или ионным облучением, изменением граничных условий на поверхности раздела металл-полимер, магнитным полем [1]. Было установлено, что эффект переключения наиболее стабильно реализуется при величине балластного сопротивления более 15 кОм при используемом напряжении менее 5 В. Такое напряжение заведомо меньше потенциала ионизации газов атмосферного воздуха.

Результаты работы важны для прояснения механизмов резистивного переключения в полимерных пленках и для разработки технологических требований по изготовлению и тестированию устройств памяти.

Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. // УФН 2006. Т. 176. С.1249.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОСТОЙКОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Боровикова Е.Ю., Корнилов В.М.

БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа,

e-mail: elena.borovikovayu@mail.ru, kornilov@anrb.ru

Термостойкие полимеры представляют в настоящее время одну из наиболее перспективных областей полимерной химии. Одним из представителей термостойких полимеров является полидифениленфталид (ПДФ). Информация о термостойкости была получена методом термогравиметрии, для работ с субмикронными пленками важно иметь возможность более точной диагностики состояния пленок.

Для проведения АСМ-исследований был использован сканирующий мультимикроскоп СММ-2000Т с кантилевером CSG01, работавший в контактной моде. Исследования методом атомно-силовой микроскопии показали, что поверхности исходных образцов однородные, гладкие, с шероховатостью, сравнимой с шероховатостью подложек, на которые они были нанесены. Нагревание образцов на воздухе до температур 350°C и последующее охлаждение не влияет на шероховатость поверхности и не изменяет толщины полимерных пленок. Заметное уменьшение толщины полимерной пленки наблюдается только после отжига при температуре 450°C. Одновременно на поверхности регистрируется зернистая структура, с размерами структурных элементов 6-10 нм.

Установлено, что пленки ПДФ обладают высокой термостабильностью без потери качества при нагреве на воздухе. При термоокислительной деструкции наблюдаются глобулы, объемы которых сопоставимы с объемом полимерной молекулы. Активный кислород приводит к распаду полимерных макромолекул с образованием фрагментов тетрафенилметанового, гексафенилэтанового, антраценового и флуоренового типа, которые летучи при температурах деструкции.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРА НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ВДОЛЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР

Гадиев Р.М.^а, Лачинов А.Н.^б, Корнилов В.М.^а, Калимуллина Л.Р.^а,
Юсупов А.Р.^а, Галиев А.Ф.^б

^а БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

^б ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

e-mail: gadiev.radik@gmail.com

Электронные свойства границы раздела двух полярных диэлектриков представляют большой интерес. В работе [1] было впервые показано на примере двух соединений из класса перовскитов $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$, что вдоль такой границы возникает квазидвумерный электронный газ. Позднее в ряде работ было установлено, что подобные состояния могут возникать на границе раздела не только перовскитов, но и различных органических материалов [2] или аморфных полимеров [3]. В качестве объектов исследования были выбраны полимеры из класса полиариленфталидов с различным строением.

В работе экспериментально было показано, что от плотности дипольных молекул вблизи границы раздела зависят параметры носителей заряда в двумерном слое, содержащем Q2DEG. В рамках предложенной модели свойства границы раздела определяются встроенным полем диполей, которое приводит к изгибу зон в области интерфейса полимер-полимер. Параметры этого поля определяют и величину, и направление сдвига.

Список литературы:

1. Ohtomo A., Hwang H.Y. // Nature. 2004. V. 427. P. 423.
2. Alves H., Molinari A.S, Xie H. and Morpurgo A.F. // Nature Materials. 2008. V. 7. P. 574.
3. Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Корнилов В.М., Салихов Р.Б., Рахмеев Р.Г., Юсупов А.Р. // ПЖЭТФ. 2009. Т. 90. С. 11.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ В ПЛЕНКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ-ТЕЛЛЕРА В СКРЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Гасанов Х.А.^{а,б}, Гусейнов Дж.И.^а, Дадашова В.В.^б, Аббасов И.И.^г

^а АГПУ, ^б АМЧСА, ^в БГУ, ^г АГУНУП г. Баку, e-mail: cahangir.adpu@mail.ru

Рассмотрено движение электрона в пленке с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера во внешних однородных магнитных и электрических полях. Тогда гамильтониан электрона будет иметь вид [1,2]

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{P} - \frac{e}{c}A\right)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2 \lambda (\lambda - 1)}{2mch\alpha z} + eEx \quad A = (0, Bx, 0) \quad (1)$$

где $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ - оператор импульса, A - вектор-потенциал магнитного поля, E - электрическое поле. Тогда гамильтониан (1) примет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{i\hbar eB}{mc} \cdot x \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2}{2mc^2} \cdot B^2 x^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2 \lambda (\lambda - 1)}{2mch^2 \alpha z} + eEx \quad (2)$$

Поэтому движение электрона описывается плоской волной. Решение уравнения

Шредингера $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$ (3) можно искать в виде [2]: $\psi(x, y, z) = W(y)U(z)V(x)$ (4)

В результате, подставляя (2) в (3), для энергии, а также для волновой функции электрона в скрещенных электрических и магнитных полях, в соответствии с (4) получим следующие выражения

$$\varepsilon_{\lambda, n, N} = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \frac{\hbar c}{B} Ek_y - \frac{mc^2}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 (\lambda - 1 - 2n)^2$$

$$\psi(x, y, z) = C \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-x_0}{R} \right)^2} H_N \left(\frac{x-x_0}{R} \right) \cdot A {}_2F_1 \left(a, b, \frac{1}{2}; 1-y \right) + B(1-y)^{\frac{1}{2}} {}_2F_1 \left(a + \frac{1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; 1-y \right)$$

где $A {}_2F_1$ - гипергеометрическая функция [1]. Остальные все обозначения общепринятые.

Список литературы:

1. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Издательство ЛКИ, 2008. Т.1.
2. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. 1978. 616 с.

ВЛИЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕДИ НА ПРОВОДИМОСТЬ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕР-МЕТАЛЛ

Гелецкая К.А.^а, Лачинов А.Н.^б, Александров И.В.^в

^а *БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции 3а,
e-mail: geleckaya_kristi@mail.ru*

^б *ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, Пр. Октября 151*

^в *УГАТУ ул. К.Маркса 12*

Поиск новых методов и средств неразрушающей диагностики состояния металла контактных проводов электротранспорта является важной научно-технической задачей.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния пластической деформации меди на проводимость структуры металл-полимер-металл. Объектом исследования был выбран металл - медь, подвергнутая пластической деформации. В качестве полимера был выбран полидифениленфталид. Экспериментальный образец представлял собой многослойную структуру медь/полимер/медь. На поверхность отполированного металла наносилась полимерная пленка толщиной 0,8 мкм методом центрифугирования. Измерения проводились с помощью стандартной методики измерения вольт-амперных характеристик, при заданных значениях давления.

Анализ полученных нелинейных вольт-амперных характеристик позволил оценить подвижность носителей заряда, концентрацию носителей заряда и высоту потенциального барьера на контакте металл-интерфейс в отсутствии внешнего электрического поля. Установлено, что пластическая деформация приводит к увеличению высоты потенциального барьера на границе металл/полимер, за счет изменения эффективной работы выхода электрона из деформированного металла. Это приводит к заметному изменению подвижности носителей заряда в полимерной пленке. Последнее отражается в уменьшении проводимости структуры в несколько раз. Обсуждаются перспективы развития данного метода.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК ПРИ ПОМОЩИ АТОМНО- СИЛОВОГО МИКРОСКОПА С ПРОВОДЯЩИМ ЗОНДОМ

Ишбулатова А.И., Корнилов В.М.

*БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции 3а,
e-mail: ishbulatova.aim@yandex.ru, kornilov@anrb.ru*

Эффективным инструментом экспериментального исследования поверхности, локальных электрофизических свойств полимерных пленок является метод атомно-силовой микроскопии с проводящим зондом. Знание взаимосвязи микроструктуры полимерного пленочного образца и его электронных свойств может обладать ценным предсказательным качеством при проектировании каких-либо электронных устройств. Эта методика позволяет производить одновременное картографирование морфологии поверхности и регистрацию электрических неоднородностей в пленке полимера. Для эксперимента были использованы субмикронные пленки полидифениленфталида (ПДФ) на подложке из нержавеющей стали. Режимы исследования электрических характеристик реализованы в виде комплекса дополнительных аппаратных и программных средств, подсоединённых к базовым системам сканирующего мультимикроскопа СММ-2000.

Установлено, что пленка ПДФ на поверхности металла изначально обладает хорошими диэлектрическими свойствами вплоть до толщины в несколько нанометров. При деформации этой пленки образуется некоторое количество дефектов, которые и служат местами протекания тока. Наиболее плотно дефекты сконцентрированы в области прямого механического воздействия. Таким образом, использование атомно-силового микроскопа с проводящим зондом позволяет одновременно исследовать топографические и электрические особенности поверхности ультратонких диэлектрических пленок в нанометровом масштабе.

СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА БИСЛОЯ МОЛЕКУЛ PTCDA НА ПОВЕРХНОСТИ Ag(111)

Зайцев Н. Л.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа,
e-mail: nza@yandex.ru.*

Структурные, электронные и колебательные свойства металл-органического интерфейса PTCDA/Ag(111) были изучены в рамках теории функционала плотности (ТФП) с учетом дальнедействующих дисперсионных сил. Результаты проведенных расчетов были сопоставлены с экспериментально полученными ИК спектрами [1]. В работе сделан акцент на сравнительном исследовании монослоя и бислоя молекул PTCDA на поверхности Ag(111) [2]. Если равновесная геометрия и ИК-спектр монослоя молекул хемисорбированного на Ag(111) хорошо описываются вычислениями, то присутствие физисорбированного второго слоя PTCDA приводит к неправильному описанию ИК-спектров. Неправильное положение пограничных молекулярных орбиталей второго слоя предсказанное расчетами ТФП приводит к ошибочному вкладу колебаний второго слоя в ИК-спектр вследствие интерфейсного динамического переноса заряда от подложки к адсорбату. После удаления этих искусственных пиков с высокой интенсивностью, рассчитанные и экспериментальные данные показывают хорошее согласие, и ИК-спектр может быть описан как сумма вкладов в спектр контактного слоя PTCDA/Ag(111) и физисорбированного второго монослоя PTCDA.

Список литературы:

1. Thussing S., Jakob P. // J. Phys. Chem. C. 2017. 121. P.13680.
2. Zaitsev N.L., Jakob. P., Tonner R.// Journal of Physics: Condensed Matter. 2018. 30. P.354001.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

Ильясов В.Х.^а, Лачинов А.Н.^б, Карамов Д.Д.^б, Пономарев А.Ф.^в, Воробьев А.Ю.^в

^а УГТУ, г. Ухта, e-mail: vilyasov@ugtu.net

^б ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа,

^в БФ БГУ, г. Бирск

Характеристические параметры процессов переноса, накопления и релаксации заряда в тонких полимерных пленках определяются параметрами активных центров захвата заряда. Ранее в работе [1] было установлено несколько процессов отвечающих за релаксацию заряда пленок ПДФ: дипольная поляризация, проявляющая себя при низких температурах,

формирование объемного заряда, захваченного на ловушки, и приповерхностного заряда.

В работе экспериментальные исследования проведены в области температур соответствующей релаксации дипольной поляризации (1 область) и объемного заряда (2 область). Рассчитаны энергии активации E_a соответствующих

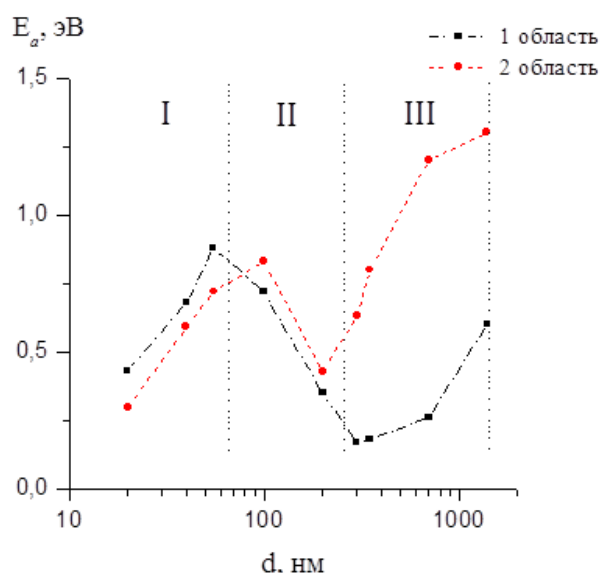


Рис. 1. Зависимости энергии активации от толщины полимерной пленки

зависимости от толщины полимерной пленки. На графике зависимости выделены три участка (рис. 1). Показан сложный характер изменения энергии активации от толщины полимерной пленки, которая коррелирует с представлениями об изменении надмолекулярной структуры в исследуемом диапазоне толщин полимерных пленок ПДФ.

Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Ильясов В.Х., Пономарев А.Ф. // Химическая физика. 2009. Т. 28. №. 8. С. 78-83.

ВЛИЯНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРА НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУБМИКРОННЫХ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА

Карамов Д.Д.^а, Лачинов А.Н.^а, Корнилов В.М.^б

^а ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, e-mail: karamov_danf@bk.ru

^б БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа

В работе представлены результаты систематического исследования морфологии поверхности и надмолекулярной структуры субмикронных пленок полидифениленфталида методами зондовой микроскопии. Экспериментальные образцы получены методом центрифугирования на поверхности подложек из растворов полимера 0,1 – 10 вес.% в циклогексаноне. В зависимости от концентрации исходного раствора были получены сплошные полимерные пленки от 5 нм до 1,5 мкм.

Показано, что надмолекулярная структура и локальная шероховатость поверхности существенным образом зависят от реологических свойств исходного раствора, из которого была изготовлена полимерная пленка. Обнаружены два вида структуры объема: 1) глобулярная однородная – образуется при изготовлении пленок из сильно-разбавленных растворов, при этом толщина не превышает 150 нм; 2) структура в виде агрегатов макромолекул, с характерными размерами в диаметре 30 и 100 нм – формируется в пленках, изготовленных из умеренно разбавленных растворов.

Выявлены корреляции изменения надмолекулярной структуры с электрофизическими свойствами тонких пленок полидифениленфталида: со спонтанной поляризацией поверхности, которая непосредственно влияет на подвижность носителей заряда на границе раздела двух полимерных пленок; с изменением энергии активации релаксации заряда при увеличении толщины полимерной пленки и т.д.

ВЛИЯНИЕ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ

Киан М.Ф.^а, Лачинов А.Н.^б

^а *ФГБОУ ВО БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, e-mail: aminkian@yandex.ru*

^б *ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа*

Тонкие нанометровой толщины пленки полиарилефталидов обладают уникальными электронными свойствами, изучение которых имеет большое значение не только для фундаментальной науки, но и для практического использования в устройствах органической электроники. Однако до сих пор мало внимания уделялось изучению стадии формирования полимерной пленки и влиянию окружающей среды на электронные свойства тонкопленочных устройств. В настоящем докладе приведены результаты изучения электронных свойств тонких пленок полидифенилефталидов при различных условиях их формирования от стадии растворения до стадии конечной твердой пленки. Два основных фактора варьировались в работе. Первый – формирование пленки на открытой атмосфере или в вакууме. Второй – при стандартном лабораторном освещении или в темноте. В результате проведенных исследований установлено, что наличие кислорода при формировании пленки приводит к более высокой проводимости. Этот результат противоречит ранее обнаруженному влиянию кислорода на проводимость твердых пленок [1]. Также обнаружено влияние освещения при формировании пленок на их проводимость. В докладе представлена интерпретация обнаруженных явлений и предложены практические рекомендации по изготовлению пленок.

Список литературы:

1. Юсупов А.Р., Лачинов А.Н., Калимуллина Л.Р., Гадиев Р.М., Никитина Д.В. //Физика твердого тела 2019. Т. 61. С. 581.

**ПРИРОДА ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В РЕАКЦИИ
ТВЕРДОФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
СУЛЬФАТА ЕВРОПИЯ С ДИФТОРИДОМ КСЕНОНА¹**

Мамыкин А.В., Масягутова Г.А., Остахов С.С.

УфИХ УФИЦ РАН, e-mail: mamykin@anrb.ru

450054, Республика Башкортостан, г. Уфа, пр. Октября, 71

Обнаружено, что взаимодействие порошков дифторида ксенона и обезвоженного сульфата европия(III) сопровождается хемилюминесценцией. Реакция протекает самопроизвольно, при комнатной температуре продолжается около 20 часов.

Установлено, что эмиттерами фотонов в видимой области оптического спектра являются атомарный и однократно ионизированный ксенон (полоса излучения 420-560 нм) и возбуждённый ион европия(III) (590-650 нм). Эмиссия первых двух преобладает в начале реакции; в конце взаимодействия преобладает излучение Eu^{3+} в красной области спектра.

Кристаллический продукт реакции, как следует из исследования его спектрально-люминесцентных свойств и измерений времени жизни возбуждённого состояния Eu^{3+} (в составе продукта), представляет собой смешанный фторидно-сульфатный комплекс европия(III).

Показано, что в смеси реагентов протекает ряд последовательных реакций, приводящих к образованию электронно-возбуждённых продуктов: 1) образование высокоактивного интермедиата – катиона XeF^+ ; 2) окисление этим катионом Eu^{3+} до Eu^{4+} ; 3) восстановление неустойчивого Eu^{4+} до Eu^{3+} вследствие взаимодействия с координационным окружением. Излучение фотонов происходит в стадиях восстановления Xe(II) до Xe(0) (420-560 нм) и Eu^{4+} до Eu^{3+} (590-650 нм).

¹ Работа выполнена в рамках Государственного задания № АААА-А17-117011910028-7

КРИСТАЛЛОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ГЕТЕРОГЕННОЙ РЕАКЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НИТРАТА ЕВРОПИЯ С ДИФТОРИДОМ КСЕНОНА¹

Масягутова Г.А., Мамыкин А.В., Остахов С.С., Овчинников М.Ю., Хурсан С.Л.

