## МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

## XXVI Международная конференция по релаксационным явления в твердых телах

МАТЕРИАЛЫ XXVI МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

(г. Воронеж, 15-19 сентября 2025 г.)

УДК 539.389(06) ББК 22.37я4 М431

Международная конференция по релаксационным явления в твердых телах: материалы XXVI Международной конференции (г. Воронеж, 15-19 сентября 2025 г.); отв. ред. Л.Н. Коротков [Электронный ресурс]. — Электрон. текстовые, граф. данные (8,87 Мб). — Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2025. — 1 электрон. опт. диск (CD-ROM): цв. — Систем. требования: ПК 500 и выше; 256 Мб ОЗУ; Windows XP; SVGA с разрешением 1024×768; Adobe Acrobat; CD-ROM дисковод; мышь. — Загл. с экрана.

Сборник содержит тезисы докладов участников 26-й международной конференции по релаксационным процессам в твердых телах. В нем кратко изложены результаты экспериментальных и теоретических исследований механической, диэлектрической и магнитной релаксации в однородных и гетерогенных конденсированных средах, включая функциональные материалы, обладающие высоким потенциалом для практических применений.

Сборник предназначен для работников научных учреждений и высших учебных заведений, специалистов — материаловедов, интересующихся проблемами физики релаксационных процессов в функциональных и конструкционных материалах. Публикуемые тезисы докладов будут полезны аспирантам и студентам, специализирующимся в области физики конденсированного состояния.

### Редакционная коллегия:

Коротков Л.Н. - д-р физ.-мат. наук, проф. - ответственный редактор

Воронежский государственный технический университет;

Калинин Ю.Е. - д-р физ.-мат. наук, проф. – зам. ответственного редактора

Воронежский государственный технический университет;

Иванов О.Н. - д-р физ.-мат. наук, проф.

Белгородский государственный университет;

Сидоркин А.С. - д-р физ.-мат. наук, проф.

Воронежский государственный университет;

Стогней О.В. - д-р физ.-мат. наук, проф.

Воронежский государственный технический университет;

УДК 539.389(06) ББК 22.37я4

Издается по решению научно-технического совета Воронежского государственного технического университета

© ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2025

## введение.

Наше время характеризуется интенсивным развитием техники технологий. Базой этого развития стали впечатляющие успехи физического материаловедения, позволившие получить новые материалы, обладающие высокими эксплуатационными характеристиками. Их создание оказалось возможным благодаря пониманию закономерностей внутренних взаимодействий в веществе, тесно связанных с его строением и химическим составом. Поэтому очевидно, что процесс синтеза новых материалов сопровождается исследованиями их структуры, физических и химических свойств, для проведения которых, как правило, требуется применение комплекса взаимодополняющих методов.

Эффективными методами исследования твердых тел являются методы, основанные на анализе процессов механической, диэлектрической, магнитной и других типов релаксации. Они дают возможность прогнозировать изменение структуры и свойств материалов со временем, или под влиянием внешних воздействий, определять наличие в них дефектов решетки, их концентрацию, тип и т.д.

Систематическое изучение релаксационных явлений в конденсированных средах было начато достаточно давно и продолжается в наши дни. Это обусловлено рядом факторов — развитием представлений о строении материалов и наблюдаемых в них физических явлениях, совершенствованием экспериментального оборудования, появлением новых методов исследования, а также расширением круга исследуемых объектов, включающем наноструктурированные и другие синтетические материалы, и т.д.

Регулярно проводимые в России и за рубежом конференции, посвященные релаксационным явлениям в твердых телах, являются подтверждением интереса ученых к этой области знаний. Настоящая конференция является уже двадцать шестой по счету из числа проводимых в СССР и России начиная с 1958 года.

Опубликованные в этом сборнике тезисы докладов российских ученых дают представление об основных направлениях развития данной науки в стране в наши дни. Мы предлагаем читателю ознакомится с результатами этих исследований.

## Содержание

ВВЕДЕНИЕ	3
PLENARY LECTURES	9
DIVERSE MAGNETIC CHAINS IN INORGANIC	
COMPOUNDS	10
Vasiliev A.N.	
СПИН – КРОССОВЕР В Cu2MnBO5:Cr ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО	
МАГНИТНОГО ПОЛЯ	12
Попов Д.В., Яцык И.В., Еремина Р.М., Батулин Р.Г., Черосов М.А., Мошкина Е.М.	
ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВАЯ ФОРМА МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В	
ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ	14
Захаров А.Ю.	
ВНУТРЕННЕЕ ТРЕНИЕ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН С ДЕФЕКТАМИ	16
Кульков В.Г., Норов Д.Ш.	
ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА α- И β-РЕЛАКСАЦИЮ В АМОРФНЫХ	1.7
ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ	17
Калинин Ю.Е., Багатнов В.Б., Макагонов В.А., Каширин М.А.	
ЭНТРОПИЙНЫЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРНОЙ УПОРЯДОЧЕННОСТИ, СКЛОННОСТИ К РЕЛАКСАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ	
К РЕЛАКСАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ И ИХ РАСПЛАВОВ	19
С ГЕКОЛ И ИХ ГАСПЛАВОВ	19
DOMAIN KINETICS UNDER THE ACTION OF THE PYROELECTRIC FIELD	
CREATED BY PULSE LASER IRRADIATION	21
Shur V.Ya.	21
REGULAR REPORTS	23
	23
Session 1. Theory of relaxation phenomena in solids	23
DYNAMIC HETEROGENEITIES IN THE ±J SPIN GLASSESTHROUGH THE PRISM	2.4
OF LOCAL FIELDS	24
Abalmasov V.A. ABOUT REPOLARIZATION OF FERROELECTRICS IN THE FIRST ORDER PHASE	
TRANSITION REGIONTRANSITION OF TERROELECTRICS IN THE PIRST ORDER PHASE	26
Nechaev V.N., Shuba A.V.	20
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КЛАСТЕРИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ И	
ХАРАКТЕР ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ПОЛИЛАКТИДЕ С	
УГЛЕРОДНЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ	28
Ельникова Л.В., Гасымов М.М., Кузнецова О.П., Роговина С.З., Шевченко В.Г.	
STRESS RELIEF IN FERROELECTRIC SOLID SOLUTIONS CONTAINING A	
TETRAGONAL PHASE IN A MORPHOTROPIC REGION	30
Topolov V.Yu.	
КРИТИЧЕСКИЙ ТОК В ОКСИДНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ	
С МАЛОУГЛОВЫМИ ГРАНИЦАМИ НАКЛОНА И ОДНОМЕРНЫМ	
ДВОЙНИКОВЫМ ДЕФЕКТОМ	32
Померанцев Ю.А.	
РАСЧЁТ НЕКОТОРЫХ НЕУПРУГИХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА	_
ОСНОВЕ МОДЕЛИ МАРЧЕНКО – МИСБАХА	34
Фролов Д.О.	2-
Session 2. Mechanical and structural relaxation	36