УфИХ УФИЦ РАН,

450054, г. Уфа, пр. Октября, 71, e-mail: masgul@anrb.ru

Дифторид ксенона широко используется в органическом и неорганическом синтезе в качестве фторирующего агента и окислителя. Способность XeF_2 генерировать электронно-возбужденные состояния ксенона в различных состояниях окисления позволяет, основываясь на хемилюминесцентных наблюдениях, пролить свет на механизмы процессов с его участием, протекающих как в твердофазных, так и в жидкофазных системах. Данное исследование продолжает серию наших работ по изучению реакций эффективного фторирующего агента XeF_2 , приводящих к образованию электронно-возбужденных состояний ксенона в различных степенях окисления. Оригинальность предлагаемой работы составляют ряд факторов:

- Обнаружен еще один пример редкого явления - кристаллохемилюминесценция (CCL) в реакции $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ с дифторидом ксенона в ацетонитриле;
- Достоверно установлено, что в роли эмиттеров CCL выступают электронно-возбужденные: элементарный ксенон $^*\text{Xe}$ ($\lambda_{\text{em}} = 458 \text{ нм}$), интермедиат $^*\text{Xe}^+$ ($\lambda_{\text{em}} = 416, 484, 542 \text{ нм}$), ион европия $^*\text{Eu}(\text{III})$ ($\lambda_{\text{em}} = 610 \text{ нм}$) и синглетный кислород $^1\text{O}_2$ ($\lambda_{\text{em}} = 1270 \text{ нм}$);
- Реакция является редким примером мультиэмиттерного процесса, приводящего к образованию ряда электронно-возбужденных продуктов: $^*\text{Xe}$, $^*\text{Xe}^+$, $^*\text{Eu}(\text{III})$ и синглетного кислорода $^1\text{O}_2$. Предложен механизм их образования в ходе реакции.

¹ Работа выполнена в рамках Государственного задания № АААА-А17-117011910028-7

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА КРАЕВ ТОНКИХ ПЛЕНОК GASNTE¹

Меньщикова Т.В.^а, Русинов И.П.^{а,б}, Складнева И.Ю.^{а,б,в}, Чулков Е.В.^{в,а,б}

^а *Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

^б *Санкт-Петербургский университет, г. Санкт-Петербург, Россия*

^в *Международный физический центр Доности, г. Сан-Себастьян, Страна Басков, Испания*

e-mail: menshikova_t@mail.ru

В настоящее время материалы с нетривиальной топологией находятся в центре внимания за счет своих экзотических свойств. Ярким примером таких материалов являются двумерные топологические изоляторы, характеризующиеся наличием особых геликоидальных спин-поляризованных бесщелевых состояний, в которых электроны защищены симметрией обращения времени от обратного рассеяния, что делает их чрезвычайно привлекательными для использования в электронных устройствах с низким энергопотреблением. Поэтому поиск и исследование новых двумерных топологических изоляторов является особенно актуальной задачей.

В данной работе исследована электронная структура пленок GaSnTe различной толщины. Обнаружено, что пленки толщиной 6 и 12 атомных слоев являются топологически нетривиальными. Анализ показал, что дисперсия одномерного краевого состояния сильно зависит от типа края, что напрямую связано с влиянием ковалентной связи внутри структурных блоков. Так, неполные координационные полиэдры атомов Ga и Sn сопровождающиеся разрушением сильных ковалентных связей внутри шестислойных блоков вызывают появление тривиальных поверхностных состояний. Показано, что такие состояния могут быть эффективно подавлены путем модификации геометрии края полубесконечной пленки.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 18-12-00169

**ВЛИЯНИЕ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛА
НА ПАРАМЕТРЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА
В СТРУКТУРЕ МЕТАЛЛ - ПОЛИМЕР - МЕТАЛЛ**

Мингажев И.К.^а, Лачинов А.Н.^б, Бакиев Т.А.^в, Жуков А.Е.^в

^а БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции 3а,
e-mail: zeus25.im@mail.ru

^б ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, Пр. Октября 151

^в ИТЦ Газпром Трансгаз Уфа, г. Уфа, ул. Сипайловская, д. 11

Поиск новых методов диагностики напряженного состояния структуры металлов это важная научная и техническая задача. Основная проблема состоит в чувствительности метода и достоверности полученной информации. Настоящая работа посвящена исследованию влияния упругой деформации стали на электронные свойства структуры медь/полимер/медь (МППМ).

Суть метода заключается в измерении вольт-амперных характеристик МППМ структуры в зависимости от величины упругой деформации стального сегмента трубы газопровода. Образцы изготавливались методом вакуумного термического напыления меди в качестве электродов. Метод центрифугирования раствора полимера использовался для изготовления полимерных пленок.

Анализ поведения ВАХ структуры позволил оценить изменение сопротивления многослойной структуры, подвижности, концентрации носителей заряда, а также высоту потенциального барьера. Установлено, что при деформации металла происходит изменение положения уровня Ферми, приводящее к увеличению эффективной работы выхода электрона стали.

Данный метод потенциального барьера можно применять в промышленных масштабах. Например, для выявления деформаций и разрушения металлических объектов, которые находятся в труднодоступных местах. Возможности научно-технического применения рассматриваемого метода обсуждаются.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

Мухитдинов И.М., Корнилов В.М.

*БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции 3А к2,
e-mail: ilvir.mukhitdinov@mail.ru*

Актуальность работы обусловлена потребностями современной науки и техники в защитных и модифицирующих покрытиях для электродов различного функционального назначения: в электролизерах, электрохимических ячейках, химических источниках тока и т.д. При модификации химическое соединение или полимерную пленку наносят специальным образом на поверхность электрода. При этом меняется его способность к вольтамперометрическому отклику в результате появления новых электрофизических свойств [1].

В качестве объекта исследования в работе были использованы пленки полидифениленфталида различной толщины на подложках из нержавеющей стали после работы в электрохимической ячейке. Для проведения исследования применили методику атомно-силовой микроскопии (АСМ), с помощью которой была исследована морфология поверхности, как чистых электродов, так и покрытых полимерной пленкой.

Установлено, что чистый электрод в структуре металл/электролит подвергается необратимым изменениям. Если электрод является анодом, то наблюдаются эрозия в виде ямок, если катодом, то в виде выступов, т. е. прослеживается эрозия в виде локального травления. При изучении электрода, модифицированного полимером, травления электрода не наблюдается, пленка полимера сохраняется. Таким образом, пленки полидифениленфталида являются перспективным защитным покрытием при изготовлении химически модифицированных электродов.

Список литературы:

1. Будников Г.К., Шайдарова Л.Г. // Журнал аналитической химии 2008. Т. 63. № 10. С. 1014.

ИЗУЧЕНИЕ ФОТОПРОВОДИМОСТИ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА

Рахматова Л.И., Исхакова В.В., Юсупов А.Р.

ФГБОУ ВО БГПУ им. М.Акмиллы, г. Уфа, e-mail: rahmatova.liliya@mail.ru

В работе [1] было показано, что в пленках полидифениленфталида (ПДФ) наблюдается длительное послесвечение, которое объясняется в рамках представлений об электронных состояниях в запрещенной зоне полимера. Наличие долгоживущих ловушек в пленках ПДФ, очевидно, должно оказывать вклад в итоговую электропроводность. В связи с этим, целью данной работы являлось исследование влияния ультрафиолетового (УФ) фотовозбуждения на вольт-амперные характеристики (ВАХ) структуры ИТО-ПДФ-Al. На рисунке 1 представлены вольтамперные характеристики полученные на экспериментальных структурах. Согласно полученным данным, УФ облучение через прозрачный слой ИТО приводит к росту электропроводности. В докладе обсуждаются полученные результаты, в частности, влияние УФ облучения на величину потенциального барьера и подвижность носителей заряда.

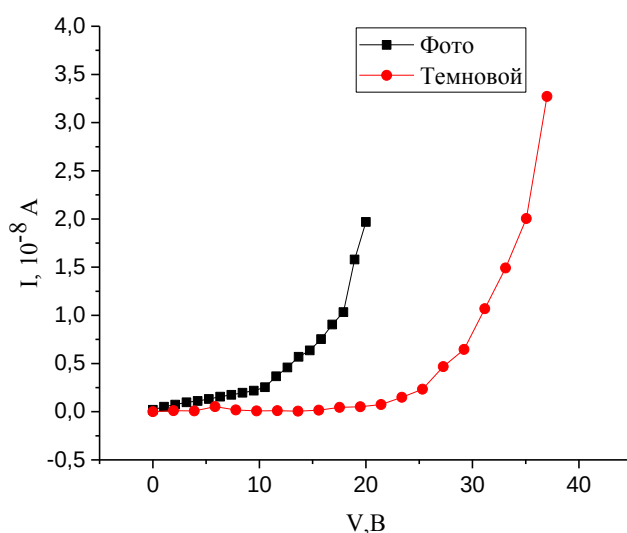


Рис. 1. Влияние УФ облучения на ВАХ структуры ИТО-ПДФ-Al

Список литературы:

1. Антипин В.А., Лачинов А.Н., и др. // ХВЭ 2010. Т. 44. № 4. С. 345.

ЭКЗОТИЧЕСКИЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СОЕДИНЕНИЯХ Bi_xTeBr ($x=2,3$)¹

Русинов И.П.^{а,б}, Меньщикова Т.В.^а, Исаева А.А.^в, Чулков Е.В.^{д,а,б}

^а Томский государственный университет, г. Томск, Россия

^б Санкт-Петербургский университет, г. Санкт-Петербург, Россия

^в Дрезденский технологический университет, г. Дрезден, Германия

^д Международный физический центр Доностии, г. Сан-Себастьян,
Страна Басков, Испания, e-mail: klimfly@rambler.ru

Теллуругалогениды висмута BiTeX ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) представляют собой привлекательную платформу для практических приложений за счет, имеющихся функциональных возможностей. Наряду с этим химическая модификация структуры и состава представляет собой универсальный инструмент для получения материалов с заданными свойствами. Особенно перспективной с этой точки зрения выглядит внедрения гофрированного бислоя $[\text{Bi}_2]$ в ван-дер-ваальсовы щели $[\text{BiTeBr}]$, что приводит к формированию таких структурных типов как $\text{Bi}_2\text{TeBr} = [\text{Bi}_2] \cdot 2[\text{BiTeBr}]$ или $\text{Bi}_3\text{TeBr} = [\text{Bi}_2] \cdot [\text{BiTeBr}]$.

В рамках проведенного исследования было обнаружено, что Bi_2TeBr и Bi_3TeBr относятся к классу топологически не тривиальных материалов. Расчет электронной структуры показал, что на поверхности этих материалов формируются особые спин-поляризованные топологические состояния, возникающие вследствие специфического инвертирования объемных зон. Так, в случае Bi_2TeBr на поверхности, образованной Te слоем, формируется топологическое состояние, образованное двумя ветками, характеризующимися различной пространственной локализацией, а также разной симметрией атомных орбиталей. В случае Bi_3TeBr положение точки Дирака по энергии в топологическом состоянии существенно зависит от типа окончания поверхности, что на прямую связано с эффектом изгиба зон на соответствующей поверхности.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 18-12-00169

ИССЛЕДОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР МЕТОДАМИ АТОМНО - СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Сафаргалиева Г.Р., Корнилов В.М.

БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции 3А, к 2

e-mail: guzel.ganieva.97@bk.ru

Дисперсные системы достаточно широко распространены в природе. Составная часть этих систем — агрегаты коллоидных частиц — одни из первых физико-химических объектов, к описанию которых были привлечены представления фрактальной геометрии. И в настоящее время фрактальные агрегаты остаются бесспорными лидерами по числу работ, посвященных исследованию фракталов. Оказалось также, что рост фрактальных агрегатов моделирует множество процессов, на первый взгляд не имеющих ничего общего с агрегацией частиц [1].

В данной работе представлены результаты исследования самоорганизующихся макромолекулярных фрактальных структур. Использовались полимеры и белки в нанодисперсном состоянии, нанесенные на различные подложки. Использование методик атомно-силовой микроскопии позволило визуализировать фрактальные структуры, определить размеры структурных элементов и фрактальную размерность. Установлено, что полимерные и белковые частицы представляют собой агрегаты макромолекул, фрактальная размерность в том и другом случае немного больше 2.

Таким образом, показана возможность использования методик атомно-силовой микроскопии для исследования фрактальных структур. Предложена модель формирования фрактальных структур, основанная на представлениях о росте и самоорганизации островков на кристаллической поверхности.

Список литературы:

1. Ролдугин В.И. // Успехи химии 2003. Т. 72. № 11. С. 1027.

ВЛИЯНИЕ ФОТОВОЗБУЖДЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ДВУХ ПОЛИМЕРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Севостьянова Е.Г., Севостьянов В.Г., Юсупов А.Р.

*ФГБОУ ВО БГПУ им. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской революции, 3А,
e-mail: sevostyanova97@list.ru*

Формирование высокопроводящей области на границе раздела двух диэлектриков [1,2] с подвижностью носителей заряда на 5-6 порядков превышающую объемную, вызывает повышенный интерес в связи с прикладными возможностями. Однако, как отмечается в работе [2], свойства границы не ограничиваются только повышенной электропроводностью, но и чувствительностью к внешнему воздействию. В частности, установлено [2] влияние фотовозбуждения ультрафиолетовым источником на электропроводность экспериментальной структуры.

В настоящей работе, основной целью явилось исследование влияния фотовозбуждения длинами волн 405 нм, 520 нм и 650 нм на свойства границы раздела сформированной двумя полимерными диэлектриками. В качестве объекта исследования был выбран полидифениленфталид (ПДФ).

Согласно полученным данным наибольший вклад в изменение электропроводности границы раздела ПДФ/ПДФ оказывает фотовозбуждение длиной волны 405 нм.

В докладе обсуждаются результаты полученные в ходе экспериментальной работы и их интерпретация.

Список литературы:

1. Gadiev R.M., Lachinov A.N., Kornilov V.M., Salikhov R.B., Rakhmееv R.G., Yusupov A.R. // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 98. P. 173305.
2. Gennaro E., Uccio U.S. // Adv. Optical Mater. 2013. V.1. P. 843.

ВЛИЯНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОЧНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Хилаев В.Ю., Корнилов В.М.

*БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции, 3А к2,
e-mail: vvwadim@mail.ru*

Изучение электрической прочности полимерных пленок представляет большой научный и практический интерес. Общая тенденция к миниатюризации обуславливает необходимость использования полимерных пленок, толщина которых составляет сотни нанометров и менее. В сильных электрических полях проблемы электрической прочности ультратонких пленок приобретают первостепенное значение.

В качестве объекта исследования был использован полимер полидифениленфталид (ПДФ), обладающий хорошими пленкообразующими свойствами и высоким качеством поверхности [1]. Образцы представляли собой пленки ПДФ толщиной от 380 до 10 нм, нанесенные на полированные медные пластинки. Напряженность пробоя полимерных пленок была измерена в экспериментальных конфигурациях типа острие-плоскость и типа «сэндвич».

Было установлено, что электрическая прочность полимерных пленок увеличивается с уменьшением толщины пленок от величин 1,5-2 МВ/см до 80 МВ/см. Резкий рост наблюдается при толщинах полимерной пленки менее 100 нм. Этот результат хорошо коррелирует с данными работы [1], в которой описан концентрационный переход от формирования надмолекулярной структуры пленки на основе ассоциатов макромолекул к формированию пленки на основе отдельных макромолекул.

Таким образом, установлена связь между надмолекулярной структурой полимера и его электрической прочностью.

Список литературы:

1. Карамов Д.Д., Корнилов В.М., Лачинов А.Н., Крайкин В.А., Ионова И.А // ЖТФ. 2016. Т.86. В.7. С.124.

РФЭС ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СПЛАВА $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ

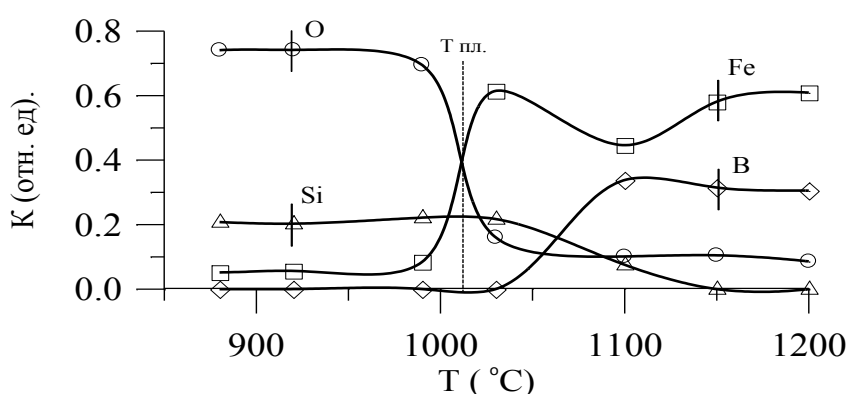
Холзаков А.В.

Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН,
426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т.Барамзиной, д. 34, e-mail: avkhol@yandex.ru

Строение металлических расплавов, в основном, рассматривается с точки зрения образования в расплавах различного рода образований: микрогруппировки, микронеоднородности, микрогетерогенные области, кластеры и т.п.

Исследования, выполненные в настоящей работе, проведены на рентгеноэлектронном спектрометре с магнитной фокусировкой электронов.

На рис.1 представлены результаты РФЭС исследования сплава $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ «in situ» в диапазоне изменения температуры от 800 до 1200 °С. Как видно из рисунка в кристаллическом состоянии на поверхности сплава $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$



присутствуют, в основном, оксиды кремния SiO_2 , а так же атомы железа в связи Fe-Si и оксиды железа Fe_2O_3 .

Рис. 1. Изменение концентрации элементов сплава $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ при увеличении температуры

На участке от T плавления до 1200 °С

можно выделить две температурные области с различной концентрацией элементов. Первая область от T плавления до 1100 °С, вторая – от 1100 до 1200 °С. В первой области на поверхности присутствуют атомы Fe, Si и кислорода, в небольшом количестве. В этой области возможно формирование кластеров Fe-Si, а также более сложных группировок атомов $(\text{Fe-O})_x\text{-Si}$. Во второй области происходит изменение состава поверхностных слоев. Поверхность формируется за счет образования кластеров Fe-B, а также кластеров $(\text{Fe-O})_x\text{-B}$.

ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР¹

Юсупов А.Р., Гадиев Р.М., Лачинов А.Н.

ФГБОУ ВО БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, e-mail: azat.yusupov@bk.ru

Уникальные свойства, наблюдаемые на границе раздела двух полимерных пленок полидифениленфталида (ПДФ) [1] позволяют расширить область их применения в различных типах электронных устройств. Несмотря на отсутствие однозначной теоретической модели переноса носителей заряда вдоль границы раздела и вклада объема в итоговую электропроводность, эмпирические данные позволяют определить целый ряд особенностей и сформировать представления о свойствах границы.

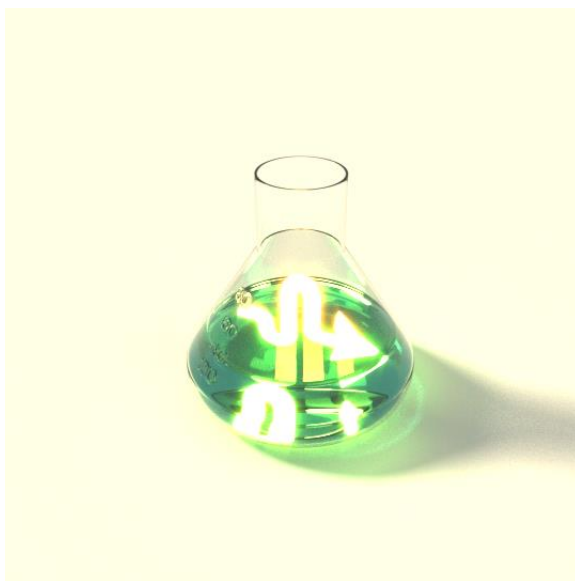
В нашей работе представлены результаты исследования фотопроводимости возникающей вдоль границы раздела при фотовозбуждении монохроматическим светом длиной волны 405 нм. Главной проблемой, возникшей в ходе исследования влияния фотовозбуждения на свойства границы раздела является определение вклада объема полимерной пленки на наблюдаемые эффекты. В работе [2] был показан вклад долгоживущих ловушечных состояний на длительное послесвечение. Возникновение данных состояний должно оказывать влияние на электропроводность. Так было установлено, что в структуре ИТО – ПДФ – Al наблюдается изменение электропроводности при облучении структуры (405 нм). Анализ полученных ВАХ показал, что величина потенциального барьера на границе ИТО/ПДФ изменяется в среднем на 0,06 эВ. Причина и интерпретация наблюдаемых эффектов будут представлены в докладе.

Список литературы:

1. Gadiev R.M., Lachinov A.N. // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 98 P. 173305.
2. Антипин В.А., Лачинов А.Н., и др. // Химия высоких энергий 2010. Т. 44. № 4. С.345.

¹ Работа выполнена при поддержке гранта республики Башкортостан молодым ученым (договор 30ГР)

Математические и квантово-химические методы в физике молекул и кристаллов



МАЛОЧАСТИЧНЫЕ КУЛОНОВСКИЕ СИСТЕМЫ

Ахметьянов Р.Ф.

ИФМК УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 151,

e-mail: robertu@mail.ru

Как известно, основной проблемой при решении уравнения Фаддеева является выбор аппроксимации потенциалов взаимодействия, при котором Т-матричные элементы рассеяния приобретали бы сепарабельный вид. Однако даже в таком случае решение уравнения Фаддеева не всегда становятся практичным в виду того, что входящие Т-матричные элементы в интегральные уравнения уже не факторизуются.

В данной работе содержится вывод представления двухчастичных Т-матричных элементов рассеяния для кулоновского взаимодействия по специальным базисам [1] без разложения по парциальным волнам. В этом случае для построенного базиса выполняются теоремы сложения [2]. Исходя из этого интегральные уравнения Фаддеева приводятся к факторизованному виду, что позволяет получить более точные решения по сравнению с ранее известными методами для трехчастичных систем с кулоновским взаимодействием.

Результаты работы применимы не только в задаче трех тел при решении уравнения Фаддеева для трёхчастичных систем, но и к системам, состоящим из произвольного количества частиц, уравнения которых относятся к классу уравнений Якубовского - более общему, чем уравнения Фаддеева.

Список литературы:

1. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. // Известия Уфимского научного центра РАН. 2018. №3. С. 22.
2. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. // arXiv.org. 2017, URL: <https://arxiv.org/abs/1711.07337>

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК
ПОЛИМЕРОВ КЛАССА ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ**

Байбулова Г.Ш.^а, Лачинов А.Н.^{а,б}, Гадиев Р.М.^а, Галиев А.Ф.^б

^а *Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумлы,
г. Уфа, ул. Октябрьской Революции, 3а, e-mail: office@bspu.ru*

^б *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
г. Уфа, Проспект Октября, 151, e-mail: lachinov@anrb.ru*

Целью настоящей работы является комплексное исследование надмолекулярной структуры тонких пленок полимеров класса полиарилефталидов (ПАФ), в которых в результате процессов самоорганизации возникают массивы квазиодномерных электропроводящих структур. Исследования проводились методами квантовой химии. В качестве объектов исследования были выбраны полидифениленоксидфталид, поли-N-фенилдифениленфталимид, полидифениленсульфидфталид и политерфениленфталид. В работе были смоделированы и проанализированы фрагменты полимерных макромолекул ПАФ, состоящие из шести и девяти структурных единиц. Квантово-химические расчеты структур проводились полуэмпирическим методом в параметризации AM1. Было установлено, что энергетически наиболее выгодными конфигурациями макромолекул являются линейная синдиотактическая и спиральная изотактическая. Был проведен расчет величины энергетического сдвига зон в области интерфейса Δ для данных структурных соединений, согласно модели, рассмотренной в работе [1].

В результате исследования было установлено, что изменение электронных свойств вдоль границы раздела полимер/полимер хорошо коррелирует с параметром Δ . Данный параметр определяет глубину потенциальной ямы, и знак тип носителей заряда, для которых формируется яма.

Список литературы:

1. Kronik L., Shapira Y. // Surf. Sci. Rep. 1999. 37. 206.

МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ПРЯМОГО АЦИЛИРОВАНИЯ БИЦИКЛОФОСФИТОВ ФОСФОРИНАН- ФОСФОРИНАНОВОГО ТИПА АЦИЛГАЛОГЕНИДАМИ.

Дмитриев В.Ю.^а, Бабкин В.А.^а, Савин Г.А.^б

^а *Волгоградский государственный технический университет. Себряковский филиал 403343, г. Михайловка, ул. Мичурина 21, dmitriev1987@mail.ru*

^б *Волгоградский государственный социально-педагогический университет 400131, г. Волгоград, пр. Ленина, 27*

Целью настоящей работы являлось изучение механизма трех стадий реакции ацилирования этриолбициклофосфитов хлорангидридами карбоновых кислот [1] методами квантовой химии PBE0/3-21g и RHF/6-31g** [2, 3], и методом ЯМР спектроскопии.

Механизмы реакций, представляющие собой S_N2 нуклеофильное замещение представлены в работе [1]. Установлено, что все три стадии носят барьерный характер. Показано, что увеличение температуры нагревания смеси реагентов: 1-ая стадия – 120°C, 2-ая – 150°C, 3-ая – 160-170°C (экспериментальные данные) качественно совпадает с увеличением энергетических барьеров: метод RHF/6-31g** – 132 кДж/моль, 168 кДж/моль, 250 кДж/моль и метод DFT/PBE0/3-21g – 34 кДж/моль, 34 кДж/моль, 42 кДж/моль для первой, второй и третьей стадии соответственно (теоретические данные).

Список литературы:

1. Babkin V.A., Savin G.A., Dmitriev V.Yu., Ignatov A.V., Rakhimov A.I., Fomichev V.T., Belousova V.S., Zaikov G.E. // Oxidation Communications 2018. V. 41. No 4. P. 477–482.
2. Schmidt M.W., Baldrosge K.K., Elbert J.A. et al. // J. Computer Chem. 1993. V. 14. P. 1347.
3. Granovsky A.A.: Firefly. Version 8, 2013. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОЦЕНКА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ КВЕРЦЕТИНА

Зелеев М.Х., Загитов Г.Н., Закирьянова Г.Т., Фаршатов Р.С., Байрамгулов Р.А.

*Башкирский Государственный Медицинский Университет
Минздрава России, г. Уфа, e-mail: zeleevmarat2011@mail.ru*

Функции биологических молекул закодированы природой в их электронном строении. Любые процессы протекающие в организме, начинаются с изменения электронного строения содержащих их молекул. Это позволяет создать методы диагностики на молекулярном уровне, до появления симптомов болезней [1].

В настоящей работе проведено моделирование процессов взаимодействия биологически активной молекулы – кверцетина с одной из важной составляющей клеточной мембраны фосфатидилхолином [2]. Квантово-химические расчеты проведенные методами AM1 и MNDO, показывают, что действие кверцетина происходит через стадию комплексообразования. Наблюдается изменение пространственной структуры данного комплекса путем сближения атомов углеродов холиновой группы фосфатидиохолина с плоскостью кольца молекулы кверцетина и смещением атома углерода фосфатной группы к гидроксильной группе кольца А молекулы кверцетина. Этот процесс объясняет причину увеличения коэффициента диффузии клеточной мембраны под действием кверцетина [3].

Список литературы:

1. Насибуллин Р.С., Султанова В.С., Загитов Г.Н., Зелеев М.Х. // Биофизика 1993. Т.38. № 4. С. 684.
2. Насибуллин Р.С., Зелеев М.Х., Спирихин Л.В., Косарева Д.И. // Biopolymers and Cell. 1998. Т. 14. № 5. С. 428.
3. Зелеев М.Х., Спирихин Л.В., Насибуллин Р.С. // Бутлеровские сообщения. 2017. Т. 51. № 9. С. 89.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИКОСАЭДРИЧЕСКОГО ЗОЛОТОГО ФУЛЛЕРЕНА Au_{32} .

Миронов Г.И.

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, mirgi@marsu.ru.

Электронная структура икосаэдрического золотого фуллерена Au_{32} изучается с использованием методов вторичного квантования в рамках модели Хаббарда. Поскольку в транспорте электронов в наносистемах золота основную роль играют d-электроны, так как уровни энергии s-электронов находятся ниже уровней энергии d-электронов, мы предлагаем простую модель Хаббарда [1] – заменить реальный атом золота моделью, когда d-электрон движется в поле положительно заряженного иона, составленного из ядра и всех остальных, кроме d-электрона, электронов. Конечно, эта модель может показаться слишком простой, но мы знаем, что модель строится для решения определенных задач. На следующем этапе эту модель можно усложнить для описания большего круга явлений. В рамках этой простой модели получены выражения для фурье-образов антикоммутаторной функции Грина, полюса которых определяют энергетический спектр рассматриваемой наносистемы. Энергетический спектр Au_{32} исследуется в сравнении со спектром икосаэдрического углеродного фуллерена C_{60} [2, 3]. Энергетический спектр свидетельствует о полупроводниковом состоянии золотого фуллерена Au_{32} . Приведена плотность электронных состояний, пики которой соответствуют особенностям Ван Хофа. Приведены спектры оптического поглощения нейтрального и отрицательно заряженного фуллерена Au_{32} , энергия первого прямого оптического перехода отрицательно заряженного иона золотого фуллерена Au_{32} равна 1,26 эВ.

Список литературы:

1. Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. A 1963. V. 276. N 1365. P. 238.
2. Kroto H., Heath J., Brien S.O., Curl R., Smalley R. // Nature 1985. V. 318. N 6042. P. 162.
3. Haddon R.C.// Acc. Chem. Res. 1992. V. 25. N 3. P. 127.

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПЛЕНОК ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ В ОБЛАСТИ (20-160)⁰С: КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

Овчинников М.Ю.^a, Антипин В.А.^a, Хурсан С.Л.^a, Коледина К.Ф.^b

^a УфИХ УФИЦ РАН, г. Уфа, пр. Октября, 71, e-mail: antipin@anrb.ru

^b Институт Нефтехимии и Катализа РАН

Методом математического моделирования изучена кинетика термостимулированной люминесценции пленок полиариленфталидов на примере их дифениленпроизводного (ПДФ). Предложена кинетическая схема и оценены параметры активации рекомбинационной люминесценции. Согласно результатам математической обработки рекомбинация ион-радикальных пар, генерированных при облучении УФ-светом, протекает через два параллельных канала и сопровождается излучательной дезактивацией дифениленового фрагмента полимерной цепи. При этом первый канал ($E_{a1} = 70.5 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$) связан с трансформацией метастабильных частиц, тогда как второй канал, включающий в себя две последовательные стадии ($E_{a2} / E_{a3} = 42.2 / 23.2 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$) – с превращениями лабильных элементов. Согласно теории механической релаксации полимеров, зафиксированные энергетические барьеры могут отражать сегментарную подвижность (1), колебания фениленовых звеньев (2), а также вращение боковых элементов (3) цепи ПДФ. В рамках механизма рекомбинации ион-радикальных пар локализован фактор, объясняющий эффективный перенос заряда в теле полимера: согласно выдвинутому предположению миграция электрона может быть обеспечена квантовым туннелированием, отражающемся на величине частотных факторов в терминах уравнения Аррениуса.

"КВАНТОВАНИЕ" ОДНОЙ ГАМИЛЬТОНОВОЙ СИСТЕМЫ КИМУРЫ

Павленко В. А.

*Башкирский государственный аграрный университет, Башкирский
государственный университет г. Уфа, PVA100186@mail.ru*

В работе рассматриваются два совместных между собой линейных дифференциальных уравнения с временами t_1 и t_2 , которые зависят только от двух пространственных переменных. Такого рода уравнения являются аналогами уравнений Шредингера, которые определяются гамильтонианами Кимуры [1].

В работе построены явные решения гамильтоновой системы Кимуры H^{4+1} . Данная система является одним из представителей известной иерархии вырождений изомонодромной системы Гарнье, описанной Х. Кимурой в 1986 году. Посредством явного преобразования данное вырождение может быть сведено к симметричной гамильтоновой системе. Такие гамильтоновы системы выписаны в 2012 году в статье Х. Каваками, А. Накамуры и Х. Сакая [2].

Следует заметить, что в работах Кимуры имеется еще целый ряд уравнений, которые задаются гамильтонианами. Все они являются аналогами уравнения Шредингера. Пока только рассмотрены системы $H^{2+1+1+1}$ и H^{4+1} . Ранее Сулейманов Б.И. и Новиков Д.П. рассмотрели гамильтоновы системы $H^{1+1+1+1+1}$ и $H^{9/2+1}$. Оставшиеся такие уравнения будут рассматриваться и изучаться в последующих работах.

Список литературы

1. Kimura H. The degeneration of the two dimensional Garnier system and the polynomial Hamiltonian structure. Vol. 4 CLV(1959), pp. 24 – 74
2. Kawakami H., Nakamura A., Sakai H. / Degeneration scheme of 4-dimensional Painleve-type equations. <http://arXiv:1209.3836v3> [math.CA] 4 Aug 2016

СХЕМА РАСЧЁТА ГАЗОФАЗНЫХ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ¹

Панкратьев Е.Ю., Хатымов Р.В.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: evgeniy@pankratyev.com*

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) встречающихся в живой природе, обнаруживаются в межзвездном пространстве и в объектах окружающей среды. Для оценки относительной стабильности, реакционной способности, биологической активности и других физико-химических свойств важной константой является энтальпия образования.

Предложена методика расчёта стандартной газофазной энтальпии образования отрицательных ионов ПАУ по следующей схеме уравнений:

$$\Delta_f H^\circ_{298}(M^-) = \Delta_f H^\circ_{298}(M^0) - EA_a(M^0) + \\ + [(U^\circ_{298}(M^-) - U^\circ_0(M^-)) - [(U^\circ_{298}(M^0) - U^\circ_0(M^0))] \quad (I)$$

$$\Delta_f H^\circ_{298}(C_x H_y^0) = x \cdot \Delta_f H^\circ_{298}(CH_4)_{\text{экс.}} + H^\circ_{298}(C_x H_y^0) - \\ - x \cdot H^\circ_{298}(CH_4) - [2x - \frac{1}{2} \cdot y] \cdot H^\circ_{298}(H_2) \quad (II)$$

$$EA_a(M^0) = U^\circ_0(M^0) - U^\circ_0(M^-) = E_{\text{total}}(M^0) - E_{\text{total}}(M^-) + \\ + [ZPVE(M^0) - ZPVE(M^-)] \quad (III)$$

Где $\Delta_f H^\circ_{298}(M^-)$ – газофазная энтальпия образования отрицательного иона ПАУ; $\Delta_f H^\circ_{298}(M^0)$ – газофазная энтальпия образования нейтральной молекулы, рассчитанная по закону Гесса квантово-химическим методом RI-MP2/Λ1 // PBE/Λ2; $EA_a(M^0)$ – адиабатическое сродство к электрону нейтральной молекулы, рассчитанное методом PBE/Λ2; $[(U^\circ_{298}(M^0) - U^\circ_0(M^0))]$ и $[(U^\circ_{298}(M^-) - U^\circ_0(M^-))]$ – термические поправки к внутренней энергии отрицательного иона и нейтральной молекулы; ZPVE – энергия нулевых валентных колебаний.

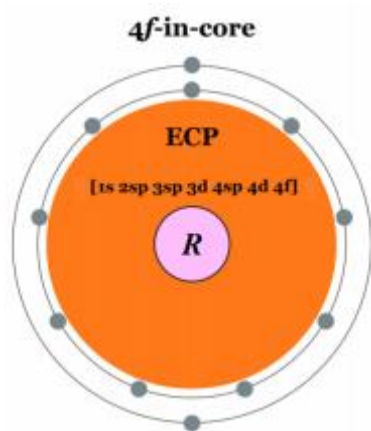
¹ Работа выполнена в рамках темы государственного задания №АААА-А19-119022290052-9 при частичной финансовой поддержке РФФИ и Республики Башкортостан в рамках гранта № 17-42-020643.

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ И УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ С ПОДРЕШЕТКОЙ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ

Петров В.П., Чернышев В.А.