ОСОБЕННОСТИ НЕУПРУГОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОКЕРАМИКИ С ИОННОЙ	
ПРОВОДИМОСТЬЮ	37
Носолев И.К., Резников А.В., Токий Н.В., Токий В.В.	
ПРИРОДА СТЕКЛОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ ПОСЛЕ ГЛУБОКОЙ	
РЕЛАКСАЦИИ	39
Макаров А.С., Афонин Г.В., Кончаков Р.А., Кобелев Н.П., Хоник В.А.	
НЕИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАНДАРТНЫХ И	
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ И ЕЁ СВЯЗЬ С	
ЭНТРОПИЕЙ СМЕШЕНИЯ И ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИЕЙ	41
Афонин Г.В., Щербаков С.Л., Кончаков Р.А., Кобелев Н.П., Хоник В.А.	
ВЗАИМОСВЯЗЬ ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИИ И ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТАЛЬПИИ	
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ ЖИДКОСТИ СО	
СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ МАТЕРИНСКИХ РАСПЛАВОВ	43
Кончаков Р.А., Афонин Г.В., Макаров А.С., Хоник В.А.	
ТЕРМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ ТЕЛЛУРИТНЫХ СТЁКОЛ ПРИ	
МЕДЛЕННОМ ОХЛАЖДЕНИИ ИЗ СОСТОЯНИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЁННОЙ	
жидкости	45
$A$ фонин $\Gamma$ . $B$ ., $X$ оник $B$ . $A$ .	
ВЛИЯНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ СКОРОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ НА	
ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ Fe <sub>40</sub> Ni <sub>40</sub> P <sub>14</sub> B <sub>6</sub> и	47
$Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6 \dots F_{44}T_{54}P_$	47
Васильев С.В., Свиридова Е.А., Ткач В.И	
СВЯЗЬ ТЕРМОАКТИВИРУЕМЫХ ИЗМЕНЕНИЙ МОДУЛЯ СДВИГА С	
РЕЛАКСАЦИЕЙ ДЕФЕКТНОЙ ПОДСИСТЕМЫ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКЛАХ	40
	49
Макаров А.С., Гончарова Е.В., Кончаков Р.А., Хоник В.А. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ	
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ И ПЕРЕОХЛАЖДЁННЫХ РАСПЛАВОВ	51
ме галлических стекол и пегеодлажденных гасплавов Макаров А.С., Кончаков Р.А., Кобелев Н.П., Хоник В.А.	31
МИКИРОВ А.С., КОНЧИКОВ Г.А., КООЕЛЕВ П.П., ЛОНИК В.А. БЫСТРАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКЛАХ	53
Афонин Г.В., Макаров А.С., Кобелев Н.П., Хоник В.А.	33
ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ	
$\Psi$ ЛКТОТЫ, ОТП ЕДЕБИНОЕЦНЕ ТЕГМИТ ГЕСКОТО ОСТОИ ИТБОСТВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ $Al_{86}$ Ni $_{9}$ Y $_{5}$ и $Al_{86}$ Ni $_{9}$ G $d_{5}$	55
Свиридова Е.А., Васильев С.В., Ткач В.И	33
INELASTICITY OF POROUS Ti-18Zr-15Nb POWDER ALLOY	57
Markova G.V., Permyakova D.V., Gusev A.D.	51
ОЦЕНКА ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ В ВЫСОКООМНОМ GaAs ПОД	
ВОЗДЕЙСТВИЕМ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	59
Митрохин В.И., Гуров А.В., Коротков Л.Н.	0,
РЕЛАКСАЦИЯ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ В	
ПРОЦЕССЕ ГИДРОЭКСТРУЗИИ	61
Яшарова Е.В., Гангало А.Н., Васильев С.В., Свиридова Е.А.	
УЛЬТРАЗВУКОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ОРТО- И ПАРА-	
ТЕРФЕНИЛЕ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 1 ГПа И ТЕМПЕРАТУРЕ 77-300 К	63
Данилов И.В., Громницкая Е.Л., Бражкин В.В.	
Session 3. Dielectric relaxation	65
СТРУКТУРА, ДИССИПАТИВНЫЕ И ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА	
КОМПОЗИТА CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> -Pb <sub>2</sub> ScNbO <sub>6</sub>	66
Абдулвахидов К.Г., Ли Ч., Ким Д.С., Дудургов М.М., Кульбужев Б.С.,	55
Отажонов С.М., Юнусов Н.	

ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОИ ПРОНИЦАЕМОСТИ НА ОСНОВЕ	
НИТРИДОВ АЛЮМИНИЯ И ГАЛЛИЯ	68
Зезянов И.Т., Солнышкин А.В. Сергеева О.Н., Каптелов Е.Ю., Шарофидинов Ш.Ш.,	
Пронин И.П.	
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ ВА НА	
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ НИОБАТА КАЛИЯ НАТРИЯ	70
Барабанова Е.В., Макулин А.А., Оспельников Н.М.	
РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В КЕРАМИКЕ НИОБАТА КАЛИЯ НАТРИЯ С	
ДОНОРНЫМИ ПРИМЕСЯМИ	72
Барабанова Е.В., Макулин А.А., Оспельников Н.М.	
ОСОБЕННОСТИ РЕЛАКСАЦИИ ГАРМОНИК ТОКА ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИИ	
КРИСТАЛЛА Rb <sub>2</sub> ZnCl <sub>4</sub> В НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЕ ПОСЛЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО	
ОТЖИГА	74
Горбатенко В.В., Прасолов Б.Н., Даценко Н.В.	
СТЕПЕНЬ РАЗМЫТИЯ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА И ТЕМПЕРАТУРА	
ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ В ПРОЗРАЧНОЙ КЕРАМИКЕ $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3 - xPbZr_{0.53}Ti_{0.47}O_3$ .	76
Камзина Л.С., Залесский В.Г., Дьяконов К.В.	
STUDY OF DIELECTRIC PROPERTIES OF (1-x)Ba <sub>0.95</sub> Pb <sub>0.05</sub> TiO <sub>3</sub> +x Co <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	
FERROELECTRICS CERAMICS WITH COBALT OXIDE IMPURITY	78
Dikov R.V., Sopit A.V.	
РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ ФЛЕКСОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ В	
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ-ПЕРОВСКИТАХ	80
Залесский В.Г., Обозова Е.Д., Дьяконов К.В., Халипов А.В.	
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ДИСПЕРСИЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ	
ПРОНИЦАЕМОСТИ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ	81
Малышкина О.В., Гусева О.С., Малышева Н.Е., Денисов Ф.О.	
ВКЛАД ПРОВОДИМОСТИ В ДИСПЕРСИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ	
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ КЕРАМИКИ	
НА ОСНОВЕ НИОБАТА НАТРИЯ	83
Малышева Н.Е., Малышкина О.В., Мамаев Д.В.	
ВКЛАД ПРОВОДИМОСТИ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК	0.5
(МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ)	85
Малышкина О.В., Малышева Н.Е., Дьякова Е.В.	0.0
ИЕРАРХИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЖИДКОЙ ВОДЕ	88
Чучупал С.В., Волков А.А.	
МЕТОДЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОЛИМЕРНЫХ	00
ПОЛУПРОВОДНИКОВ ПОЛИАЦЕНХИНОНОВ	90
Мухаева Л.В., Афанасьев Н.В., Мухаева Д.В.	
ELECTROMECHANICAL HYSTERESIS AND RELAXATION PROCESSES IN	00
RELAXOR PIEZOCERAMICS UNDER HIGH ELECTRIC FIELDS	92
Reznichenko A.N., Lugovaya M.A., Petrova E.I., Makaryev D.I.	
ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВЕРХРЕШЕТОК И МНОГОСЛОЕК С МАТЕРИАЛАМИ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА	0.4
	94
Сидоркин А.С., Даринский Б.М., Нестеренко Л.П., Коротков Л.Н., Калгин А.В.,	
Gagou Y., Saint-Gregoire P. AHОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДИСПЕРСИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ	
ПРОНИЦАЕМОСТИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЕРОВСКИТОВОЙ	
КЕРАМИКЕ ТИТАНАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ: ЭКСПЕРИМЕНТ И	
МОДЕЛИРОВАНИЕ	95
Григорян Г.С., Фролова В.Е., Руднева И.Г.	)5
1 ρικουρλία 1.0., Ψρυλιυσά D.D., 1 γυποσά P.I	

ЗАВИСИМОСТЬ СВОИСТВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОИ	
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ ЦТС-21 ОТ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ	
ФАКТОРОВ ИЗГОТОВЛЕНИЯ	97
Мараховский М.А., Панич А.А.	
ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В КЕРАМИКЕ ТИТАНАТА БАРИЯ СТРОНЦИЯ	99
Иванов В.В., Малышкина О.В., Кислова И.Л., Солнышкин А.В.	
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В НЕКОТОРЫХ СЛАБО	
УПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ	101
Коротков Л. Н., Панкова М.А., Al' Jaafari F.D., Попов С.В., Стекленева Л.С.	
КОНКУРЕНЦИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ И АКТИВАЦИИ	
ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВБЛИЗИ	
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА	103
Кузенко Д.В.	
Session 4. Miscellaneous	105
АНИЗОТРОПИЯ КВАЗИУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МАНДЕЛЬШТАМ-	
БРИЛЛЮЭНОВСКИХ СПЕКТРАХ КРИСТАЛЛОВ Na <sub>1/2</sub> Bi <sub>1/2</sub> TiO <sub>3</sub>	106
Дерец Н.К. Федосеев А.И., Лушников С.Г., Ко JH., Којіта S.	
VARIETY OF ORDERED MAGNETIC STATES IN HONEYCOMB-LAYERED	
COMPOSITIONALLY COMPLEX OXIDES Na <sub>3-x</sub> Li <sub>x</sub> $M_2$ SbO <sub>6</sub> ( $M = Cu_{1/3}Ni_{1/3}Co_{1/3}$ )	108
Vasilchikova T. M.	
PECULIAR CRYSTAL STRUCTURE AND LONG-RANGE ORDER OF SPIN-1/2	
LADDERS IN MoOBr <sub>3</sub> .	109
Volkova O.S.	
INFLUENCE OF THE TIME OF TREATMENT OF MODIFIED WOOD WITH A	
PULSED MAGNETIC FIELD ON ITS MECHANICAL PROPERTIES	110
Kamalova N.S., Evsikova N.Yu., Matveev N.N., Lisitsyn V.I., Vnukova S.V.	
ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ АМОРФНО-НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ	
КОМПОЗИТОВ С УЛУЧШЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ	112
Пермякова И.Е.	
УЛЬТРАЗВУКОВОЕ СТИМУЛИРОВАНИЕ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ	114
Пермякова И.Е., Дюжева-Мальцева Е.В.	
ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ И РЕЛАКСАЦИЯ В КРИСТАЛЛАХ С	
МАГНИТОАКТИВНЫМИ ИОНАМИ	116
Головенчиц Е.И., Санина В.А., Ханнанов Б.Х., Залесский В.Г.	
РЕЛАКСАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ	118
ИНТЕРМЕТАЛЛИДА Тb-Fe-Ti со структурой ThMn <sub>12</sub>	
Гусева А.М., Мишурина Т.Р., Синкевич А.И., Семенова Е.М.	
ТЕМПЕРАТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ КРАЕВОГО УГЛА СМАЧИВАНИЯ В	
ПРОЦЕССЕ РОСТА НИТЕВИДНОГО НАНОКРИСТАЛЛА ПО МЕХАНИЗМУ	
ПАР-ЖИДКОСТЬ-КРИСТАЛЛ	120
Небольсин В.А., Корнеева В.В.	
ЗАВИСИМОСТЬ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В	
ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ УГЛЕВОДОРОДАХ ОТ ДЛИТЕЛЬНОСТИ	
УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ	122
Макарьев Д.И., Резниченко А.Н., Швецова Н.А.	
ВЛИЯНИЕ ИЗБЫТОЧНОГО ОКИСЛЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР	
(CoFeB-SiO <sub>2</sub> )/ZnO НА ИЗМЕНЕНИЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ ПРИ	
ОТЖИГАХ	124
Елисеева Я.О., Майорова Я.В., Фошин В.А., Стогней О.В.	
4	