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, ул. Мира 19
e-mail: vladislav.petrov@urfu.ru

Доклад посвящен исследованию из первых принципов структурных, колебательных и упругих свойств кристаллов содержащих редкоземельную (РЗ) подрешетку и относящихся к различным структурным типам: эльпасолита Cs_2NaRF_6 (пр.гр. $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$, $R = \text{Y, Yb}$), пирохлора $\text{R}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (пр.гр. $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$, $R = \text{Gd-Lu}$) и ферробората $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ (пр.гр. $R\bar{3}2$, $R = \text{Ce-Lu}$). Расчеты проведены в программе CRYSTAL [1] в рамках КО ЛКАО подхода с использованием функционалов гибридного типа, включающих нелокальный обмен в формализме Хартри-Фока. Использование гибридных функционалов позволяет



эффективно учитывать проблему самодействия, возникающую в теории функционала плотности и влияние нединамической корреляции. Для описания РЗ подрешетки использован метод псевдопотенциала (Рис. 1), описывающий влияние внутренних электронных оболочек до 4f включительно (4f-in-core). Расчеты предсказывают хорошее согласие с

Рис. 1. Псевдопотенциал 4f-in-core типа для редкоземельного иона

имеющимися экспериментальными данными, дополняют их, а также могут быть обобщены на ряд изоструктурных соединений для дальнейшей интерпретации их структурных, колебательных и упругих свойств.

Список литературы:

1. Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Civalieri B., Maschio L., Rerat M., Casassa S., Baima J., Salustro S., Kirtman B. // Wires Comput. Mol. Sci. 2018. V.8. P. 1.

ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ ФУЛЛЕРЕНОВ И АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ИХ УЧАСТИЕМ¹

Саби́ров Д.Ш., Терентьев А.О., Кинзябаева З.С.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, просп. Октября, 141,
e-mail: diozno@mail.ru*

Молекулы фуллеренов и их производных характеризуются высокими значениями средней поляризуемости (α), которая влияет на физические и химические процессы в фуллеренсодержащих системах. В докладе представлен анализ теоретических (рассчитанных методами теории возмущений, функционала плотности, связанных кластеров и др.) и экспериментальных (эллипсометрия, интерферометрия и др.) значений α [1]. Для основных классов соединений фуллеренов приводятся корреляции «строение – α ». Например, в отличие от типичных органических соединений поляризуемость фуллеренов возрастает при переходе от изолированных молекул к кристаллической форме [2]. Обсуждается связь между средней поляризуемостью аддуктов $C_{60/70}X_n$, типом, числом и взаимным расположением аддендов X [3], а также эффекты экранирования инкапсулированных атомов в эндоэдральных комплексах фуллеренов [4].

Расчётные значения α используются для объяснения каталитических свойств фуллеренов, оценки фотовольтаической эффективности аддуктов $C_{60/70}$, изучения динамики эндо-атомов внутри фуллеренового каркаса, хроматографического поведения производных фуллеренов, астрохимических процессов с участием C_{60} и др. (см, например, [5–6]).

Список литературы:

1. Sabirov D. Sh. // RSC Adv. 2014. V. 4. P. 44996.
2. Munn R.W., Petelenz P. // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 392. P. 7.
3. Sabirov D.Sh., Tukhbatullina A.A., Bulgakov R.G. // Comput. Theor. Chem. 2012.V. 989. P. 18.
4. Саби́ров Д.Ш., Булгаков Р.Г. // Письма в ЖЭФТ 2010. Т. 92. P. 730.
5. Lopez-Andarias J., Bauza A., Sakai N., et al. // Angew. Chem. 2018. V. 130. P. 11049.
6. Sabirov D.Sh. // J. Phys. Chem. C 2016. V. 120. P. 24667.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-03-00716.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПИРАЗОЛОВ

Самигуллина З.С.^а, Борисевич С.С.^б, Бажин Д.Н.^в, Бургарт Я.В.^в, Хурсан С.Л.^б

^а Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия, e-mail: starwar82@yandex.ru

^б Уфимский институт химии УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

^в Институт органической химии им. И.Я. Постовского УРО РАН,
г. Екатеринбург, Россия

В настоящей работе проведено теоретическое моделирование реагентов, используемых для получения фторсодержащих конденсированных пиразолов – перспективных соединений для получения лекарственных и агрохимических препаратов (схема. 1).

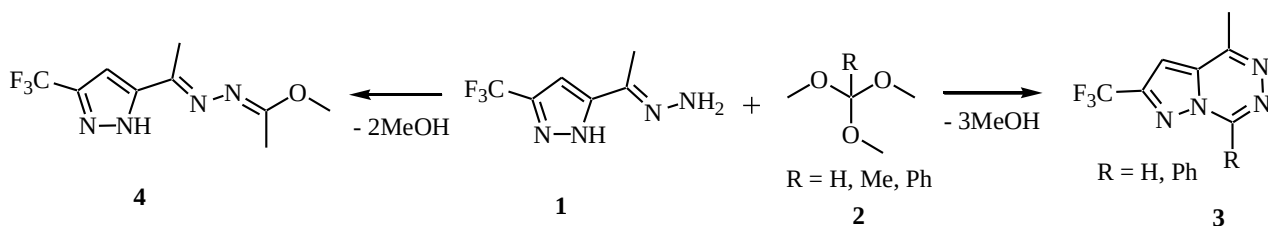


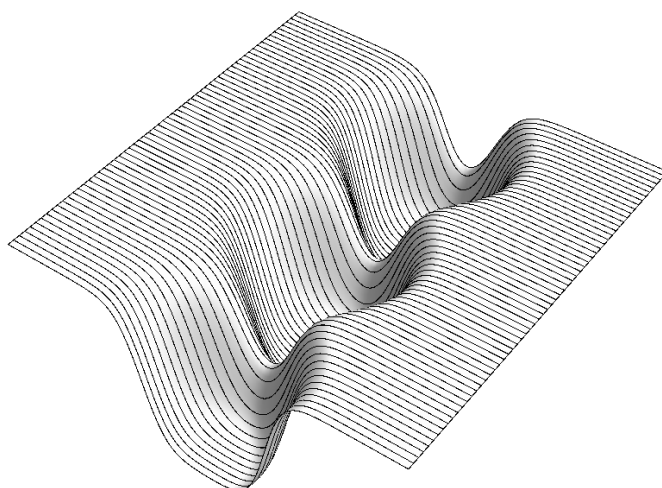
Схема. 1. Синтез фторсодержащих конденсированных пиразолов

Ранее было показано [1], что подобные реакции не всегда приводят к образованию конденсированных соединений. При взаимодействии пиразола с триметоксиметаном (ортоэфир 2, где R = Me) образуется ациклический продукт 4, тогда как реакция с ортоэфирами, где R = H, Ph, приводит к образованию желаемых продуктов 3. Объяснить причину различного поведения участников реакций на основании экспериментальных данных не представляется возможным. Поэтому с помощью квантово-химических методов расчета мы объясняем, как заместитель в реагенте 2 влияет на структуру конечного продукта.

Список литературы:

1. Бажин Д.Н., Кудякова Ю.С., Оноприенко А.Я., Слепухин П.А., Бургарт Я.В., Салоутин В.И. // Химия гетероциклических соединений. 2017. Т. 53(12). С. 1324.

Теория солитонов



ДВИЖЕНИЕ СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ «ЗАРЯД-СОЛИТОН» В МОЛЕКУЛЕ ДНК

Закирьянов Ф.К.

Бакирский государственный университет, г. Уфа, ул. З.Валиди, 32

e-mail: farni@rambler.ru

Известно, что конформационные возмущения в виде бризеров, возбуждаемые в РВ-модели ДНК, взаимодействуют с зарядами. При этом характерная длина смещения связанного состояния «бризер-заряд» составила в этой модели ~ 20 сайтов. Нами рассмотрена динамика переноса заряда в Y-модели молекулы ДНК, отличающейся от РВ-модели тем, что изменение конформации описывается не поперечным смещением нуклеотидов, а их вращением вокруг сахара-фосфатного остова. Начальное конформационное возмущение задаётся в виде солитонной пары "кинк-антикинк", центр которой приходится примерно на 50-й сайт молекулы ДНК (см. рис. 1). Заряд находился в пределах этого возмущения. После превращения пары "кинк-антикинк" в движущийся бризер связанное состояние «заряд-солитон» распадается. Как видно из рис. 1, расстояние, которое проходит солитон, несущий в себе заряд, до его превращения в бризер, растёт с уменьшением коэффициента взаимодействия между конформационным возмущением и плотностью заряда χ , и может достигать ~ 80 сайтов.

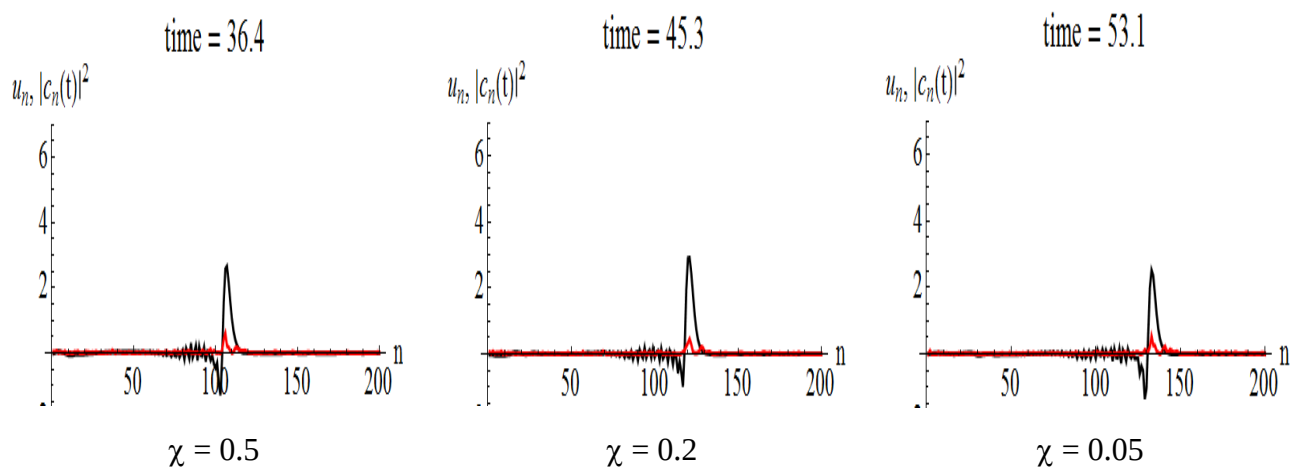


Рис. 1. Зависимость прохождения заряда от параметра χ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
ДИНАМИЧЕСКОЙ БИФУРКАЦИЕЙ СЕДЛО-УЗЕЛ**

Калякин Л.А.

*Институт математики с ВЦ УФИЦ РАН, Уфа, ул. Чернышевского, 112,
e-mail: klenru@mail.ru*

На уровне обыкновенных дифференциальных уравнений эффекты быстрой перестройки зачастую объясняются в терминах теории бифуркаций. Перестройки связываются с резкими изменениями структуры фазовых портретов, что случается при переходе параметров через критические значения; например, при слиянии неподвижных точек. Рассматривается полулинейное дифференциальное уравнение второго порядка, параметры которого медленно меняются. При замороженных параметрах соответствующее автономное уравнение имеет неподвижные точки: седло и устойчивые узлы. При деформации параметров пара седло-узел сливается. Строится асимптотическое решение вблизи такой динамической бифуркации. Выяснено, что в узком переходном слое главные члены асимптотики описываются уравнениями Риккати и КПП. Важным результатом является установление факта затягивания устойчивости: момент срыва значительно сдвигается от момента бифуркации. Точные утверждения проиллюстрированы результатами численных экспериментов.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ И РАСПАД π -КИНКА В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОН С ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ НАКАЧКОЙ¹

Киселев О.М., Новокшенов В.Ю.

*Институт математики УФИЦ РАН, Уфа, ул. Чернышевского 112,
e-mail: novik53@mail.ru.*

Рассматривается уравнение синус-Гордон с высокочастотной параметрической накачкой и слабой диссипативной силой

$$u_{tt} - u_{xx} + \gamma u_t + A(t\varepsilon^{-1}) \sin u = \eta(t), \quad -l < x < l,$$

где $\varepsilon, \gamma \ll 1$, а функции A, η периодичны с нулевым средним. Показано, что при $u_x(-l, t) = u_x(l, t) = 0$ формируется π -кинк, неустойчивый по времени

$$u(x, t) = 2 \arctan \left[\exp \left(D \frac{x - ct}{\sqrt{1 - c^2}} \right) \right], \quad D, c = \text{const.}$$

Методом усреднения по быстрым колебаниям и применением канонических преобразований гамильтониана уравнения синус-Гордон изучена нестабильность π -кинка и показано, что время его распада оценивается как $O(\varepsilon^{-3})$, то есть пропорционально кубу частоты накачки [1]. Эта оценка находится в хорошем согласии с численными экспериментами статьи [2].

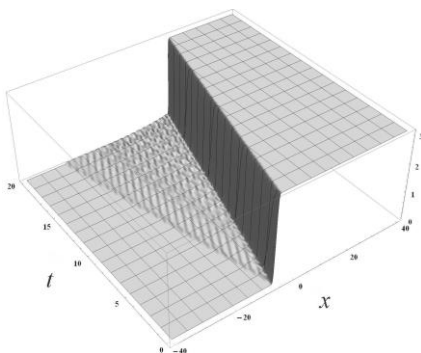


Рис. 1. Медленный распад π -кинка

Список литературы:

1. Киселев О.М., Новокшенов В.Ю. // Итоги науки и техники. Современная математика и ее приложения 2018. Т. 152. С.53.
2. Zharnitsky V., Mitkov I., Gronbech-Jensen N. // Phys Rev. E. 1998.V. 58. R52–R55.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект № 17-11-01004

КИНК-ПРИМЕСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА С УЧЁТОМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ И НЕОДНОРОДНОГО ЗАТУХАНИЯ¹

Кудрявцев Р.В.^а, Гумеров А.М.^б, Самсонов К.Ю.^в, Екомасов Е.Г.^б

^а*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, Уфа, хс.89@mail.ru*

^б*Башкирский государственный университет, Уфа*

^в*Тюменский государственный университет, Тюмень*

Уравнение синус-Гордона (УСГ) имеет решения в виде солитонов – уединённых волн, сохраняющих свою форму и скорость. Для более адекватного моделирования широкого круга физических систем в различных разделах физики в УСГ вводятся дополнительные параметры. Во многих публикациях изучается взаимодействие топологического солитона – кинка – с пространственной неоднородностью в виде примеси, приводящее к возбуждению на ней примесной моды [1,2]. Для качественного понимания изучаемого процесса сохраняют актуальность аналитические исследования. В нашей работе с помощью метода коллективных переменных получена система дифференциальных уравнений, качественно описывающая одномерную резонансную динамику кинка УСГ и колебания возбуждаемых им примесных мод в модели с произвольным числом разных точечных примесей, расположенных на произвольном расстоянии друг от друга, в присутствии внешней силы и неоднородной диссипации. С помощью полученных уравнений построены и проанализированы зависимости координаты центра кинка и амплитуд примесных мод от времени в частных случаях и их возможное применение в теории магнетизма.

Список литературы:

1. Екомасов Е.Г., Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В. // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т.101. №12. С.935–939.
2. Ekomasov E.G., Gumerov A.M., Kudryavtsev R.V. // J. Comp. Appl. Math. 2017. T.312. С.198–208.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-31-00122

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ АЛГЕБРЫ В ЗАДАЧЕ КЛАССИФИКАЦИИ ИНТЕГРИРУЕМЫХ ДВУМЕРИЗОВАННЫХ ЦЕПОЧЕК

Кузнецова М.Н., Хабибуллин И.Т.

*Институт математики с ВЦ УФИЦ РАН, г. Уфа,
e-mail: mariya.n.kuznetsova@gmail.com, habibullinismagil@gmail.com*

Настоящая работа является продолжением серии работ [1], [2], [3], посвященных задаче классификации интегрируемых уравнений типа двумеризованной цепочки Тоды

$$u_{n,xy} = f(u_{n+1}, u_n, u_{n-1}, u_{n,x}, u_{n,y}), \quad -\infty < n < +\infty.$$

Предполагается, что функция $f = f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$ является аналитической в некоторой области $D \subset \mathbb{C}^5$. Искомая функция $u_n = u_n(x, y)$ зависит от вещественных переменных x, y и целого n .

В качестве критерия интегрируемости понимается наличие бесконечного числа редукций в виде систем гиперболического типа, интегрируемых в смысле Дарбу. При исследовании гиперболических систем применяются характеристические алгебры Ли-Райнхарта.

В данной работе описаны интегрируемые случаи цепочек вида

$$u_{n,xy} = p(u_{n+1}, u_n, u_{n-1})u_{n,x} + q(u_{n+1}, u_n, u_{n-1})u_{n,y} + q(u_{n+1}, u_n, u_{n-1}), \\ -\infty < n < +\infty,$$

при условии, что хотя бы одна из производных не равна нулю:

$$\frac{\partial p}{\partial u_{n+1}} \neq 0, \frac{\partial p}{\partial u_{n-1}} \neq 0, \frac{\partial q}{\partial u_{n+1}} \neq 0, \frac{\partial q}{\partial u_{n-1}} \neq 0.$$

Список литературы:

1. Habibullin I.T. // Physica Scripta 2013. V. 87. № 6. P. 065005.
2. Habibullin I.T., Poptsova (Kuznetsova) M.N // SIGMA 2017. V. 13. P. 073.
3. Попцова М.Н., Хабибуллин И.Т. // УМЖ 2018. Т. 10. № 3. С.86.

**АВТОРЕЗОНАНСНАЯ МОДЕЛЬ УПРАВЛЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ
ДИНАМИКОЙ ЛОКАЛИЗОВАННОЙ МАГНИТНОЙ
НЕОДНОРОДНОСТИ В ФОРМЕ БРИЗЕРА В ТРЕХСЛОЙНОЙ
АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРЕ¹**

Назаров В.Н.^а, Екомасов Е.Г.^б, Харисов А.Т.^б, Гумеров А.М.^б

^а *ИФМК УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 151,
e-mail: nazarovvn@gmail.com*

^б *БашГУ, 450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32*

Нелинейное дифференциальное уравнение синус-Гордона постоянно привлекает большое внимание исследователей. Решения уравнения в виде бризеров и солитонов описывают многие процессы в физике твердого тела, например, динамику перемагничивания. В данной работе описывается авторезонансное параметрическое возбуждение магнитного бризера в трехслойном ферромагнетике с уменьшенным значением анизотропии в тонком слое полями переменной частоты и малой амплитудой [1] с использованием явной схемы интегрирования. Показано, что в постоянном магнитном поле достаточно большой величины направленном против направления намагниченности в его центре происходит переключение направления намагниченности в солитоне. В переменном поле специального вида и малой по величине амплитуды можно резонансно повысить амплитуду магнитной неоднородности бризерного типа. Кроме того, возможна генерация магнитного бризера с увеличением амплитуды в поле тонкого слоя из уравнений движения, сформулированных в виде уравнения синус-Гордона в модели с включением примесей и решаемой с помощью численных методов [2].

Список литературы:

1. Назаров В.Н., Екомасов Е.Г. // Письма о материалах 2018. Т. 8. № 2. С. 158.
2. Ekomasov E.G., Gumerov A.M., Kudryavtsev R.V. // Journal of Computational and Applied Mathematics 2017. V. 312. P. 198.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-31-00122

О МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИКИ ДНК В ВЯЗКОЙ СРЕДЕ

Низямова А.Р., Закирьянов Ф.К.

*Бакирский государственный университет, г. Уфа ул. Заки Валиди, 32,
e-mail: alya.nizyamina.96@mail.ru*

ДНК является одной из важнейших молекул живых организмов, которая отвечает за хранение и передачу генетической информации, записанной в виде определенной последовательности нуклеотидов двойной спирали. Актуальным является моделирование нелинейной динамики. Анализ литературы по моделям приводит к выводу, что их можно условно разделить на две группы. Первая группа - основной вклад в динамику дают вращения оснований вокруг сахаро-фосфатного остова [1], которые описываются уравнением типа синус-Гордон (УСГ) – У-модели. Вторая группа - основной вклад в динамику вносят поперечные смещения оснований в направлении перпендикулярном осям

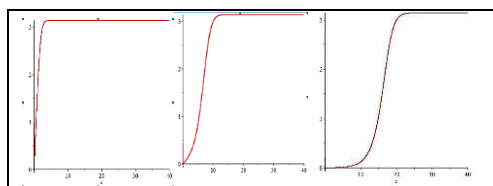


Рис 1. Динамика движения кинка в модели ДНК с большой вязкостью

сахаро-фосфатного остова. Такие модели приводят к уравнениям типа нелинейное уравнение Клейна-Гордона (УКГ) – РВ-модели [2]. Наибольший интерес для нас представляют вращательные движения оснований вокруг сахаро-фосфатного остова ДНК, которые

описываются следующей системой уравнений:

$$I_1 u_{tt} - k_1 a^2 u_{zz} + V_1 \sin u + \gamma_1 u_t - \beta_1 \sin(u - v) = 0$$

$$I_2 v_{tt} - k_2 a^2 v_{zz} + V_2 \sin v + \gamma_2 v_t - \beta_2 \sin(v - u) = 0$$

Нами была разработана и отлажена программа численных расчётов и по ней получены графики движения кинка в зависимости от начальных данных.

Список литературы:

1. Englander S.W., Kallenbach N.R., Heeger A.J., Litwin A. // PHAS USA 77. 1990-P. 7222-7220.
2. Peyrard M., Bishop A.R. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2755.

О СОЛИТОННОЙ МОДЕЛИ СОБСТВЕННОГО МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

Салимов Р.К., Екомасов Е.Г

БашГУ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: salems665@yandex.ru.

Обычно при рассмотрении неоднородностей уравнения Клейна-Гордона рассматривают неподвижные неоднородности. Более интересным было бы рассмотреть систему подвижных неоднородностей, взаимодействующих с полем. Интерес к таким системам вызван тем, что на притягивающих неоднородностях возможны локализованные состояния. Если же подвижную притягивающую неоднородность достаточно сильно ускорить, то естественно предположить, что локализованное состояние поля не удержится на неоднородности. Если неоднородность имеет некоторую массу, то состояние примеси с локализованным на ней полем будет добавлять к этой массе некоторую эффективную поправку. Далее, в зависимости от величины ускорения таких неоднородностей можно предположить два состояния с двумя разными эффективными массами таких неоднородностей и переходы между этими состояниями. В работе рассмотрены подвижные релятивистские неоднородности, обладающие массой. Показано, что при малой массе покоя неоднородности, неоднородность не может находиться в состоянии минимальной энергии с нулевой скоростью.

Список литературы:

1. Салимов Р.К. // Письма в ЖЭТФ 2019. Т. 109. №. 7. С. 504.

**КВАНТОВАНИЕ ДВУХ ПЕРВЫХ УРАВНЕНИЙ ПЕНЛЕВЕ
ПОСРЕДСТВОМ АВТОНОМНЫХ
ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ С ДВУМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ**

Сулейманов Б.И.

*Институт математики с вычислительным центром УФИЦ РАН,
г. Уфа, ул. Чернышевского, 112, e-mail: bisul@mail.ru*

Выписаны решения двух временных уравнений Шрёдингера $i\hbar\Psi_t = H(x_1, x_2, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, -, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2})\Psi$, определяемых гамильтонианами $H(q_1, q_2, p_1, p_2)$ автономных гамильтоновых систем с двумя степенями свободы, решения каждой из которых явным образом выражаются через решения первого $u'' = 6u^2 + t$ и второго $u'' = 2u^3 + tu$ уравнений Пенлеве. Данные решения уравнений Шрёдингера явным образом выражены через решения линейных уравнений метода изомонодромных деформаций, условием совместности которых как раз и являются первое и второе уравнения Пенлеве. Обсуждается вопрос о подмножестве этих решений уравнений Шрёдингера, экспоненциально убывающих при $x_1^2 + x_2^2 \rightarrow \infty$.

**ТИПИЧНАЯ ПРОВАЛЬНАЯ ОСОБЕННОСТЬ
СБОРКИ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ
ОДНОМЕРНОГО ИЗОЭНТРОПИЧЕСКОГО ГАЗА**

Сулейманов Б.И.^а, Шавлуков А.М.^б

^а *Институт математики с вычислительным центром РАН,
г. Уфа, ул. Чернышевского, 112, e-mail: bisul@mail.ru;*

^б *Башкирский государственный университет,
г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: aza3727@yandex.ru.*

Исследованы решения системы уравнений движения одномерного изоэнтропического газа

$$\rho_T + (\rho v)_X = 0, \quad v_T + vv_X + \alpha(\rho)\rho_X = 0 \quad (\alpha(\rho) > 0) \quad (1)$$

при малой плотности $\rho = o(1)$. Описана катастрофа сборки формального асимптотического решения (1) при $\rho \rightarrow 0$ (эта особенность аналогична особенностям, исследованной в [2] для случая $\alpha(\rho) < 0$). В частном случае уравнений мелкой воды ($\alpha(\rho) \equiv 4$) выписано явное эталонное решение для такой особенности. Данное решение при $\rho \geq 0$ задается корнем канонического кубического уравнения сборки $X + vT + 5v^3 = 0$ и формулой $\rho = \frac{-T-3v^2}{12}$.

В терминах этого эталонного решения члены вышеупомянутого асимптотического решения выписываются явно. В той области, где для эталонного решения формально $\rho > 0$ соответствующее решение (1) полагается тождественно равным нулю.

Список литературы:

1. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. / Кн. 1. Пер. с англ. М.: Мир, 1984. 350 с.
2. Кудашев В.Р., Сулейманов Б.И. // Письма в ЖЭТФ 1995. Т. 62. № 4. С.358.

ПРЯМОЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ПАРЫ ЛАКСА

Хабибуллин И.Т., Хакимова А.Р.

Институт математики с вычислительным центром УФИЦ РАН,

г. Уфа, ул. Чернышевского, 112,

e-mail: habibullinismagil@gmail.com, aigul.khakimova@mail.ru

Доклад основан на результатах, полученных в наших работах [1] - [5], в которых разработан способ построения представления Лакса, использующий понятие симметрии. Кратко изложим суть метода.

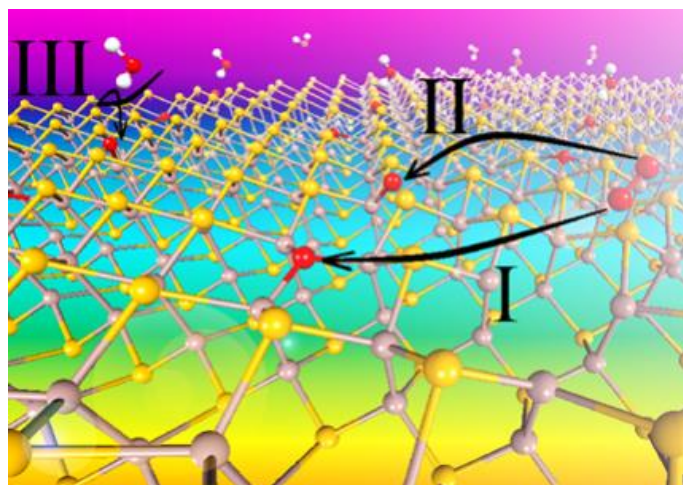
В качестве первого уравнения пары Лакса берется линеаризация рассматриваемого нелинейного уравнения. Вторым уравнением пары будет обыкновенное дифференциальное уравнение совместное с линеаризованным уравнением. Это ОДУ можно выбрать так, что полученная пара действительно будет парой Лакса для исходного нелинейного уравнения, в том смысле, что она совместна тогда и только тогда, когда выполняется это уравнение. Полученная пара Лакса имеет более высокий порядок, чем обычная пара, однако понижением порядка она сводится к обычной.

Эффективность метода построения пары Лакса апробирована на многочисленных примерах (см. [1] - [5]).

Список литературы:

1. Habibullin I.T., Khakimova A.R., Poptsova M. N // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2016. V. 49. № 3. P. 35.
2. Хабибуллин И.Т., Хакимова А.Р. // Теоретическая и математическая физика. 2017. Т. 191. № 3. С. 369.
3. Habibullin I.T., Khakimova A.R. // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2016. V. 50. № 30. P. 19.
4. Хабибуллин И.Т., Хакимова А.Р. // Теоретическая и математическая физика. 2018. Т. 196. № 2. С. 294.
5. Habibullin I.T., Khakimova A.R. // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2018. V. 51. № 42. P. 22.

Наноструктурные материалы



ВЛИЯНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И ТРАНСФОРМАЦИИ СТРУКТУРЫ НА НЕМОНОТОННЫЙ ВИД ПРОЧНОСТИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СПЛАВА В ПРОЦЕССЕ КВД

Аксенов Д.А.^{а,в}, Фаизова С.Н.^б, Рааб Г.И.^в

^а *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа*

^б *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*

^в *Институт физики перспективных материалов при УГАТУ, Уфа*
e-mail: AksyonovDA@mail.ru

Известно, что в условиях больших пластических деформаций в низколегированных сплавах системы Cu-Cr-Zr происходят два кинетически противоположных фазовых процесса –деформационно-стимулированный распад пересыщенного твердого раствора (ТР) и деформационно-индуцированное растворение дисперсных частиц вторых фаз [1-3].

В данной работе сделана попытка определить характер и степень влияния накопленной деформации на трансформацию структуры и фазовые превращения в низколегированной хромовой бронзе в процессе деформации методом кручения под высоким давлением (КВД). Для этого, было получено состояние с предельно низкой концентрацией пересыщенного твердого раствора, для того чтобы исключить роль деформационно-стимулированного распада ТР в формировании структуры и свойств материала. Показано, что изменение свойств материала имеет немонотонный характер в зависимости от степени накопленной деформации в процессе КВД. Данный эффект напрямую связан с поочердным доминированием одного из двух фазовых процессов во время деформации. Представлена качественная модель фазовых превращений и структурных изменений в зависимости от степени накопленной деформации.

Список литературы:

1. Faizov I. A., et al //Letters on materials 2018. V. 8. Is. 1. P 110.
2. Faizova S.N., et al // Russian physics journal 2016. V. 59. Is. 1. P. 116.
3. Фаизов И.А. // Вестник тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки 2016. Т. 21. № 3. С. 1387.

ГРАДИЕНТНАЯ СТРУКТУРА В ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ МЕЗОМЕХАНИКИ

Алешин Г.Н., Кодиров И.С., Рааб Г.И., Рааб А.Г.

УГАТУ, г. Уфа, e-mail: galioshin@mail.ru

Как следует из представлений физической мезомеханики [1, 2], первичное пластическое течение в нагруженном твердом теле развивается на его поверхности. Именно такой характер пластического течения имеет место при деформационной обработке прутков сплавов волочением со сдвигом (ВсС). При этом на поверхности прутков из-за активизации сдвиговой деформации вследствие влияния со стороны вращающихся эксцентриковых фильер образуется сверхпрочный слой материала толщиной $\sim$ до 100 мкм и более. Из-за наложения вращения эксцентриковых фильер на процесс волочения развиваются нелинейные волновые процессы локализованного пластического течения на мезоуровне в поверхностных слоях, что приводит к формированию сверхпрочного ультрамелкозернистого состояния в приповерхностном слое.

В процессе ВсС эти волны квазипериодически проникают в объём материала, создавая локализованные участки деформации по всему объёму прутков, о чём свидетельствуют, в частности, периодические колебания величины микротвёрдости при её измерении в поперечном сечении деформированных прутков. Известно, что если специальным воздействием на поверхностный слой существенно снизить его сдвиговую устойчивость, то в нем развиваются некристаллографические сдвиги по сопряженным направлениям, а также нелинейные волны пластического течения [2]. В подобных условиях задерживается развитие локализации деформации образца на макромасштабном уровне.

Список литературы:

1. Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. - Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1985. - 229 с.
2. Балахонов Р.Р. и др. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах // под ред. В. Е. Панина Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2006. – 520 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО ПРОЦЕССА ИЗГОТОВЛЕНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КОНТАКТНЫХ ПРОВОДОВ¹

Асфандияров Р.Н.^{а,б}, Рааб Г.И.^б, Аксенов Д.А.^{а,б}

^а *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа*

^б *ФГБОУ ВО УГАТУ, г. Уфа*

e-mail: a.r.n@list.ru

На высокоскоростных железнодорожных магистралях наиболее нагруженным элементом, определяющим их надежность и долговечность, является контактный провод. Целью представленной работы было моделирование комбинации процессов интенсивной пластической деформации (ИПД) и формообразования, ведущей к повышению комплекса свойств. В ходе исследований проведено моделирование термомеханической обработки ($T_{\text{нач.}} = 300\text{ }^{\circ}\text{C}$, $v = 14\text{ мм/с}$) с получением лабораторных образцов. Показано, что в заготовке формируется однородное деформированное состояние, при этом степень накопленной деформации находится в диапазоне $\epsilon = 5,5 \dots 6,5$ единиц. В процессе деформации преобладают сжимающие напряжения. Металлографические исследования свидетельствуют о формировании в образцах смешенной структуры зеренно-субзеренного типа со средним поперечным размером фрагментов менее одного микрона. Временное сопротивление данных образцов после термической обработки составило $560 \pm 20\text{ МПа}$, относительное удлинение после разрыва $23 \pm 2\text{ \%}$ электропроводность $76 \pm 2\text{ \% IACS}$. Таким образом, комбинирование процессов ИПД и последующего формообразования позволяет одновременно повышать как прочностные, так и пластические свойства. Полученные результаты являются основой для более углубленного исследования устойчивых зависимостей между температурно-скоростными условиями и комплексом физико-механических свойств.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №19-19-00432.

**МЕХАНОСИНТЕЗ НАНОКОМПОЗИТОВ СИСТЕМЫ
«МЕТАЛЛ-КЕРАМИКА», ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ, ПРОИСХОДЯЩИХ
НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА МАТРИЧНОЙ И АРМИРУЮЩЕЙ ФАЗ,
ПРИ СИНТЕЗЕ ПОРОШКА И ЕГО ПОСЛЕДУЮЩЕМ НАПЫЛЕНИИ**

Бобкова Т.И.

*НИЦ Курчатовский институт - ЦНИИ КМ Прометей, г. Санкт-Петербург,
e-mail: Bobkova_TI@crism.ru*

Механические характеристики композиционных порошков (КП) имеют прямую зависимость от структуры и свойств границы раздела составляющих фаз. При переходе к наноразмерной конфигурации наполнителя наблюдается существенное изменение свойств материала. Это явление обусловлено снижением дефектности при увеличении дисперсности. Для получения КП с изотропными свойствами по всему объему чаще всего применяются металлическую матрицу с равномерно распределённой нульмерной армирующей фазой (5-200 нм). Вопрос равномерного и контролируемого распределения армирующих нанопорошков в металлической матрице является наиболее важным для исследователей и решается различными способами. В НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» равномерное и контролируемое распределение армирующей фазы в матричной достигается в процессе механосинтеза КП с помощью метода высокоскоростного истирания. В качестве матричных материалов опробованы Al, Cu, Fe, Ni, Ti и их сплавы, в качестве армирующих материалов керамические нанопорошки (Al_2O_3 , TiN, TiCN, TiO_2 , Si_3N_4 , NbB_2 и др.). Синтезируемые КП успешно применяются для напыления функциональных покрытий газотермическими методами. В таких композиционных покрытиях основную нагрузку принимает на себя матрица, наполнителю отведена роль-препятствовать распространению пластической деформации. За счет напыления КМ формируется уникальный комплекс свойств (микротвердость до 12 ГПа, адгезия выше 50 МПа, пористость ниже 1% и высокие показатели износо- и коррозионной стойкости).

НАНОСТРУКТУРНЫЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ С МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Валиев Р.З.