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕИСТВИЯ НА МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫИ	
ЭФФЕКТ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР (CoFeB-SiO <sub>2</sub> )/ZnO	126
Майорова Я.В., Елисеева Я.О., Фошин В.А., Стогней О.В.	
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛА	
ТВЁРДОГО РАСТВОРА Zn <sub>0.75</sub> Mn <sub>2.25</sub> As <sub>2</sub>	128
Захвалинский В.С., Спицын А.О., Фержушия М., Япрынцев М.Н., Борисенко А.В.	
РЕЛАКСАЦИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ	
ПУТЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ В УСЛОВИЯХ ОКРУЖАЮЩЕГО	
ВАКУУМА	130
Олейник А.Н., Подойницын А.А.	
ВЛИЯНИЕ ПРОСЛОЕК a-Si И Та <sub>2</sub> O <sub>5</sub> НА СТЕПЕНЬ НЕЛЕНЕЙНОСТИ ВАХ В	
МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУРАХ КОНДЕНСАТОРНОГО ТИПА	
$Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_X(SiO_2)_{100-X}/LiNbO_3/Cr/Cu/Cr$	132
Ситников А.В., Калинин Ю.Е., Бабкина И.В., Никонов А.Е.	
ВЛИЯНИЕ БОРА НА ЦИКЛИЧЕСКУЮ ВЫНОСЛИВОСТЬ МЕМРИСТИВНЫХ	
СТРУКТУР НАНОКОМПОЗИТ CoFeB-SiO2/ZrO2(Y)	134
Бабкина И.В., Шакуров А.Р., Никонов А.Е., Ампилогов А.В., Ситников А.В.	
СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ	
НАНОГРАНУЛИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ СИСТЕМ (CoFe) <sub>x</sub> (MgF <sub>2</sub> ) <sub>100-х</sub> И	
$(CoFeZr)x(MgF_2)_{100-x}$ ДОПЕРКОЛЯЦИОННОГО СОСТАВА	136
Трегубова Т.В., Костюченко А.В., Стогней О.В.	
ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛЕНОК СИСТЕМЫ Li-Nb-O НА ПОВЕРХНОСТИ PdO В	
РЕЗУЛЬТАТЕ ВАКУУМНОГО ОТЖИГА	138
Костюченко А.В., Белоногов Е.К., Копытин С.С., Лисанов Д.С.	
СИСТЕМА МОНИТОРИРОВАНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ С УДАЛЕННОЙ	
СЧИТЫВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОНИКОЙ ДЛЯ НЕЙТРОННЫХ	
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УСТАНОВОК	140
Тарнавич В.В., Ильин Д.С., Терентьев К.Ю., Колесников А.Г.	
ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ГАЗОВОЙ СРЕДЫ ПРИ РЕАКТИВНОМ ИОННО-	
ЛУЧЕВОМ НАПЫЛЕНИИ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ZnO,	
ЛЕГИРОВАННЫХ АЗОТОМ	142
Макагонов В.А., Габриельс К.С., Калинин Ю.Е., Лопатин А.Ю.	
ВЛИЯНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ОСВЕЩЕНИЯ НА СПЕКТР	
ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ С ПРИМЕСЬЮ	
ЖЕЛЕЗА	144
Магомадов Р.М., Зобов М.Е., Крамынин С.П., Цебаев С.Н.	
АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ СИЛОВОГО ПОЛЕВОГО	
ТРАНЗИСТОРА	146
Долженков С.В., Перов В.А., Звягинцева А.В.	
ИМЕНЕНИЕ КЕРАМИКИ AIN В КАЧЕСТВЕ ДЕРЖАТЕЛЯ КРИСТАЛЛА ПРИ	1.40
ПРОИЗВОДСТВЕ МОЩНЫХ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ	148
Перов В.А., Долженков С.В., Звягинцева А.В.	
РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ НА	150
ОСНОВЕ НИКЕЛЯ	150
Звягиниева А.В.	

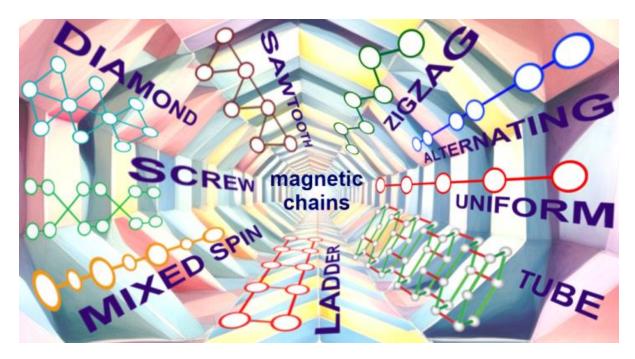
## PLENARY LECTURES

## УДК 538.94

## DIVERSE MAGNETIC CHAINS IN INORGANIC COMPOUNDS

A. N. Vasiliev Lomonosov Moscow State University, vasil@lt.phys.msu.ru

A review on spin liquid behavior in various magnetic chains in inorganic compounds is presented. Keywords: spin liquid, magnetism, superconductivity



In both inorganic and metal-organic compounds, transition metals surrounded by ligands form regular or distorted polyhedra, which can be either isolated or interconnected. Distortion of the polyhedron can be caused by the degeneracy in population of atomic or molecular orbitals, which can be removed by the cooperative Jahn-Teller effect. This effect is often accompanied by the formation of lowdimensional magnetic structures, of which we will consider only chain, or quasi-onedimensional, magnetic compounds variety.

Magnetic chains are formed when transition metal polyhedra bond through a vertex, edge, or face. Moreover, the magnetic entities can be coupled through various non-magnetic units like  $NO_3$ ,  $SiO_4$ ,  $PnO_3$  or  $PnO_4$ ,  $ChO_3$  or  $ChO_4$ , where Pn is the pnictide and Ch is the chalcogen. In most cases, the local environment of the transition metal is represented by the oxygen and/or halogens. The prevailing number of chain systems is based on 3d transition metals, albeit 4d and 5d systems attract more and more attention. Mixed 3d-4f single chain magnets became the popular objects in metalorganic chemistry.

Exchange interactions in quasi-one-dimensional systems can differ in sign, but no long-range magnetic order, either ferromagnetic or antiferromagnetic, can be achieved at finite temperatures due to fundamental limitations formulated in the early stages of the development of quantum mechanics. These limitations are summarized in a Mermin–Wagner theorem, which states that no continuous symmetries can be spontaneously broken at finite temperature in systems with sufficiently short-range interactions in dimensions  $d \le 2$ . This means that long-range fluctuations can be created at little energy cost, and they are favored since they increase the entropy. The theorem does not apply to discrete symmetries that can be seen in the two-dimensional <u>Ising model</u>, in which the long-range order occurs at the temperatures comparable to exchange interaction energy.

The long-range magnetic order being not the intrinsic property of the chains can appear only due to the interchain interactions if not precluded by the spin gap. The very concept of the spin gap plays a key role in the field of low-dimensional magnetism. All research objects in this area can be subdivided into gapped and gapless ones. The amazing variety of manifestations of quasi-one-dimensional magnetism is due to the fact that the chains themselves can differ in a number of parameters. They can be homogeneous or alternating in terms of intrachain exchange interaction. The next-nearest-neighbor exchanges in the chains may compete with the nearest-neighbor exchanges.

The chains can be organized by transition metal ions with integer or half-integer spins and they can be constituted by different spins of the same element or by spins of different magnetic species. The chains can be cut to form the magnetic clusters, e.g. dimers or trimers, and they may pair up to form the spin ladders or group up to form the spin tubes.

Understanding the behavior of low-dimensional magnetic systems is of fundamental importance in terms of the formation of quantum ground states of matter. Many new chain magnetic materials have appeared recently due to improvements in synthetic procedures. Each such compound highlights new facets of low-dimensional magnetism, going in some cases beyond the limits of magnetism towards superconductivity, ferroelectricity and multiferroic phenomena.

For a long time, the low-dimensional magnetism was considered only as a playground for the development of elaborated theoretical models. The impetus to experimental research was given by the discovery high-temperature of superconductivity in cuprates, for which two-dimensional antiferromagnetic correlations turned out to be important. It was found, that many features bring together low-dimensional magnetism and superconductivity. The concept of spin liquid itself has proven productive for the development of modern theory of superconductivity. In particular, the magnetic skyrmions have much in common with the vortices in type-II superconductors.

Independent of superconductivity, the low-dimensional magnetism in insulators is of utmost interest since it allows to unravel the fine interactions responsible for the formation of the ground states of matter. The purpose of this review was to demonstrate how versatile are the manifestations of low-dimensional magnetism using the example of quasi-one-dimensional compounds.

## СПИН – КРОССОВЕР В Cu<sub>2</sub>MnBO<sub>5</sub>:Cr ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Д.В. Попов<sup>1</sup>, И.В. Яцык<sup>2</sup>, <u>Р.М. Еремина<sup>3</sup></u>, Р.Г. Батулин<sup>4</sup>, М.А. Черосов<sup>5</sup>, Е.М. Мошкина<sup>6</sup> 
<sup>1</sup>Младший научный сотрудник, kazan-city.dvpopoff@yandex.ru

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, i.yatzyk@gmail.com

<sup>3</sup>Зав. лаб. КФТИ «Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков»

REremina@yandex.ru

ФГБУН ФИЦ КазНЦ РАН

<sup>4</sup>Ведущий научный сотрудник, tokamak@yandex.ru <sup>5</sup>Младший научный сотрудник, mcherosov@gmail.com ФГБОУ ВО «Казанский федеральный университет» <sup>6</sup>Научный сотрудник, ekoles@iph.krasn.ru ФГБУН ФИЦ КНЦ СО РАН

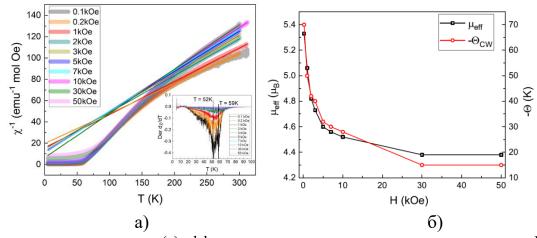
В работе представлены результаты исследования обратной магнитной восприимчивости людвигита  $Cu_2MnBO_5$ :Сr. Установлено, что эффективный магнитный момент и константа Кюри-Вейсса зависят от величины приложенного магнитного поля при проведении измерений, что связано с переходом спинового состояния марганца из высоко спинового в низко спиновое состояние. Определены температуры фазового перехода в состояние спинового стекла по данным AC намагниченности.

Ключевые слова: людвигит, удельная восприимчивость, термоэдс, ЭПР

Оксибораты с формулой  $M_2M'BO_5$ , где M и M' — двух- и трёхвалентные ионы металлов соответственно, называются людвигитами. Ионы металлов занимают четыре неэквивалентные кристаллографические позиции в элементарной ячейке, что приводит к случайному распределению магнитных ионов, смешанной валентности ионов, сильным электронным корреляциям и необычному упорядочению заряда. Благодаря этому людвигиты обладают чрезвычайно необычными магнитными свойствами [1, 2]. Магнитные свойства людвигита  $Cu_2MnBO_5$  представлены в работах [3, 4, 5]. При температуре T = 92 К происходит переход в ферримагнитную фазу [4]. Эффективный магнитный момент, рассчитанный для соединения во внешних магнитных полях 0,2 к0 и 0 к0, составляет 0,2 к0 и 0

В представленном докладе мы анализируем структурные и магнитные свойства людвигита  $Cu_2MnBO_5$ , легированного Cr, с низкой концентрацией ионов Cr. Кристаллы  $Cu_2MnBO_5$ :Cr были выращены методом из раствора расплава. Полученные кристаллы имеют форму чёрных вытянутых призм размером до  $0.5\times0.5\times3$  мм<sup>3</sup>.  $Cu_2MnBO_5$ :Cr имеет пространственную группу  $P2_1/c$ . Согласно результатам уточнения по методу Ритвельда, его кристаллографические параметры составляют a=3.12237(5) Å, b=9.38284(5) Å, c=12.03730(5) Å,  $\beta=92.599(5)$ . По сравнению с нелегированным людвигитом  $Cu_2MnBO_5$ , параметры а и b короче на 0.02 Å, а с — на 0.015 Å длиннее. Угол  $\beta$  также увеличивается на 0.34 градуса после введения ионов хрома.

Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости представлена на рисунке а. Для определения температуры фазового перехода были получены первые производные магнитной восприимчивости, которые показаны на вставке рисунка а. При двух температурах 52К и 59К наблюдаются точки экстремума. Как видно из рисунка, наклон кривой обратной магнитной восприимчивости меняется при изменении приложенного внешнего магнитного Аппроксимируя температурную зависимость обратной магнитной поля. законом Кюри-Вейсса, восприимчивости установили зависимость эффективного магнитного момента и температуры Кюри-Вейсса (см. рисунок б). Согласно данным АС намагниченности, в соединении наблюдается переход их парамагнитного состояния в спиновое стекло. Показано, что при температурах выше комнатной, термоэдс достигает значений mV/K.



Температурные зависимости (a) эффективного магнитного момента и температуры Кюри-Вейсса от внешнего магнитного поля

(б) обратной магнитной восприимчивости в Cu<sub>2</sub>MnBO<sub>5</sub>:Cr Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-72-00047.

### Литература

- 1. Popov D.V. Magnetic properties of ludwigite Mn<sub>2.25</sub>Co0<sub>.75</sub>BO<sub>5</sub> / D.V. Popov, T.P. Gavrilova, I.F. Gilmutdinov, M.A. Cherosov, V.A. Shustov, E.M. Moshkina, L.N. Bezmaternykh, R.M. Eremina // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2021. V. 148. P. 109695.
- 2. Popov D.V. Magnetism and specific heat of ludwigites  $Mn_{1.17}Co_{1.83}BO_5$  and  $Mn_{1.39}Co_{1.61}BO_5$  / D.V.Popov, T.P. Gavrilova, M.A. Cherosov, V.A. Shustov, E.M. Moshkina, I.I. Fazlizhanov, R.M. Eremina // Journal of Alloys and Compounds. 2024. V. 976. P.173143.
- 3. Sofronova S. Crystal growth, structure, magnetic properties and theoretical exchange interaction calculations of  $Cu_2MnBO_5$  // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2016. V.420. P.309-316.
- 4. Moshkina E. Magnetic structure of  $Cu_2MnBO_5$  ludwigite: thermodynamic, magnetic properties and neutron diffraction study / E. Moshkina, C. Ritter, E. Eremin, S. Sofronova, A. Kartashev, A. Dubrovskiy, L. Bezmaternykh // Journal of Physics: Condensed Matter. 2017. V. 29(24). P.245801.
- 5. Dubrovskiy A.A. EPR-Determined Anisotropy of the g-Factor and Magnetostriction of a  $Cu_2MnBO_5$  Single Crystal with a Ludwigite Structure. / A.A. Dubrovskiy, M.V. Rautskii, E.M. Moshkina, I.V.Yatsyk, R.M. Eremina // JETP Letters. 2017. V.106. P.716-719.

## ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВАЯ ФОРМА МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

А. Ю. Захаров

Работа содержит обобщение нерелятивистской классической механики системы взаимодействующих атомов на случай релятивистский теории. Взаимодействие между атомами учитывается в рамках концепции ковариантного вспомогательного поля, которое только лишь в нерелятивистском пределе эквивалентно мгновенным межатомным потенциалам. Установлено, что вспомогательное поле является суперпозицией элементарных полей, каждое из которых удовлетворяет уравнениям типа Клейна-Гордона-Фока. Представлены вещественная и комплексная формы релятивистского гамильтониана системы взаимодействующих частиц с учётом полевых степеней свободы. Гамильтониан содержит три вклада, соответствующие свободным частицам, свободным полям типа Клейна-Гордона-Фока и взаимодействиям между частицами и полями. Исходя из вариационной постановки задач релятивистской молекулярной динамики, получена точная замкнутая релятивистская система уравнений, описывающая эволюцию системы атомов и вспомогательного поля в рамках гамильтоновой картины. Выполнен анализ качественных свойств решений уравнений динамики системы.

Ключевые слова: межатомные потенциалы; концепция вспомогательного поля; классическая релятивистская молекулярная динамика; гамильтониан; канонические уравнения.

Основными методами теоретического исследования кинетических процессов конденсированных систем являются неравновесная статистическая молекулярной метод динамики, которые нерелятивистской представлениях классической механики. Однако, классическая механика находится неустранимом противоречии В термодинамикой [1], поэтому для непротиворечивого микроскопического объяснения и/или описания необратимых процессов требуется выход за пределы классической механики.

Одним из вариантов решения этой проблемы является переход от нерелятивистской классической механики к классической релятивистской электромагнитное механике. Межатомные взаимодействия имеют происхождение и в классической молекулярной динамике используются межатомные потенциалы [2]. В релятивистском модельные взаимодействий используется концепция вспомогательного межатомных поля [3,4,5], которое статическом случае эквивалентно статическому межатомному потенциалу v(r), а в динамическом случае является ковариантным скалярным полем  $\varphi(\mathbf{r},t)$ . Установлено, что  $\varphi(\mathbf{r},t)$  является линейной комбинацией элементарных вспомогательных полей  $\varphi_s(\mathbf{r},t)$ , каждое из которых удовлетворяет уравнениям типа Клейна-Гордона-Фока. Массовые параметры  $\mu_s$  полей  $\varphi_s(\mathbf{r},t)$  однозначно определяются особыми точками Фурьетрансформанты  $\tilde{v}(k^2)$  межатомного потенциала на комплексной плоскости переменной k.

Таким образом, в рамках релятивистской теории метод молекулярной динамики включает следующие действия:

- выбор модельного межатомного потенциала и нахождение особых точек Фурье-трансформанты этого потенциала на комплексной плоскости переменной *k*;
- формулировка вариационного принципа для системы "атомы + элементарные вспомогательные поля" и вывод полной системы уравнений динамики атомов и элементарных полей;
- полная система уравнений динамики состоит из двух подсистем:
  - (і) уравнения динамики полей, создаваемых атомами эти уравнения допускают точное аналитическое решение;
  - (ii) уравнения динамики атомов во вспомогательном поле.

Помимо численного решения уравнений динамики "атомы + вспомогательные поля" интерес представляют исследование качественных свойств решений этих уравнений. Основные результаты в этом направлении заключаются в следующем:

- разработана релятивистская модель межатомных взаимодействий в конденсированных системах;
- показано, что микроскопическое обоснование термодинамики не нуждается в концепция вероятности;
- найдена гамильтонова форма уравнений динамики атомов и вспомогательных полей, что позволяет использовать хорошо разработанные гамильтоновы методы в исследовании кинетических процессов в конденсированных системах;
- установлен динамический (нестатистический) механизм, обеспечивающий термодинамическое поведение не только макроскопических систем, но и малочастичных систем (few-body systems).

## Литература

- 1. Zakharov A. Yu. On the microscopic origin of thermodynamics and kinetics. Status and prospects / A. Yu. Zakharov // Physics Letters A.-2025.-T.534.-C.1-3.
- 2. Kamberaj H. Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications / H. Kamberaj. Cham: Springer, 2020. 470 c.
- 3. Zakharov A.Yu. Field-theoretical representation of interactions between particles: classical relativistic probability-free kinetic theory / A. Yu. Zakharov, V. V. Zubkov // Universe. 2022.-T.8.- Вып.5. С.281.
- 4. Zakharov A.Yu. Field Form of the Dynamics of Classical Many- and Few-Body Systems: From Microscopic Dynamics to Kinetics, Thermodynamics and Synergetics / A. Yu. Zakharov // Quantum Reports. 2022.-T.4.- Вып.4.- C.533-543.
- 5. Захаров А. Ю. Релятивистская модель межатомных взаимодействий в конденсированных системах / А. Ю. Захаров, М. А. Захаров // Конденсированные среды и межфазные границы. 2023. T.25. Вып. 4. C.494-504.

## ВНУТРЕННЕЕ ТРЕНИЕ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН С ДЕФЕКТАМИ

В.Г. Кульков $^{1}$ , Д.Ш. Норов $^{2}$ 

<sup>1</sup>Профессор, д. ф.-м. н., <u>vikulkov@yandex.ru</u>

<sup>2</sup>Аспирант, <u>jonibeck.norov@mail.ru</u>

Филиал ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Московский Энергетический Институт» в городе Волжском

В работе излагаются модели внутреннего трения на границах зерен, содержащих дефекты, такие как ступеньки обоих знаков, протяженные вдоль некоторого направления поры, и поры с равными размерами вдоль двух нормальных направлениях в границе. В зависимости от температуры, частоты и диффузионной длины вакансий, величина внутреннего трения попадает на одну из трех непараллельных прямолинейных участков, входящих в зависимость произведения внутреннего трения на температуру от обратной температуры.

Ключевые слова: зернограничные вакансии, диффузионная длина, неравновесные границы зерен, релаксация структуры.

Границы зерен редко бывают плоскими в атомном масштабе. Часто они содержат элементы структуры, отклоняющие их от плоскости. Это могут быть ступеньки, смещающие плоскость границы на одно или несколько межатомных расстояний в ту или другую сторону. К дефектам можно отнести и вытянутые зернограничные поры в виде цилиндров, а также поры с близкими размерами вдоль двух перпендикулярных направлений в границе. Под действием переменных нормальных границе напряжений она является источником и стоком зернограничных вакансий. Вакансии диффундируют к стокам, которыми являются либо границы других зерен, либо расположенные в пределах рассматриваемых участков границ поры. В зависимости от соотношения размеров сегментов границ и диффузионной длины вакансий за половину периода колебаний напряжения, может наблюдаться различие в энергии активации процесса. При этом на графике зависимости произведения величины внутреннего трения на температуру от обратной температуры наблюдаться два или три прямолинейных участка с разными углами наклона к оси абсцисс. Точка их пересечения определяется равенством размера плоского участка границы и диффузионной длины вакансий.

Появление второй точки пересечения прямолинейных участков связано с неравновесной атомной структурой границ зерен. При высоких температурах концентрация тепловых вакансий в границе может сравниваться и превышать концентрацию избыточных вакансий, характерных для границ зерен в неравновесном состоянии. И тогда вблизи точки плавления возникает третий прямолинейный участок на этом графике. Задачи могут быть рассмотрены в одномерном или двумерном приближениях. Время релаксации структуры границы может быть оценено из изменения внутреннего трения со временем.

## ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА α- И β-РЕЛАКСАЦИЮ В АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Ю.Е. Калинин<sup>1</sup>, В.Б. Багатнов<sup>2</sup>, В.А. Макагонов<sup>3</sup>, М.А. Каширин<sup>4</sup>, И.И. Попов<sup>5</sup>, В.А. Фошин<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Профессор, <u>kalinin48@mail.ru</u>

<sup>2</sup>Аспирант, bagatnov@bk.ru

<sup>3</sup>Доцент, vlad\_makagonov@mail.ru

<sup>4</sup>Инженер-исследователь, mnitro@ya.ru

<sup>5</sup>Младший научный сотрудник, popovich\_vano@mail.ru

<sup>6</sup>Аспирант, vadim.foshin@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

Проведен анализ результатов последних исследований неупругих явлений по установлению природы  $\alpha$ - и  $\beta$ -релаксации в аморфных твердых телах различного типа и состава. Наблюдаемые максимумы  $\beta$ -релаксации в аморфных твердых телах связываются с переориентацией упругих диполей в области дефектов аморфной структуры, а  $\alpha$ -релаксации с диффузией самих дефектов. При этом экспоненциальный рост внутреннего трения в области  $\alpha$ -релаксации связывается с миграцией вакансиоподобных дефектов в аморфной структуре под действием механических напряжений.

Ключевые слова: аморфные тела,  $\alpha$ -релаксация,  $\beta$ -релаксация, температура стеклования.