*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: ruslan.valiev@ugatu.su*

Многочисленные исследования последних лет свидетельствуют, что наноструктурирование металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) открывает возможность значительного повышения их механических и функциональных свойств. При этом свойства полученных наноматериалов определяются не только формированием ультрамелких зерен, но и структурой их границ. В докладе представлены результаты исследований и обсуждения принципов зернограницной инженерии объемных наноматериалов, связанной с созданием различных границ зерен (малоугловых и высокоугловых, специальных и общего типа, равновесных и неравновесных, а также с присутствием зернограницных сегрегаций и выделений) в ультрамелкозернистых металлах. Показано, что формирование разных типов границ зерен значительно влияет на механические свойства наноструктурных металлов и сплавов, особенно, на хрупкость и пластичность, усталость и сверхпластичность. Особый интерес представляет использование зернограницной инженерии для создания наноматериалов с так называемыми многофункциональными свойствами, сочетающими высокие механические и функциональные свойства (коррозионная и радиационная стойкость, электропроводность и т.д.). Обсуждаются физическая природа и применения многофункциональных наноматериалов в инновационных разработках, направленных на их использование в медицине и технике.

СОНОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И СОНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПОРОНАСЫЩЕННЫХ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ¹

Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия
450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября, д. 141, e-mail: ink@anrb.ru*

Описан синтез и регистрация сонолюминесценции нанодисперсных суспензий SiO_2 , содержащих в порах элементную серу и додекокарбонил рутения, в воде. Водная суспензия готовилась сонодиспергированием порошка диоксида кремния под действием ультразвука частотой 20 кГц с последующей фильтрацией и выделением нанодисперсной фракции со средним размером частиц 10-35 нм. Насыщение пор диоксида кремния серой и додекокарбонилом рутения проводили путем их предварительного растворения в хлороформе. Для указанных суспензий зарегистрированы спектры однопузырьковой сонолюминесценции, содержащие как молекулярные (SiO), так и атомарные (S и Ru) линии. Регистрация данных линий доказывает попадание поронасыщенных наночастиц SiO_2 в объем пузырька, где под воздействием высокой температуры наночастицы разлагаются с генерацией атомов S и Ru с последующим их возбуждением при соударениях с другими частицами в горячем газовом ядре пузырьков.

Полученные спектры сонолюминесценции были использованы для оценки электронных температур в пузырьке методом сравнения экспериментально полученных и программно смулированных спектров. В зависимости от акустического давления эти температуры для пузырька в воде менялись от 7500 до 8300 К.

Регистрация спектров излучения поронасыщенных наночастиц диоксида кремния может быть перспективна как люминесцентный метод контроля над содержанием поронасыщающих веществ в гетерогенных катализаторах на основе SiO_2 .

¹ Работа выполнена в рамках государственного задания № АААА-А19-119022290005-5

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ Al СПЛАВОВ В ЭЛЕКТРОЭНЕРГЕТИКЕ

Гатауллина М.В.^а, Шакиров Р.Г.^б, Гундеров Д.В.^в

^а Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа,

^б ООО «Башкирэнерго», г. Уфа, ул. Комсомольская, 126,

^в Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа,

e-mail: mariagataullina1994@gmail.com

Рост потребления электроэнергии требует увеличения пропускной способности электрических сетей, что возможно за счёт замены на существующих линиях традиционных сталеалюминиевых проводов (АС) на провода нового поколения с большей электропроводностью

Исследования показали, что методами интенсивной пластической деформации (ИПД) в Al сплавах (Al-Mg-Si) возможно сформировать наноструктурные состояния (НС) и повысить одновременно их прочность и электропроводность [1], поскольку границы зерен эффективно увеличивают прочность, а электросопротивление снижается вследствие более глубокого распада твердого раствора в НС структурах. Традиционные сплавы системы Al-Mg-Si (ABE, 6101, 6201) имеют предел прочности (σ_B) до 295 МПа, а удельное электрическое сопротивление (УЭС) 0,03450 Ом*мм²/м, (50 % IACS). На НС сплавах Al-Mg-Si, достигнута **прочность 400 МПа**, УЭС до 0.0297 Ом*мм²/м [1]. Механические характеристики НС Al-сплавов, их повышенная электропроводность и меньший удельный вес позволяет создать провода для замены АС – проводов, обеспечивающих повышение пропускной способности линий на 80 % без дорогостоящей замены опор.

Список литературы:

1. Sabirov M.Yu., Murashkin R.Z., Valiev R.Z. // Mater. Sci. Eng. 2013. A. 560 P. 1-24.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ОБЪЕМНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Zr, ПОДВЕРГНУТЫХ ИПДК¹

Гундеров Д.В.^{а,б}, Чуракова А.А.^{а,б}, Астанин В.В.^б, Асфандияров Р.Н.^{а,б},
Болтынюк Е.В.^в, Убыйвовк Е.В.^в, Муллаянов А.И.^г, Валиев Р.З.^{б,в}

^а *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа*

^б *Уфимский Государственный Авиационный Технический Университет, г. Уфа*

^в *Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург*

^г *Башкирский Государственный Университет, г. Уфа*

e-mail: dimagun@mail.ru

Интенсивная пластическая деформация кручением (ИПДК) является эффективным способом трансформации структуры аморфных материалов при сохранении их метастабильности. В настоящей работе ИПДК подвергли объемное металлическое стекло (ОМС) $Zr_{52,5}Cu_{17,9}Ni_{14,6}Al_{10}Ti_5$, (обозначение Vit105, исходный пруток диаметром 10 мм, длиной 50 мм). ОМС после ИПДК сохраняет аморфную структуру. Анализ РСА показывает, что ИПДК ОМС приводит к росту уширения (FWHM) основного гало, сдвигу центра тяжести гало, что свидетельствует о росте первой координационной сферы R, росте свободного объема и неравновесности аморфной фазы. При испытаниях на растяжение исходные ОМС и ОМС после ИПДК разрушаются хрупко, что обычно для аморфных материалов. Напряжение хрупкого разрушения σ_p составляет около 1700 МПа. Испытания на трехточечный изгиб – более «мягкая» схема, чем растяжение. Для проведения испытаний ОМС после ИПДК использована оригинальная установка испытаний на трехточечный изгиб малых образцов, созданная в БашГУ, которая позволила впервые провести испытания на образцах размером 10x1x0,5 мм, вырезанных из ОМС, подвергнутых ИПДК. При испытаниях на трехточечный изгиб σ_p превышает 3000 МПа и фиксируется пластическое течение в ОМС образцах и до, и после ИПДК. В докладе сделан некоторый анализ закономерностей изменения пластичности аморфных материалов при изменении структурного состояния.

¹ Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ 17-08-00974.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРУ СПЛАВА $Ti_{49}Ni_{51}$ В КЗ СОСТОЯНИИ

Дорош И.В., Чуракова А.А.

*Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, г. Уфа, Карла Маркса, 12, e-mail: mikki.aee@mail.ru*

Сплавы на основе никелида титана $TiNi$ принадлежат к классу функциональных материалов с эффектами памяти формы - ЭПФ, обусловленными термоупругими мартенситными превращениями, протекающими в диапазоне температур, близких к комнатным. Данные сплавы широко используются в медицине и технике. Известно, что цикл мартенситных превращений (МП) при охлаждении и нагреве приводит к генерации дислокаций в кристаллической решетке. Понимание влияния многократных циклов «охлаждения и нагрева» ниже и выше точек мартенситного превращения – термоциклирования (ТЦ) на структуру и свойства материалов имеет большое значение для сплавов $TiNi$ и изделий из них.

Влияние термоциклирование на структуру и свойства сплава $TiNi$ изучено достаточно полно, однако не в полной мере изучено влияние ТЦ с последующим старением.

ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ¹

Жиляев А.П., Песин А.М., Пустовойтов Д.О.

*Лаборатория «Механика градиентных наноматериалов»,
Магнитогорский государственный университет им. Г.И. Носова, 455000
Магнитогорск, Россия, e-mail: alexz@anrb.ru.*

Существует значительный интерес к разработке металлических материалов со сверхмалым размером зерна, направленных на конструкционные применения, где требуются исключительные механические свойства. Это можно успешно осуществить путем измельчения структуры металлов и сплавов с применением методов интенсивной пластической деформации (ИПД) [1]. Один из новых методов основан на создании высоконагруженной деформации путем асимметричной прокатки (AR). В докладе представлены последние результаты по микроструктуре и микротекстуре чистых ГЦК металлов (алюминия и меди), полученных данным методом. Приведено сравнение с известными данными по Al и Cu, полученными традиционными методами интенсивной пластической деформации (кручение под высоким давлением [2] и равноканальное угловое прессование [3]).

Список литературы:

1. Valiev R.Z., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Bulk nanostructured materials: Fundamentals and applications. New Jersey: Wiley & Sons (2014) 450 p.
2. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. // Progr. Mater. Sci. 2008. V. 53. P. 893.
3. Valiev R.Z., Langdon T.G. // Progr. Mater. Sci. 2006. V. 51. P. 881.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и Высшего образования Российской Федерации (Грант 14.Z50.31.0043).

МИКРОТВЕРДОСТЬ ХОЛОДНОКАТАНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ ЛАТУНЕЙ¹

Зайнуллина Л.И., Александров И.В.

*Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа,
e-mail: lele4ka.06@mail.ru*

Научно-технический прогресс требует создания новых материалов, характеризующихся повышенными конструкционными и функциональными свойствами. В последние годы разработаны методы получения объемных наноструктурных металлических (ОНМ) материалов с использованием интенсивной пластической деформации. Данные материалы обладают комплексом привлекательных свойств и, в связи с этим, широкими перспективами промышленного применения. Однако, как правило, данные материалы получают в виде цилиндрических заготовок или заготовок, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда. В связи с этим, актуальным является вопрос придания данным заготовкам той формы, которая традиционно используется на промышленных предприятиях.

Холодная прокатка является традиционным способом получения листовых заготовок в отечественной и зарубежной промышленности. Однако, вопрос получения листовых заготовок из наноструктурных материалов является открытым.

В настоящем докладе представлены результаты исследования влияния степени обжатия при холодной прокатке на микротвердость сплавов системы Cu-Zn. Сделаны выводы о характере и механизмах влияния энергии дефекта упаковки на значения микротвердости для разных микроструктурных состояний исследованных латуней.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации проекта №16.1969.2017/4.6

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ВРЕМЕНИ СТАРЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА $\text{Ti}_{49.14}\text{Ni}_{50.86}$ ¹

Каюмова Э.М.^а, Чуракова А.А.^{а,б}

^а *Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, г. Уфа, Карла Маркса, 12*

^б *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, Пр. Октября, 151
e-mail: elina770298@yandex.ru*

Одной из быстро растущих областей применения сплавов TiNi являются технологии микроэлектромеханических систем (МЭМС), которые широко используются в автомобильной промышленности и биомедицинской инженерии. Материалы с заданными физико-механическими свойствами становятся все более востребованными. В то же время важно, чтобы миниатюрный исполнительный механизм обладал высокой усталостной долговечностью. В этом отношении сплавы TiNi с эффектами памяти формы и сверхэластичности являются одними из наиболее перспективных материалов. Материалом исследования является сплав TiNi с высоким содержанием Ni. Проведенные исследования влияния температуры и времени старения показали, что при увеличении температуры с 400 °С до 500 °С позволяет незначительно повысить микротвердость сплава. В то же время при сравнении значений микротвердости при одной температуре, но различной длительностью отжига ($t=5$ мин ... 1 час), показали, что в случае $T=400$ °С наблюдается падение микротвердости до 227 ± 2 Нв, а при температуре 500 °С повышение значений микротвердости на 15 %. Проведены также исследования изменения структуры в данных состояниях.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Республики Башкортостан Российской Федерации для молодых ученых (№28 ГР от 07.03.2019).

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА ХИМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ НОВЫХ ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ (ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ)¹

Кистанов А.А.^а, Устюжанина С.В.^а, Хадиуллин С.Х.^б, Дмитриев С.В.^а,
Корзникова Е.А.^а

^а *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. С. Халтурина, 39,
450001, Уфа, Россия, e-mail:andrei.kistanov.ufa@gmail.com*

^б *Уфимский государственный авиационный технический университет,
ул. К. Маркса, 12, 450008, Уфа, Россия*

В настоящее время актуальной задачей является получение новых двумерных (2D) наноматериалов. Однако они обладают высокой химической активностью, ввиду чего могут подвергаться нежелательному воздействию окружающей среды, приводящему к их окислению и разрушению [1]. В связи с этим, активно исследуются механизмы деградации 2D наноматериалов и ведется поиск методов их защиты в процессе производства и эксплуатации.

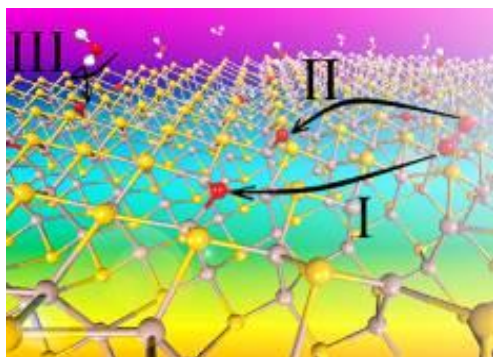


Рис. 1. Этапы окисления фосфорена и InSe.

В данной работе, с использованием теории функционала плотности [2] изучаются механизмы окисления двух перспективных 2D наноматериалов, фосфорена и InSe. Показано, что окисление фосфорена и InSe в условиях окружающей среды происходит в три этапа (см. рис. 1): I адсорбция молекул O_2 ; II диссоциация молекул O_2 ; III взаимодействие

молекул H_2O с закрепленными атомами кислорода.

Список литературы:

1. Kistanov A.A., Cai Y., Zhou K., Dmitriev S.V., Zhang Y.W. // 2D Materials. 2017. 4(1). 015010.
2. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 1996. 54. 11169.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант № 18-32-20158 мол_а_вед.

ДИСЛОКАЦИОННЫЙ ДИПОЛЬ В СТРУКТУРЕ ГРАФЕНА

Клявлиная А.И.^а, Рысаева Л.Х.², Баимова Ю.А.^{а,б}

^а Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия.

^б Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия.

e-mail: alsou1961@yandex.ru

Дефекты кристаллической решетки оказывают большое влияние на тепловые, электрические и механические свойства материалов. Графен, представляющий собой двумерный кристаллический материал в виде моноатомного слоя атомов углерода [1], обладает высокой прочностью, на которую большое влияние могут оказывать дефекты [2]. Кроме того, дефекты оказывают влияние и на устойчивость графена при повышенных температурах.

На рис.1 представлена расчетная ячейка в проекции на плоскости xy и xz . Три вида дислокационных диполей были введены в расчетную ячейку (рис. 1): (а) с нулевым плечом, (б) с плечом $l_1 = 7 \text{ \AA}$, и (в) с плечом $l_2 = 30 \text{ \AA}$.

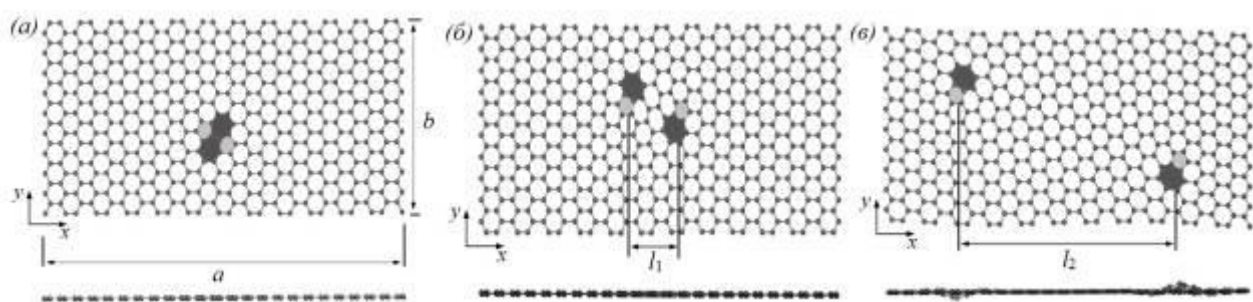


Рис. 1. Расчетная ячейка графена с тремя типами диполей в проекции на плоскость xy .

Полученные в данной работе результаты показали, что графен с различным типом диполей остается устойчивым до высоких температур. При этом повышение температуры приводит к дислокационному скольжению, формированию нового диполя с другой длиной плеча, либо исчезновению дефекта из решетки графена за счет простого поворота связи С-С.

Список литературы:

1. Novoselov K., Geim A., Morozov S., et al. // Science. 2004. V. 306. P. 666.
2. Дмитриев С.В., Баимова Ю.А., Савин А.В., Кившарь Ю.С. // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. № 11. С. 632.

ОБНАРУЖЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В СИЛИЦЕНЕ¹

Конобеева Н.Н., Скворцов Д.С., Старицкий И.Н.

*Волгоградский государственный университет, г. Волгоград,
e-mail: yana_nn@inbox.ru*

В данной работе исследуется чувствительность силицена к топологическим дефектам типа вакансии, которые наблюдаются при локальных изменениях межатомных расстояний и вызывают изменения кристаллической решетки. Силицен представляет собой набор атомов кремния в гексагональной решетке [1, 2] и обладает сходными электронными свойствами с графеном, что обуславливает большой интерес исследователей к нему. Поскольку дефекты часто являются основной проблемой при практическом применении монослойных структур, то важным вопросом является их обнаружение.

Наш подход основан на прямой диагонализации гамильтониана для силицена [3] и определении туннельного тока в контакте силицена с металлом или сверхрешеткой. Предложена методика расчета туннельной плотности состояний для силицена с вакансионными дефектами с учетом сильного спин-орбитального взаимодействия, которое в силицене в 1000 раз больше, чем в графене и вносит существенные изменения в электронную структуру данного материала. Показано влияние числа вакансий на вольт-амперные характеристики туннельного контакта. Результаты численного эксперимента позволяют сделать вывод, что для обнаружения дефектов сверхрешетка является предпочтительным контактным материалом.

Список литературы:

1. Trivedi S., Srivastava A., Kurchania R. // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 2014. 11 (3). P. 781.
2. Jose D., Datta A. // Acc. Chem. Res. 2014. 47 (2). P. 593.
3. Ezawa M. // J. Phys. Soc. Jpn. 2015. 84. P. 121003.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований и Администрации Волгоградской области, проект №18-42-343002. Компьютерное моделирование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России, гос.задание № 2.852.2017/4.6.