В докладе представлены результаты исследования по влиянию кислородных вакансий на неупругие свойства тонкопленочных металлических стекол, оксидов металлов и аморфных полимеров. Внутреннее трение (ВТ) измеряли методом свободно затухающих изгибных колебаний образца в интервале температур от 300 до 800 К на инфранизких частотах по методике, описанной в работе [1].

На рис. а представлена температурная зависимость внутреннего трения образца, состоящего из пленки аморфного оксида олова на кремниевой подложке. На представленной зависимости наблюдаются два главных максимума. Положение первого широкого максимума ВТ при  $T \sim 600~\mathrm{K}$  слабо изменяется с изменением частоты механических колебаний и, по аналогии с полимерами, может быть классифицирован как максимум  $\beta$  – релаксации, а второй более высокий максимум (при  $T \sim 690~\mathrm{K}$ ) – как максимум  $\alpha$  – релаксации [2]. Максимумы  $\beta$ -релаксации, наблюдаемые при  $T_{\beta 1} = 585~\mathrm{K}$  и  $T_{\beta 2} = 603~\mathrm{K}$  объясняются наличием вакансиоподобных дефектов, создающих упругие диполи, которые переориентитуются в поле упругих напряжений.

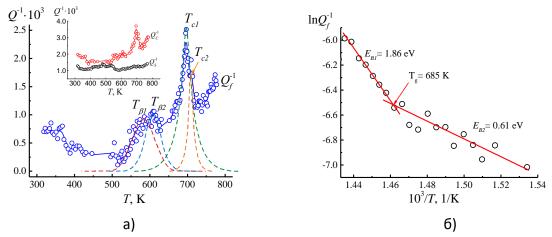
Анализ температурной зависимости ВТ показал, что рост внутреннего трения при температурах выше 650 К связан с миграцией кислородных вакансий и описывается уравнением [3]:

$$Q^{-1} = Q_0^{-1} \exp\left(-\frac{E_m}{2kT}\right) \tag{1}$$

на низкотемпературном участке с энергией миграции  $E_m = 1.22 \pm 0.08$  эВ и уравнением

$$Q^{-1} = Q_0^{-1} \exp\left(-\frac{E_m/2 + E_v}{kT}\right). \tag{2}$$

на высокотемпературном участке с энергией образования  $E_v = 1.25 \pm 0.08$  эВ (рис. б).



Температурные зависимости внутреннего трения аморфного оксида олова в координатах  $Q^{-1}\propto T$  (а) и  $\ln Q^{-1}\propto 1/T$  (б) с подложкой (  $Q_C^{-1}$  ), подложки из кремния (  $Q_S^{-1}$  ) и пленки

Аналогичные закономерности изменения ВТ в области максимума арелаксации наблюдаются и на температурной зависимости внутреннего трения полимерной аморфной структуры эпоксидного связующего Т20-60 вблизи температуры стеклования. В отвержденном при комнатной температуре связующем Т20-60 в области  $\alpha$ -релаксации на зависимости  $\ln Q^{-1}(1/T)$  для низкотемпературной ветви максимума  $Q^{-1}$  наблюдаются три прямолинейных участка с разными углами наклона. В доотверждённом полимере Т20-60 в области  $\alpha$ -релаксации на зависимости  $\ln Q^{-1}(1/T)$  для низкотемпературной ветви максимума  $Q^{-1}$  наблюдаются два прямолинейных участка с разными углами наклона, связываемые миграцией вакансиоподобных лефектов сформировавшейся полимерной сетки. Сделаны оценки энергии миграции и энергии образования вакансиоподобных дефектов основной полимерной сетки, которые оказались равны  $E_{m2} = 0.88 \pm 0.08$  эВ и  $E_{v2} = 0.91 \pm 0.08$  эВ.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZGM-2023-0006).

## Литература

- [1] S.A. Gridnev [и др.] J. Alloys Compd. 918 (2022). 165610.
- [2] Ю. Е. Калинин [и др.] Высокомолекулярные соединения. Серия А 64(1) (2022) 3–12.
- [3] K.S. Gabriels [и др.] Thin Solid Films 804 (2024) 140504.

## ЭНТРОПИЙНЫЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРНОЙ УПОРЯДОЧЕННОСТИ, СКЛОННОСТИ К РЕЛАКСАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ И ИХ РАСПЛАВОВ

А.С. Макаров<sup>1</sup>, Н.П. Кобелев<sup>2</sup>, В.А. Хоник<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>a.s.makarov.vrn@gmail.com</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник ФГБУН ИФТТ РАН, <u>kobelev@issp.ac.ru</u>

<sup>34</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Использование термодинамических потенциалов и, в том числе энтропии, для анализа свойств переохлажденных расплавов было начато весьма давно, в конце 90-х годов прошлого века. При этом, как правило, вычислялись избыточные потенциалы переохлажденного расплава по отношению к материнскому кристаллу. Анализ свойств собственно стекла при этом выпадал Недавно нами был рассмотрения. предложен термодинамических потенциалов стекла по отношению к материнскому кристаллу (Makarov et al. J. Phys. Cond. Matter 33 (2021) 435701). Метод основан на калориметрических исследованиях стекла (при температурах от комнатной до полной кристаллизации) и кристалла. В частности, избыточная энтропия стекла по отношению к кристаллу определяется как  $\Delta S(T) = \frac{1}{T} \int_{T}^{T_{cr}} \frac{\dot{\Delta}W(T)}{T} dT$ , где  $\Delta W(T)=W_{gl}(T)-W_{cr}(T)$ , где  $W_{gl}(T)$  и  $W_{cr(T)}$  — тепловые потоки от образца в состоянии стекла и после полной кристаллизации при  $T = T_{cr}$ , соответственно,  $\dot{T}$  – скорость нагрева.

Исследования показали, что применение такого метода расчета избыточной энтропии стекла  $\Delta S$  (как и аналогичные вычисления других термодинамических потенциалов) является весьма плодотворным и приводит к ряду интересных и важных результатов. При этом использование этого метода, с некоторыми оговорками, возможно и для неметаллических стекол (например, теллуритных).

На рис. 1 показан пример расчета избыточной энтропии  $\Delta S$  стекла  $\mathrm{Pd}_{40}\mathrm{Ni}_{40}\mathrm{P}_{20}$  в исходном состоянии и после релаксации путем нагрева в состояние переохлажденной жидкости (т.е. выше температуры стеклования  $T_g$ ). Нагрев от комнатной температуры до  $T_g$  вызывает снижение  $\Delta S$ , отражающее структурное упорядочение вследствие экзотермической релаксации. Выше  $T_g$  величина  $\Delta S$  быстро растет из-за растущего с температурой разупорядочения в состоянии переохлажденной жидкости, затем начинает падать вследствие начала кристаллизации при температуре  $T_x$  и, наконец, становится нулевой в результате полной кристаллизации при  $T = T_{cr}$ . Характеристические точки зависимости  $\Delta S(T)$  – значения избыточной энтропии при комнатной температуре  $\Delta S(T_{rt})$ , при температуре стеклования  $\Delta S(T_g)$  и в конце интервала переохлажденной жидкости  $\Delta S(T_{sql})$  – можно использовать для анализа различных свойств стекла.

Введение параметра беспорядка  $\alpha = \Delta S/S_m$  ( $S_m$ -энтропия плавления, рассчитываемая стандартно по данным калориметрии) позволяет охарактеризовать эволюцию структурного порядка. Если  $\Delta S \to S_m$ , то  $\alpha \to 1$  и порядок в стекле близок к таковому в расплаве при температуре ликвидус.

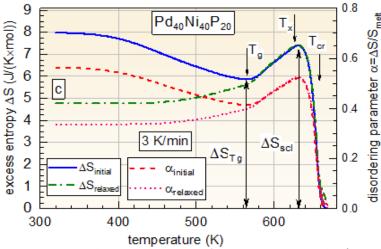


Рис.1. Избыточная энтропия  $\Delta S$  и параметр беспорядка  $\alpha = \Delta S/S_m$  стекла  $\mathrm{Pd}_{40}\mathrm{Ni}_{40}\mathrm{P}_{20}$  в исходном и релаксированном состояниях в зависимости от температуры. Показаны характеристические температуры — стеклования  $T_g$  , начала кристаллизации  $T_x$  и полной кристаллизации  $T_{cr}$ .

Наоборот, если  $\Delta S \to 0$ , то  $\alpha \to 0$  и порядок в стекле является кристаллоподобным. На рис.1 показана эволюция параметра беспорядка  $\alpha$  стекла  $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$  в зависимости от температуры и предварительной релаксации. Подчеркнем, что величина  $\Delta S$  очень чувствительна к условиям эксперимента.

Вычисления избыточной энтропии для большого числа металлических стекол привели к следующим результатам.

- 1. Определены температурные зависимости параметра беспорядка  $\alpha$  (и параметра порядка  $\xi=1-\alpha$ ) для большого числа металлических стекол в исходном и релаксированном состоянии, позволяющие охарактеризовать не только эволюцию структуры (упорядочение/разупорядочение) данного стекла в зависимости от температуры и его тепловой предыстории, но соотношение структурного упорядоченности стекол разных химических составов (и даже разных типов стекол).
- 2. Избыточная энтропия  $\Delta S_{scl}$  коррелирует с величинами сдвиговой вязкости  $\eta$  стекла при  $T=T_g$  и кинетической фрагильности стекла  $m=\left(\frac{\partial ln\eta}{\partial (T_g/T)}\right)_{T=T_g}$ .
- 3. Избыточная энтропия  $\Delta S$  (вычисляемая при любой из вышеуказанных характеристических температур) обратно пропорциональна энтропии смешения, часто используемой в литературе для описания свойств металлических стекол.
- 4. Параметры порядка  $\xi(\tilde{T} = T_{scl})$  и беспорядка  $\alpha(T = T_{scl})$  характеризуют стеклообразующую способность (СОС) материнских расплавов. При этом имеется корреляция не только с относительными характеристиками СОС (определяемыми комбинацией различных характеристических калориметрических температур), но и с абсолютными характеристиками СОС в виде критической скорости закалки и критического диаметра.
- 5. Вычисления избыточной энтропии  $\Delta S$  стекла дают новую информацию о природе стеклования.

Работа поддержана РНФ в рамках проекта № 23-12-00162.

## DOMAIN KINETICS UNDER THE ACTION OF THE PYROELECTRIC FIELD CREATED BY PULSE LASER IRRADIATION

V.Ya. Shur
Chief Researcher, vladimir.shur@urfu.ru
Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University

The paper presents the results of a study of the evolution of the domain structure in uniaxial ferroelectrics under the action of a pyroelectric field arising as a result of a spatially nonuniform temperature change caused by pulsed infrared laser irradiation. Particular attention is paid to the domain nucleation and growth in the sample volume stimulated by tightly focused irradiation in the near- infrared range created by a femtosecond laser.

Keywords: lithium niobate, lithium tantalate, screening, depolarizing field, femtosecond laser, self-assembling

The appearance of a pyroelectric field in ferroelectrics because of temperature change is caused by a delay in the screening/compensation of a change in the depolarizing field created by bound charges. The time dependence of the pyroelectric field is determined by relaxation of the screening charges. The resulting field can be sufficient to change the domain structure, thus opening the opportunities for polarization reversal due to a temperature change only without applying any electric field. At present, the creation of the tailored domain structure under the action of pulsed laser radiation is considered as a promising method of domain engineering [1]. It is important to point out that absence of the surface electrodes leads to the disappearance of the external screening of depolarization field which stimulates the interaction between charged domain walls and formation of the self-assembled domain structures.

Two versions of this approach have been implemented: using absorbed and non-absorbed laser light. Radiation in the ultraviolet and far infrared range, which is strongly absorbed in the surface layer of almost all ferroelectrics, leads to a non-uniform temperature change and the creation of the pyroelectric field for domains switching [2]. In this case, the stripe domains of submicron width grow in the directions defined by the crystal symmetry. The appeared self-assembled quasi-regular domain structures are nucleated only at the surface and subsequently grow in certain directions [3,4]. Nevertheless, this method does not allow to realize the precise controlling of the individual domain positions and the creation of three-dimensional domain structures in the crystal bulk.

The domains nucleation in the crystal bulk was achieved for the first time using tightly focused irradiation by a femtosecond laser in the near-infrared range. The main idea of this method is based on multiphoton absorption of radiation from the transparent spectral range localized only in the focusing region with a high energy density which can achieved by femtosecond laser irradiation. In 2015, the light-only

domain switching in the crystal bulk was demonstrated firstly in the lithium niobate LiNbO<sub>3</sub> crystal [5]. Further studies allowed investigators to expand the number of ferroelectrics used for creation of two-dimensional and three-dimensional tailored domain structures [6].

We have studied the process of creating domain structures by local irradiation and linear scanning with femtosecond laser radiation in LiNbO<sub>3</sub> and lithium tantalate LiTaO<sub>3</sub> crystals being among the most popular nonlinear optical materials using Cherenkov type confocal microscopy for domain imaging in the crystal bulk [7,8]. It is suggested that the domain nucleation near the focal point is caused by depolarizing field that arises near the nonpolar inclusions created by irradiation, and further growth of domains is due to the pyroelectric field arising due to the change in temperature [7]. The creations of three-dimensional nonlinear photonic crystals and stable periodic domain structures in the volume are demonstrated [8].

The work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 24-12-00302. The equipment of the Ural Center for Collective Use "Modern Nanotechnologies" of the Ural Federal University (registration number 2968) was used.

#### References

- 1. Shur V.Ya. Micro- and nano-domain engineering in lithium niobate / V.Ya. Shur, A.R. Akhmatkhanov, I.S. Baturin // Appl. Phys. Rev. 2015. V. 2. P. 040604.
- 2. Shur V.Ya. In situ investigation of formation of self-assembled nanodomain structure in lithium niobate after pulse laser irradiation / V.Ya. Shur, D.K. Kuznetsov, E.A. Mingaliev, E.M. Yakunina, A.I. Lobov, A.V. Ievlev // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99 No. 8 P. 082901.
- 3. Shur V.Ya. Self-assembled shape evolution of the domain wall and formation of nanodomain wall traces induced by multiple IR laser pulse irradiation in lithium niobate / V.Ya. Shur., E.A. Mingaliev, M.S. Kosobokov, M.S. Nebogatikov, A.I. Lobov, A.V. Makaev // J. Appl. Phys. 2020. V. 127. P. 094103.
- 4. Shur V.Ya. Dimensionality increase of ferroelectric domain shape by pulse laser irradiation / V.Ya. Shur, M.S. Kosobokov, A.V. Makaev, D.K. Kuznetsov, M.S. Nebogatikov, D.S. Chezganov, E.A. Mingaliev // Acta Materialia 2021. V. 219, P. 117270.
- 5. Chen X. Ferroelectric domain engineering by focused infrared femtosecond pulses / X. Chen, P. Karpinski, V. Shvedov, K. Koynov, B. Wang, J. Trull, C. Cojocaru, W. Krolikowski, Y. Sheng // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 107. P. 141102.
- 6. Sheng Y. Research progress on femtosecond laser poling of ferroelectrics / Y. Sheng, X. Chen, T. Xu, S. Liu, R. Zhao, W. Krolikowski // Photonics. 2024. V. 11. P. 447.
- 7. Lisjikh B. The creation of a domain structure by using ultrashort pulse NIR laser irradiation in the bulk of MgO-doped lithium tantalate / B. Lisjikh, M. Kosobokov, V. Shur // Photonics. -2024. -V. 11. -No 10. -P. 928.
- 8. Lisjikh B. Creation of a periodic domain structure in MgOLN by femtosecond laser irradiation / B. Lisjikh, M. Kosobokov, A. Turygin, A. Efimov, V. Shur // Photonics. -2023.-V. 10. -No 11. -P. 1211.

## **REGULAR REPORTS**

## SESSION 1 THEORY OF RELAXATION PHENOMENA IN SOLIDS

## DYNAMIC HETEROGENEITIES IN THE ±J SPIN GLASSES THROUGH THE PRISM OF LOCAL FIELDS

V.A. Abalmasov Senior Researcher, PhD, v.a.abalmasov@math.nsc.ru Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russia

The absolute value of the local field in spin glasses determines the spin-flip probability. The average domain size for zero and nonzero absolute values of the local field in the  $\pm J$  spin glass is calculated using the Monte Carlo method and related to dynamical heterogeneities. It turns out that the average domain size for nonzero absolute values of the local field, corresponding to slow spin dynamics at low temperature, increases and saturates with decreasing temperature, mainly due to the increase in the probability of finding nonzero local fields.

Key words: spin glasses, glasses, spin relaxation, dynamical heterogeneity.

Spin glasses, like structural glasses, are characterized by a strong slowdown in dynamics at low temperature. At the same time, this dynamics is not uniform in space. There are domains of slow and fast dynamics at a given temperature [1-2]. Studying these domains at low temperature is difficult due to the slow spin dynamics and the resulting long simulation time. However, in spin glasses the spin-flip probability is determined by the local field value by the Boltzmann exponential. Thus, the domains of nonzero local field, the size of which we measured in the  $\pm J$  spin glass using Monte Carlo simulations for samples of size L = 100 in 2D and 3D (Fig. 1), reproduce the slow dynamics domains of interest.