EBSD АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ СТАЛИ 12Х18Н10Т ПОСЛЕ ПРОКАТКИ В КРИОГЕННЫХ УСЛОВИЯХ¹

Корзникова Г.Ф.^а, Миронов С.Ю.^б, Алетдинов А.Ф.^а, Мышляев М.М.^в

^а *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа,*
e-mail: gfkornikova@gmail.com

^б *Белгородский национальный исследовательский университет, г. Белгород*
^в *Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка*

Эффект обратимого мартенситного превращения в ходе криогенной деформации и последующего отжига аустенитных сталей был довольно хорошо исследован в 60-90-е годы прошлого века. Было установлено, что он ведет к радикальному измельчению микроструктуры и сопровождается существенным улучшением служебных свойств материала. Микроструктурный и кристаллографический анализ в этих исследованиях осуществлялся методами электронной микроскопии и рентгенографии. Однако недавнее появление принципиально нового метода микроскопии, основанного на автоматическом анализе картин дифракции обратно рассеянных электронов (так называемый, EBSD анализ), открывает новые возможности для более глубокого исследования этого интересного феномена.

Данная работа основана на использовании методики анализа картин дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD) для изучения микроструктуры в метастабильной аустенитной стали 12Х18Н10Т, подвергнутой прокатке в криогенных условиях. Криогенная деформация сопровождалась мартенситными превращениями. Местом преимущественного зарождения мартенситных фаз служили деформационные полосы, причем рост мартенситной фазы сопровождался селекцией кристаллографических вариантов. Это способствовало некоторому огрублению структуры α -мартенсита.

¹ Работа поддержана РФФИ (грант № 17-42-020426). Экспериментальные исследования выполнены на базе ЦКП ИПСМ РАН

ФРАГМЕНТАЦИЯ СТРУКТУРЫ СПЛАВА СИСТЕМЫ Cu-Cr-Zr В ПРОЦЕССЕ МУЛЬТИ-РКУП-КОНФОРМ

Мусина А.Н.^а, Аксенов Д.А.^{б,г}, Фаизова С.Н.^в, Рааб Г.И.^г

^а Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа

^б Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа

^в Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа

^г Институт физики перспективных материалов при УГАТУ, г. Уфа

e-mail: AksyonovDA@mail.ru

На основе РКУП разработана новая схема деформации позволяющая деформировать длинномерные заготовки в параллельных каналах. Деформация проводилась при температуре образца 300 °С. В работе проведено исследование трансформации структуры на каждом этапе деформационной обработки – после каждого угла-очага деформации. Методом сеток показана неоднородность распределения деформации по сечению образца в процессе деформации. С помощью методов ПЭМ и EBSD установлены основные механизмы упрочнения материала [1,2]:

1. Фрагментация кристаллоитов;
2. Фрагментация большеугловых границ;
3. Двойникование;
4. Фрагментация двойниковых границ.

В процессе деформации происходит растворение дисперсных частиц вторых фаз, о чем свидетельствует как уменьшение расстояния между центрами частиц, так и снижении электропроводности с 76 % до 50 % IACS. Постдеформационное старение приводит к восстановлению электропроводности и дисперсионному упрочнению.

Список литературы:

1. Рыбин В.В., Ушанова Э.А., Золоторевский Н.Ю. // Журнал технической физики. 2013. Т.83. С. 63.
2. Рыбин В.В., Золоторевский Н.Ю., Ушанова Э.А. // Журнал технической физики 2014. Т. 84. № 12. С.81.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В СИЛЬНОДЕФОРМИРОВАННЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ¹

Назаров А.А.

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
450001, Уфа. ул. Степана Халтурина, 39, e-mail: aanazarov@imsp.ru*

При пластической деформации поликристаллических металлов взаимодействие границ зерен с дислокациями решетки приводит к формированию специфической, неравновесной структуры границ зерен (ГЗ), которая характеризуется наличием дальнodelействующих упругих напряжений и повышенной энергии. Такая структура характерна для объемных наноматериалов, полученных путем интенсивной пластической деформации (ИПД), и существенно влияет на их свойства. Атомистические модели таких границ зерен, основанные на молекулярно-динамическом (МД) моделировании, до настоящего времени отсутствовали.

Нами разработан оригинальный метод создания исходных структур для атомистического моделирования колончатых нанокристаллов г.ц.к. металлов, в ГЗ которых могут быть внесены решеточные дислокации требуемой плотности. Методом МД моделирования рассчитаны структуры нанокристаллов никеля с неравновесными ГЗ, имеющих размеры зерен 10-30 нм, их дальнodelействующие поля напряжений и энергии. Исследовано поведение неравновесных ГЗ при воздействии на нанокристаллы циклических напряжений сжатия-растяжения, моделирующих ультразвуковую обработку. Результаты моделирования показывают, что при определенных амплитудах осциллирующих напряжений происходит необратимый процесс релаксации неравновесных ГЗ путем испускания границами решеточных дислокаций, приводящий к снятию внутренних напряжений в зернах и снижению энергии нанокристалла.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 16-19-10126, и государственных заданий ИПСМ РАН

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОПОЛЕВОЙ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСЕЙ НА ПРОВОДИМОСТЬ МОНОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА¹

Носаева Т.А.^а, Сыродоев Г.А.^б

^а *Волгоградский государственный медицинский университет, 400131,
г. Волгоград, площадь Павших Борцов, д.1, e-mail: nosaeva.ta@gmail.com*

^б *Волгоградский государственный социально-педагогический университет,
400066, Волгоград, пр. им. В.И. Ленина, д.27, e-mail: sga-823@yandex.ru.*

Учет ионизации примесных центров приводит к существенным изменениям кинетических свойств наноматериалов в квазиклассически сильном электрическом поле. Влияние на ионизацию глубоких примесей оказывают как локальные колебания, так и электрическое поле, поэтому рассматриваемый процесс есть термостимулированное туннелирование колебательной системы между двумя термами, соответствующими связанному и свободному электронам. В электрическом поле, появляется возможность туннелирования электрона, что уменьшает барьер для ядра и увеличивает вероятность термоионизации.

В работе рассматривается целевая модификация монослойного графена [1], в сравнении со сверхрешеткой [2], для которой характерен минизонный спектр. Из квазиклассических уравнений движения электрона, найдена мнимая часть классического действия и определена вероятность термополевой ионизации. Зависимость возникающей в графене плотности тока от напряженности приложенного электрического поля демонстрирует эффект насыщения, что объясняется спецификой спектра носителей тока в графене с релятивистским спектром энергии.

Список литературы:

1. Castro Neto A.H., Guinea F., et al. // Reviews of Modern Physics 2009. V. 81. P. 109.
2. Крючков С.В., Сыродоев Г.А. // ФТП 1991. В. 4. С. 655.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-42-340005 и Минобрнауки России код проекта: 3.2797.2017/4.6.

ПОЛУЧЕНИЕ МЕЗОПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ОСНОВЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СОСТАВА

Посельская Ю.В., Викторов В.В., Живулин В.Е.

ЮУрГГПУ, г. Челябинск, e-mail: p.yu.v78@bk.ru

Оксид алюминия является широко востребованным сырьем. Для синтеза нанопорошков оксида алюминия часто используется гидролиз его чистых солей щелочами или аммиаком. С целью получения однородного высокоупорядоченного продукта в проведенном эксперименте раствор нитрата алюминия предварительно смешивали в определенном соотношении с неионогенным поверхностно-активным веществом ОП-10, затем проводили гидролиз парами аммиака. Известно, что в многокомпонентных системах, содержащих воду и поверхностно-активное вещество, могут возникать термодинамически устойчивые фазы, в том числе жидкие кристаллы, обладающие однородной структурой с характерным размером мицелл от 3 до 100 нм. Образование таких жидких кристаллов (рис. 1), содержащих нитрат алюминия, позволило при последующей обработке парами аммиака получить однородный по дисперсной структуре материал.



Рис. 1. Образец жидкокristаллического состава (ZEISS Axio Vert.A1 Inverted Microscope)

Исследование удельной площади поверхности, объема и среднего диаметра пор полученных образцов оксида алюминия подтвердило, что они обладают одинаково высокой удельной поверхностью и объемом микропор, но диаметр и объем мезопор закономерно изменяется в зависимости от концентрации ОП-10. При этом одновременно повышается однородность по распределению размера мезопор. Данные свойства могут быть использованы при получении мезопористого оксида алюминия предназначенного для изготовления специальных видов керамики, производства сорбентов и носителей для катализаторов.

УСТОЙЧИВОСТЬ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ С sp^3 ГИБРИДИЗАЦИЕЙ¹

Рысаева Л.Х., Баимова Ю.А.

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
г. Уфа, ул. С. Халтарина, 39, e-mail: lesya813rys@gmail.com*

Углерод - один из самых распространенных элементов, который не перестает удивлять проявлением новых форм и соединений, а также своими уникальными свойствами. Одним из таких уникальных соединений являются алмазоподобные фазы, имеющие sp^3 гибридизацию, которые могут быть созданы на основе различных полиморфов углерода, таких как фуллерен, нанотрубка или графен. В работе [1] были теоретически предсказаны и описаны подобные структуры. На данный момент среди алмазоподобных фаз были найдены структуры-ауксетики, т.е. материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона [2,3]. В перспективе применение таких структур в медицине, электронике, а также в качестве защитных покрытий.

Алмазоподобные фазы были исследованы методом молекулярной динамики с помощью свободно распространяемого пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO. Методом молекулярной динамики были найдены устойчивые конфигурации, рассчитаны модули жесткости и податливости, а также проанализированы механизмы деформации углеродных алмазоподобных фаз при гидростатическом сжатии и растяжении.

Список литературы:

1. Грешняков В.А., Беленков Е.А., Березин В.М. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2012. 150 с.
2. Lisovenko D.S., Baimova J.A., Rysaeva L.Kh. et. all // PSS (b). 2016. V.1-8. P. 1295.
3. Лисовенко Д.С., Баимова Ю.А., Рысаева Л.Х. и др. // ФТТ. 2017. № 59. С. 801.

¹ Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД-1651.2018.2).

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ПРОЦЕСС ФОРМИРОВАНИЯ КОМПОЗИТА ГРАФЕН-НИКЕЛЬ¹

Сафина Л.Р.^а, Баимова Ю.А.^{а,б}

^а *Башкирский государственный университет, г. Уфа*

^б *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа*

e-mail: saflia@mail.ru

На сегодняшний день отмечается повышенный интерес к композитным материалам на основе графена и наночастиц металлов. В работе методом молекулярной динамики изучен процесс формирования композита графен-Ni.

Исследованы наноматериалы, на основе свернутых чешуек графена, заполненных наночастицами металла. В качестве примера, начальная структура

с частицами Ni₄₇ в проекции на плоскость ху показана на рис 1а.

Чтобы сформировать прочный композитный материал, прикладывалось гидростатическое сжатие до максимально возможных плотностей (рис. 1в).

Было показано, что температура отжига сильно влияет на формирование композита графен-никель.

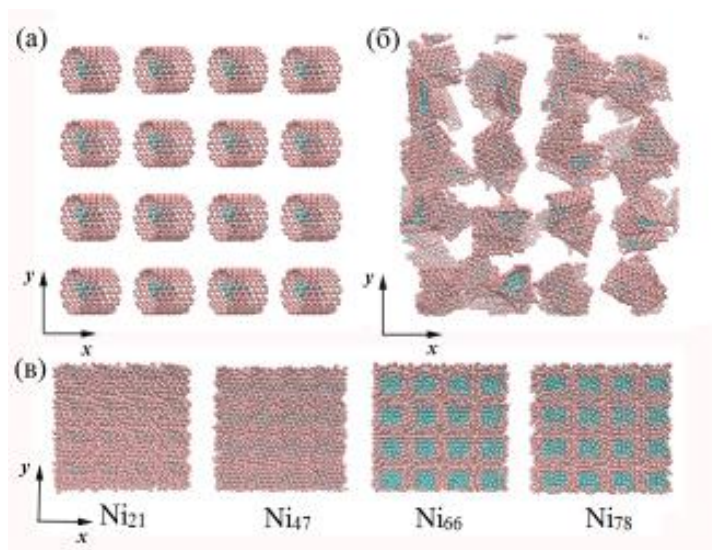


Рис. 1. (а) Начальная структура скомканного графена, содержащего наночастицы Ni₄₇; (б) структура скомканного графена, содержащего наночастицы Ni₄₇; (в) структура четырех типов композита после гидростатического сжатия

¹ Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД- 1651.2018.2).

СВЕТОВЫЕ ПУЛИ В МАССИВЕ КОМБИНИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК¹

Скворцов Д.С., Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б.

*Волгоградский государственный университет, г. Волгоград,
e-mail: dmitry.skvortsov.mail@gmail.com*

В данной работе исследуется распространение локализованных в двух направлениях предельно коротких оптических импульсов («световых пульс») [1] в массиве углеродных нанотрубок (УНТ) [2] двух типов: «кресло» и «зигзаг». В то время как кресельные УНТ представляют собой металлы, зигзагообразные могут быть металлическими или полупроводниковыми в зависимости от их геометрии. Отметим, что УНТ имеют множество практических приложений, одно из которых - применение в оптических системах для контроля поведения лазерных импульсов. Рассматриваем распространение «световой пули» в массиве из N_{arm} кресельных и N_{zig} зигзаг нанотрубок (рис. 1), которая движется в поперечном направлении к оси трубок. Нелинейность в волновом уравнении определялась законом дисперсии УНТ каждого типа.

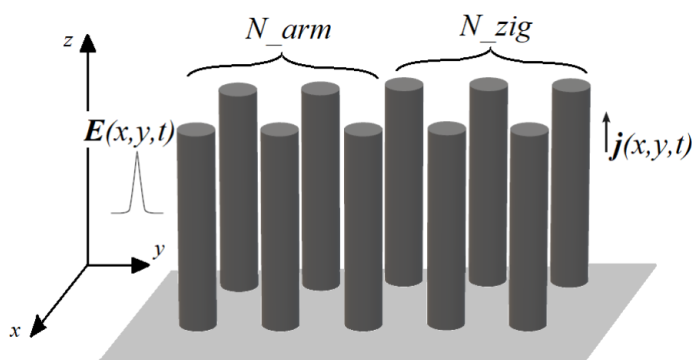


Рис. 1. Геометрия задачи.

В результате проведенного исследования получено эффективное уравнение, описывающее динамику «световой пули» в массиве комбинированных УНТ. Показана возможность ее

устойчивого распространения. Изучено влияние структуры массива нанотрубок на эволюцию «световой пули».

Список литературы:

1. Silberberg Y. // Opt. Lett. 1990. V.15. P. 1282.
2. McEuen P.L., Bockrath M., Cobden D.H., Yoon Y.-G., Louie S.G. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 5098.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках государственного задания № 2.852.2017/4.6.

ВЛИЯНИЕ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА И ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИНАМИКУ И ТРАНСФОРМАЦИЮ СТРУКТУРЫ СВЯЗАННЫХ МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ¹

Степанов С.В., Антонов Г.И., Екомасов Е.Г., Екомасов А.Е.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, e-mail: stepanovs.v@bk.ru

Большое внимание, в настоящее время, привлекают исследования переключения и возбуждения осцилляций намагниченности в магнитных наноструктурах с помощью спин-поляризованного тока и внешнего магнитного поля, которые могут позволить увеличить скорости устройств магнитной памяти, вплоть до терагерцового уровня. Интересны, в этом плане, микроволновые спин-трансферные наноосцилляторы (СТНО), которые отличаются относительно большим спектром частот осцилляций магнитных вихрей, реализуемых даже без приложения внешнего магнитного поля. Появилось много экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию динамики магнитостатически связанных магнитных вихрей (см., например, [1-2]).

С помощью численного решения обобщенного уравнения Ландау-Лифшица, проведено микромагнитное исследование динамики двух дипольно связанных магнитных вихрей в трехслойном наностолбике, под действием внешнего магнитного поля и спин-поляризованного электрического тока. Показана возможность существования различных режимов движения вихрей, в зависимости от величины поляризованного тока и магнитного поля. Для случая стационарной динамики связанных магнитных вихрей, найдена зависимость частоты их колебаний от величины тока.

Список литературы:

1. Locatelli N., Lebrun R., Naletov V. //IEEE Transactions on magnetics Das 2015. 51. 8, 4300206.
2. Екомасов А.Е., Степанов С.В., Екомасов Е.Г., Звездин К.А. //Физика металлов и металловедение 2017. Т. 118. С. 345.

¹ Работа поддержана грантом РФФИ, проект № 19-02-00316/19

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ
И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО
И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА TiNi
ПРИ МНОГОКРАТНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ¹**

Султанова Э.А.^а, Чуракова А.А.^{а,б}, Гундеров Д.В.^{а,б}

^а *Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, г. Уфа, Карла Маркса, 12*

^б *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, Пр. Октября, 151
e-mail: sul_enzh@mail.ru*

Сплавы с эффектом памяти формы широко известны благодаря своим уникальным способностям восстанавливать значительные неупругие деформации при разгрузке или нагревании, обратимо многократно менять деформацию при охлаждении и нагревании, генерировать высокие реактивные напряжения. Основой таких необычных функциональных свойств являются термоупругие мартенситные превращения, которые реализуются в сплавах с памятью формы при изменении температуры или нагрузок. Один из наиболее известных материалов с эффектом памяти формы - TiNi - распространен в медицине в качестве имплантатов, составляющей различных устройств в хирургии и т.п., а также и в некоторых отраслях промышленности. Материалом исследования является сплав TiNi с высоким содержанием Ni. В результате термоциклирования в сплаве $Ti_{49.15}Ni_{50.85}$ происходит увеличение плотности дислокаций, сопровождаемое ростом внутренних напряжений и в КЗ, и в УМЗ состояниях. По результатам механических испытаний и измерения микротвердости, уровень свойств, полученный в процессе термоциклирования, остаётся стабильным при длительной выдержке в сплаве TiNi.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Республики Башкортостан Российской Федерации для молодых ученых (№ 28 ГР от 07.03.2019).

**ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ ИСХОДНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ
НА ПРОЦЕССЫ ВЫДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ Ti_3Ni_4
ПРИ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ МНОГОКРАТНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ
ПРЕВРАЩЕНИЯХ В СПЛАВЕ $TiNi$ ¹**

Толстов Н.Е.^a, Чуракова А.А.^{a,б}

^a *Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, г. Уфа, Карла Маркса, 12*

^б *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, Пр. Октября, 151
e-mail: Tolstovofficial@gmail.com*

Расширение области применения сплавов с памятью формы приводит к ужесточению требований к функциональным свойствам сплавов на основе $TiNi$. Для получения ультрамелкозернистой/нанокристаллической структуры в сплавах $TiNi$ используются разные схемы деформации: равноканальное угловое прессование, ротационная ковка, деформация MaxStrain и кручение под высоким давлением. Осаждение частиц фазы Ti_3Ni_4 также влияет на структуру и свойства $TiNi$. Данное исследование было проведено на сплаве $Ti-50,7$ ат. % Ni . Для получения исходной структуры с различным размером структурных элементов была проведена деформационная обработка методами равноканального углового прессования (≈ 300 нм) и последующей осадки (≈ 100 нм). Кроме того, было проведено термоциклирование в диапазоне температур мартенситных превращений. Последующий отжиг при $T=400$ °C показал, что наибольшие значения микротвердости соответствуют состоянию с наименьшим размером структурных элементов, а в тонкая структура при этом представлена нанодвойниками и частицами Ti_3Ni_4 .

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Республики Башкортостан Российской Федерации для молодых ученых (№ 28 ГР от 07.03.2019).

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРОТВЁРДОСТИ В ОБЪЕМНОМ МЕТАЛЛИЧЕСКОМ СТЕКЛЕ VIT105 ПОДВЕРГНУТОМ ИПДК

Халикова Д.А.^а, Гундерова С.Д.^а

^а Уфимский государственный авиационный технический университет
г. Уфа, ул. Карла Маркса 12 к3, e-mail: dianamorthe@mail.ru

Значительно трансформировать структуру и свойства аморфных сплавов (объемных металлических стекол, ОМС) позволяет интенсивная пластическая деформация кручением (ИПДК). Влияние ИПДК на аморфные материалы активно изучается [1-4].

Образец ОМС марки Vit105 состава $Zr_{52.5}Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}Ti_5$ (at.%) подвергнут ИПДК в бойках диаметром 10 мм и канавкой глубиной 0,3 мм, число оборотов наковален $n=5$ при температуре 20 С°.

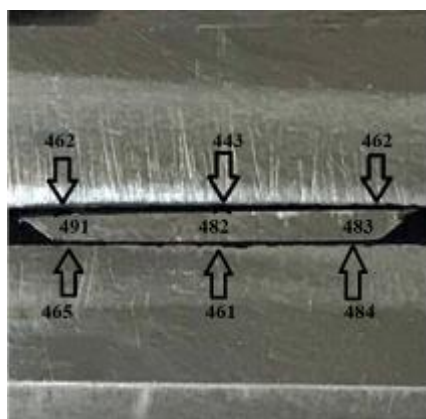


Рис. 1. Распределение микротвердости в образце Vit105 ИПДК $n=5$

Было исследовано распределение микротвёрдости (H_v) в образце ОМС после ИПДК. Средняя величина H_v ниже на нижней поверхности образца (со стороны канавки), несколько выше на верхней поверхности (со стороны пуансона). Наиболее высокие значения H_v на торце образца. H_v по краям поверхностей образца несколько выше, чем в центре (рис. 1). Данные по H_v отражают распределение

напряжений в структуре образцов, как это было отмечено ранее в [4].

Список использованной литературы:

1. Валиев Р.З. // Докл. РАН. 2004. Т. 398. № 1. С. 54.
2. Gunderov D.V., et al. // Intermetallics . 2015. V. 66, P. 77.
3. Gunderov D.V., et al. // J. Alloys Compd. 2018. V. 749. P. 612.
4. Nozomu A., et al // Materials Science& Engineering A 2015. V. 627. P. 171.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ
И ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО РЕЛЬЕФА
СПЛАВА $Ti_{50,2}Ni_{49,8}$ С РАЗЛИЧНОЙ МИКРОСТРУКТУРОЙ¹**

Чуракова А.А.^{а,б}, Гундеров Д.В.^{а,б}

^а *Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, г. Уфа, Карла Маркса, 12*

^б *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075, г. Уфа, Пр. Октября, 151
e-mail: Churakova_a@mail.ru*

Сплавы никелида титана ($TiNi$) относятся к классу функциональных материалов с эффектами памяти формы и сверхупругости, обусловленные термоупругими мартенситными превращениями. Перспективным направлением повышения служебных свойств металлических материалов, включая сплавы $TiNi$, является создание в них ультрамелкозернистого (УМЗ) состояния методами интенсивной пластической деформации (ИПД). В данной работе исследовались механические свойства, структура и морфологию поверхности сплава в различных состояниях. Материалом исследования являлся двухкомпонентный сплав $Ti_{50,2}Ni_{49,8}$. Данный сплав обогащен Ti относительно стехиометрии, при комнатной температуре основная фаза $TiNi$ с кристаллической решеткой $B19'$ моноклинного мартенсита, и фаза Ti_2Ni , обогащенная титаном. Результаты механических испытаний показали, что отжиги закаленного и РКУП состояния приводит к разнонаправленному поведению. Образцы после растяжения в закаленном состоянии имеют развитый рельеф и микротрещины. Образцы РКУП после растяжения такого рельефа не показывают.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Республики Башкортостан Российской Федерации для молодых ученых (№28 ГР от 07.03.2019).

МЕХАНИЗМ ОПИСАНИЯ ВОЗМОЖНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ СТРУКТУР ЗАДАННОГО СОСТАВА В МОДЕЛИ ТВЕРДЫХ СФЕР¹

Шарапов Е.А.^а, Халиков А.Р.^б, Корзникова Е.А.^в, Дмитриев С.В.^в

^а *ООО Башнефть-Полюс, ул. К. Маркса 56, Уфа, Россия, ufa-usinsk@mail.ru*

^б *Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа,
ул. К. Маркса 12, e-mail: khalikov.albert.r@gmail.com*

^в *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа,
ул. С. Халтурина 39, e-mail: elena.a.korznikova@gmail.com.*

Методом молекулярной динамики для представительного объема вещества удается рассчитать траектории атомов на временных интервалах порядка 1 нс, что не позволяет изучать такие медленные процессы, как диффузия. Данная проблема может быть решена с использованием метода Монте-Карло, который с успехом применяется к изучению процессов, контролируемых диффузией, например, переходов порядок-беспорядок в сплавах или диффузионной сварки разнородных металлов через прокладку. Подавляющее большинство работ выполнено для бинарных сплавов, в то время как на практике широко применяются сплавы с большим числом компонент. В данной работе представлена теоретическая модель, позволяющая изучать процессы диффузии в трехкомпонентных сплавах по вакансионному механизму в приближении твердых сфер. Выписано соотношение для расчета потенциальной энергии сплава, которое конкретизировано для случая полностью разупорядоченного сплава. Разница этих энергий выражена через энергии упорядочения и параметры порядка. Предложенная модель применима для кристаллических решеток любой размерности. Дается пример ее использования для трехкомпонентного сплава стехиометрии A_2BC , атомы которого занимают узлы двумерной квадратной решетки.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, проект № 18-32-20158

МИКРОСТРУКТУРА СПЛАВА СИСТЕМЫ AL-ZN-MG-ZR ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ¹

Юдахина А.А., Мурашкин М.Ю.

*Уфимский Государственный Авиационный Технический Университет,
450008, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. К. Маркса, д. 12,
e-mail: a.yudahina@mail.ru*

Сплавы на основе алюминия являются одними из самых распространенных технических материалов с широким спектром применений. Целью работы является рассмотрение влияния температуры интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) на характеристики микроструктуры сплава Al-4,8Zn-1,2Mg-0,14Zr (вес.%).

Перед ИПДК образцы сплава были подвергнуты отжигу при 470°C в течение 2 часов с последующей закалкой в воду. ИПДК проводилась при приложенном давлении 6 ГПа, количестве оборотов подвижной наковальни 20, как при комнатной температуре (КТ), так и при температуре 120°C и 170°C.

Анализ микроструктуры показал, что ИПДК в температурном интервале КТ...170°C приводит к формированию в сплаве ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры и к монотонному росту среднего размера зерна от 176±13 до 254±32 нм. Помимо формирования ультрамелких зерен отмечено образование наноразмерных частиц фазы MgZn₂, особенности морфологии и распределения которых проанализированы в работе. Также установлено, что обнаруженные закономерности изменений УМЗ структуры сплава хорошо коррелируют со значениям микротвердости. Максимальную микротвердость (HV 165) демонстрируют образцы сплава после ИПДК при КТ. Достигнутое значение на 54% выше значений HV после стандартной упрочняющей обработки типа Т6.

¹ Данные исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения о предоставлении субсидии №14.586.01.0061 (уникальный идентификатор проекта RFMEFI58618X0061).

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

D

Đurian M. 6

M

Matejčík Š. 6

O

Ország J. 6

A

Аббасов И.И. 81

Абдрахманов А.М. 70, 73, 130

Аксенов Д.А. 125, 127, 141

Акчулпанова Ю.Ф. 43

Александров А.Е. 75

Александров И.В. 82, 135

Алетдинов А.Ф. 140

Алешин Г.Н. 126

Алтыншина Г.Р. 76

Аминов Т.Г. 44

Амонов А.К. 7

Антипин В.А. 106

Антонов Г.И. 148

Асланов С.В. 16

Астанин В.В. 132

Асфандиаров Н.Л. 8, 32, 72

Асфандияров Р.Н. 127, 132

Ахметова А.А. 45

Ахметьянов Р.Ф. 101

Б

Бабкин В.А. 103

Бадикова П.В. 77

Бажин Д.Н. 111

Баимова Ю.А. 138, 145, 146

Байбулова Г.Ш. 102

Байрамгулов Р.А. 104

Бакиев Т.А. 91

Барамыгин А.В. 34

Басырова Е.Р. 57

Батуро В.В. 11

Бахтизин Р.З. 41

Бикмухаметов Б.А. 78

Билалов И.В. 45

Бобкова Т.И. 128

Белоненко М.Б. 147

Болтынчук Е.В. 132

Борисевич С.С. 111

Боровикова Е.Ю. 79

Булгаков Р.Г. 9

Бурангулова Н.Ф. 73

Бургарт Я.В. 111

Бушева Е.В. 44

В

Валиев Р.З. 129, 132

Вахитов Р.М. 43, 45, 46

Викторов В.В. 144

Воробьев А.Ю. 85

Г

Гадиев Р.М. 30, 80, 99, 102

Галиев А.Ф. 30, 80, 102

Галимов Д.И. 9

Гарафутдинов Р.Р. 41

Гареев Б.М. 70, 130

Гареева З.В. 43, 47

Гасанов Х.А. 81

Гатауллина М.В. 131

Гелецкая К.А. 82

Герасимова Н.Б. 33

Глазов С.Ю. 77

Горюнков А.А. 31

Гревцева И.Г. 15, 16

Гумеров А.М. 116, 118

Гундеров Д.В. 131, 132, 149, 152

Гундерова С.Д. 151

Гусейнов Д.И. 81

Д

Дадашова В.В. 81

Делев В.А. 58

Дмитриев В.Ю. 103

Дмитриев С.В. 137, 153

Дорош И.В. 133

Дорошенко Р.А. 51, 55

Е

Екомасов А.Е. 148

Екомасов Е.Г. 116, 118, 120, 148

Елькин Ю.Н. 10, 72

Ерина О.В. 15

Ж

Живулин В.Е. 144

Жиляев А.П. 134

Жиронкин А.И. 11

Жуков А.Е. 91

З

Загитов Г.Н. 104
Зайнуллина Л.И. 135
Зайцев Н.Л. 84
Закирьянов Ф.К. 113, 119
Закирьянова Г.Т. 104
Звездин А.К. 47
Зелеев М.Х. 104

И

Иванов А.И. 71
Ильясов В.Х. 85
Исаева А.А. 94
Исмагилова Р.Н. 60
Исхакова В.В. 93
Ишбулатова А.И. 83

К

Калимуллина Л.Р. 80
Калякин Л.А. 114
Караваева А.К. 62
Карамов Д.Д. 85, 86
Каримова Г.И. 48
Катаев В.А. 12
Каюмов И.Р. 49
Каюмова Э.М. 136
Киан М.Ф. 87
Кинзябаева З.С. 110
Кинзябулатов Р.Р. 22
Киселев О.М. 115
Кистанов А.А. 137
Клявлинка А.И. 138
Князева Л.И. 59
Ковалева Л.А. 48
Кодиров И.С. 126

Коледина К.Ф. 106
Комолов А.С. 32-34, 72
Кондратенко Т.С. 15, 16
Кондратьев Д.В. 60
Конобеева Н.Н. 139, 147
Корзникова Г.Ф. 140
Корзникова Е.А. 137, 153
Корнилов В.М. 78-80, 83, 86, 92, 95, 97
Крехов А.П. 58
Кудрейко А.А. 61
Кудрявцев Р.В. 116
Кузнецова М.Н. 117
Кусраев Ю.Г. 50

Л

Лазарев В.В. 12, 27
Лазнева Э.Ф. 32-34
Лачинов А.А. 35
Лачинов А.Н. 30, 36, 76, 80, 82, 85-87, 91, 99, 102
Лукашов С.С. 11
Лукин В.Г. 13, 24

М

Мажитова Ф.А. 46
Макаров Д.В. 59, 62, 63, 65, 67
Малыхин Р.Е. 71
Мамыкин А.В. 88, 89
Масягутова Г.А. 17, 88, 89
Меньщикова Т.В. 90, 94
Мигранов Н.Г. 61
Мингажев И.К. 91
Мирзокулов Х.Б. 19
Миронов Г.И. 105

Миронов С.Ю. 140
Михайлов Г.П. 14
Моделли А. 72
Мошелёв А.В. 36
Муллағалиев И.Н. 37, 39
Муллаянов А.И. 132
Мурашкин М.Ю. 154
Мусина А.Н. 141
Муфтахов М.В. 23, 28
Мухитдинов И.М. 92
Мыслицкая Н.А. 21
Мышляев М.М. 140

Н

Назаров А.А. 142
Назаров А.Е. 71
Назаров В.Н. 118
Нафикова Е.П. 8, 72
Низямова А.Р. 119
Новиков А.А. 63
Новокшенов В.Ю. 115
Носаева Т.А. 143
Носиров Б.А. 7

О

Овчинников О.В. 15, 16
Овчинников М.Ю. 17, 89, 106
Окользина А.И. 38
Остахов С.С. 17, 88, 89

П

Павленко В.А. 107
Панина Ю.А. 33
Панкратьев Е.Ю. 23, 108

Панов Ю.Д. 54
Перепелица А.С. 16
Песин А.М. 134
Петров В.П. 109
Петров Д.А. 64
Пономарёв А.Ф. 36, 85
Порецкий С.А. 11
Посельская Ю.В. 144
Правилон А.М. 11
Пустовойтов Д.О. 134
Пшеничнюк С.А. 8, 32-34, 72

Р

Рааб А.Г. 126
Рааб Г.И. 125-127, 141
Разумов В.Ф. 18
Рахматова Л.И. 93
Рахмеев Р.Г. 8, 72
Русинов И.П. 90, 94
Рысаева Л.Х. 138, 145

С

Сабиров Д.Ш. 110
Савин Г.А. 103
Салахитдинов А.Н. 19
Салахитдинова М.К. 19
Салимов Р.К. 120
Салихов К.М. 20
Салихов Р.Б. 37
Салихов Т.Р. 39, 40
Самигуллина З.С. 111
Самсонов К.Ю. 116
Сафаргалиева Г.Р. 95
Сафаргалин И.Н. 40

Сафина Л.Р. 146
Севостьянов В.Г. 96
Севостьянова Е.Г. 96
Серегин С.В. 51
Скалдин О.А. 57, 66
Скворцов Д.С. 139, 147
Скляднева И.Ю. 90
Скоков П.К. 64
Смирнов М.С. 15, 16
Соболев В.С. 32, 34
Сокольчик Д.П. 65
Сокольников С.Р. 21
Солонецкий Р.В. 45, 46
Старицкий И.Н. 139
Степанов С.В. 148
Сулейманов Б.И. 121, 122
Султанова Э.А. 149
Сыродоев Г.А. 77, 143

Т

Тамеев А.Р. 75
Татаринов Д.А. 21
Терентьев А.О. 110
Тимиров Ю.И. 58, 66
Ткачёв В.Г. 71
Толстов Н.Е. 150
Туймедов Г.М. 13
Туктаров А.Р. 38
Тулябаев А.Р. 38
Тухбатуллин А.А. 73

У

Убыйвовк Е.В. 132
Уринов Ж.О. 52, 53
Уринов Х.О. 52, 53

Устюжанина С.В. 137
Уткин М.А. 67

Ф

Фаизова С.Н. 125, 141
Фаршатов Р.С. 104

Х

Хабибуллин И.Т. 117, 123
Хадиуллин С.Х. 137
Хазимуллин М.В. 57, 66
Хакимова А.Р. 123
Халиков А.Р. 153
Халикова Д.А. 151
Халилов Л.М. 38
Харисов А.Т. 118
Хатымов Р.В. 22, 23, 108
Хатымова Л.З. 22, 24
Хвостенко О.Г. 13, 22, 24, 25, 26
Хилаев В.Ю. 97
Холзаков А.В. 98
Хохлов В.Ю. 15
Хурсан С.Л. 17, 27, 89, 106, 111

Ц

Цеплин Е.Е. 25, 26
Цеплина С.Н. 25, 26

Ч

Чернышев В.А. 109
Чулков Е.В. 90, 94
Чуракова А.А. 132, 133, 136, 149, 150, 152

Ш

Шабунина Г.Г. 44
Шавлуков А.М. 122
Шадрин А.В. 54
Шайхутдинова И.А. 61
Шакиров Р.Г. 131
Шапошников Н.С. 68
Шарапов Е.А. 153
Шарипов Г.Л. 70, 73, 130
Шарипов Т.И. 41
Шишлов Н. М. 27
Шульга Н.В. 55

Щ

Щукин П.В. 23, 28

Э

Эшмирзаев М.Р. 52, 53

Ю

Юдахина А.А. 154
Юмагузин А.Р. 43
Юсупов А.Р. 80, 93, 96, 99

Я

Якупова С.М. 9
Якшембетова Л.Р. 70