(b)

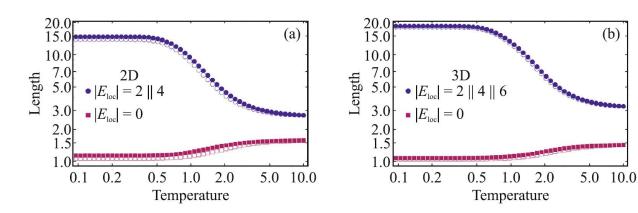


Fig. 1. Average domain size for zero and non-zero absolute values of the local field vs temperature for the  $\pm J$  Ising model in 2D (a) and 3D (b). Filled markers correspond to the direct measurements. Empty markers correspond to the calculation from the probabilities of those local fields, assuming absence of their correlation. The difference is less than about 10% in 2D and half that in 3D. The glass transition temperature is zero in 2D and  $T_g = 1.102$  in 3D.

It turns out that the main reason of domain growth at low temperature is the increasing probability of a nonzero local field. The effect of spacial correlations of different domains is present, but it is very small, which is highlighted in Fig.1 by the difference in the values of the measured domain sizes (filled marks) and those calculated from the probabilities of local fields (empty marks) [3].

This work was supported by the Russian Science Foundation under grant #23-22-00320.

### References

- 1. Berthier L. Direct Experimental Evidence of a Growing Length Scale Accompanying the Glass Transition / L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, L. Cipelletti, D. El Masri, D. L'Hote, F. Ladieu, M. Pierno // Science. 2005. Т. 310. Вып. 5755. С. 1797-1800.
- 2. Glotzer S.C. Dynamical heterogeneity in the Ising spin glass / S.C. Glotzer, N. Jan, T. Lookman, A.B. MacIsaac, and P.H. Poole // Phys. Rev. E. 1998. Т. 57. Вып. 6. С. 7350-7353.
- 3. Abalmasov V.A. Local Field and Dynamic Heterogeneities in the  $\pm J$  Ising Spin Glasses / V.A. Abalmasov // JETP Letters. 2024. T. 120. C. 898-903.

## ABOUT REPOLARIZATION OF FERROELECTRICS IN THE FIRST ORDER PHASE TRANSITION REGION

V.N. Nechaev<sup>1</sup> and A.V. <u>Shuba<sup>2</sup></u>

<sup>1</sup>Doct. of phys.-math. sci, Prof., wladnic@mail.ru

<sup>2</sup>Doct. of phys.-math. sci, Prof., shandvit@rambler.ru

Military Educational and Scientific Centre of the Air Force N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy (Voronezh)

Annotation. The features of phase switching of ferroics in a two-phase temperature region are discussed using the theory of Markov random processes.

Keywords: metastable region of phase transition, Markov random process, free energy.

The two-phase state is observed in ferroelectrics, ferroelastics near the first-order phase transitions, and also in alloys with shape memory effect close to the martensitic transition [1]. As it is known [2], the repolarization ferroelectrics (FE) in the metastable temperature region  $[T_C,T_0]$  of the first order phase transition (PT) takes place through the nucleation and subsequent growth of inverse domains with a field-favorable orientation of the polarization vector. The known theories of hysteresis phenomena are enough complex and apply a significant number of fitting parameters. In this paper, using the example of FE switching in the PT metastability region, it is shown that the main patterns of hysteresis processes can be obtained within the framework of a simple model using the theory of Markov chains.

When the electric field  $E(t) = E_m \sin \omega t$  is turned on along the FE polar axis, the switching process begins from the nucleating of the inverse domains. The state graph of this process is shown in Fig. 1, where state «0» is the absence of the external field; state «1» is the polarization switching under the influence of the field  $\vec{E}(0,0,E)$  to the position  $\vec{P}(0,0,P_3)$ ; state «2» is the polarization switching to the position  $\vec{P}(0,0,-P_3)$  when the field direction is changing.

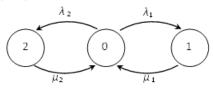


Fig. 1. State graph for the polarization switching process

This model is described by the Kolmogorov system equations:

$$\begin{cases} \frac{dp_0}{dt} = -(\lambda_1 + \lambda_2) p_0 + \mu_1 p_1 + \mu_2 p_2, \\ \frac{dp_1}{dt} = -\mu_1 p_1 + \lambda_1 p_0, \\ \frac{dp_2}{dt} = -\mu_2 p_2 + \lambda_2 p_0. \end{cases}$$
(1)

Here the transition intensities have the form

$$\lambda_{1}(t) = \omega_{0} \exp\left(-\frac{\Delta F_{2}^{+}(t)}{k_{B}T}\right); \lambda_{2}(t) = \omega_{0} \exp\left(-\frac{\Delta F_{2}^{-}(t)}{k_{B}T}\right);$$

$$\mu_{1}(t) = \omega_{0} \exp\left(-\frac{\Delta F_{3}^{+}(t)}{k_{B}T}\right); \mu_{2}(t) = \omega_{0} \exp\left(-\frac{\Delta F_{3}^{-}(t)}{k_{B}T}\right), \tag{2}$$

where  $\omega_0$  is the natural frequency of oscillations of the phase boundary;  $k_B$  is the Boltzmann constant. The free energy of the FE in the electric field with expansion coefficients  $\alpha = \alpha_0 (T - T_C)$ ,  $\beta$ ,  $\gamma > 0$  has the form

$$f(P,E) = \frac{\alpha}{2}P^2 - \frac{\beta}{4}P^4 + \frac{\gamma}{6}P^6 - EP.$$
 (3)

The signs «+» and «-» in energy barriers  $\Delta F_2$ ,  $\Delta F_3$  in the expression (2) correspond to the positive  $\vec{E}(0,0,E)$  and negative  $\vec{E}(0,0,-E)$  directions of the external field respectively. At positive field direction of the barriers

$$\Delta F_2^+ = f(P_2^E, E) - f(P_1^E, E); \quad \Delta F_3^- = f(-P_2^E, E) - f(-P_3^E, E)$$
 (4)

are decreased, and the barriers

$$\Delta F_2^- = f(-P_2^E, E) - f(-P_1^E, E); \ \Delta F_3^+ = f(P_2^E, E) - f(P_3^E, E)$$
(5)

are increased. When changing field direction the opposite situation takes place with barriers. Here  $P_1$ =0,  $P_2 = \pm \sqrt{\left(\beta - \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}\right)/\left(2\gamma\right)}$ ,  $P_3 = \pm \sqrt{\left(\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}\right)/\left(2\gamma\right)}$  are

the extremum points of free energy  $f(\vec{P},0)$ . The extremum points of the free energy

(3) can be approximately determined using the expressions

$$\pm P_1^E = \Delta P_1^E; \quad \pm P_2^E = \pm P_2 + \Delta P_2^E; \quad \pm P_3^E = \pm P_3 + \Delta P_3^E, \tag{6}$$

where the linear field additions to the polarization have the form

$$\Delta P_1^E = \frac{E}{\alpha}; \quad \Delta P_2^E = \frac{E}{\alpha - 3\beta P_2^2 + 5\gamma P_2^4}; \quad \Delta P_3^E = \frac{E}{\alpha - 3\beta P_3^2 + 5\gamma P_3^4}.$$
 (7)

The numerical solution of the system of differential equations (1) enabled to determine the probabilities of switching polarization to the positions, which is shown in Fig. 1. The FE polarization in this process was calculated using the formula

$$P(E) = P_1^E p_0 + P_3^E p_1 - P_3^E p_2.$$
 (8)

Using expression (8) we obtained the hysteresis loops, depending on the electric field parameters.

### References

- 1. R. Abeyaratne and J. K. Knowles. Evolution of phase transitions: A Continuum Theory. Cambridge University Press, 242 p. 2006.
- 2. V. N. Nechaev and A. V. Shuba. About switching of polarization in a thin ferroelectric film // Int.
- J. Mod. Phys. B. 2023. V. 37 No 28. Art. No 2350241. DOI: 10.1142/S0217979223502417.

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КЛАСТЕРИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ И ХАРАКТЕР ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ПОЛИЛАКТИДЕ С УГЛЕРОДНЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ

Л.В. Ельникова<sup>1</sup>, М.М. Гасымов<sup>2</sup>, О.П. Кузнецова<sup>3</sup>, С.З. Роговина<sup>4</sup>, В.Г. Шевченко<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Научный сотрудник, elnikova@itep.ru, НИЦ Курчатовский институт, ФГБОУ ВО ЮЗГУ

<sup>2</sup>Младший научный сотрудник, mrzlomiraga@mail.ru, ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН

<sup>3</sup>Ст. научный сотрудник, kuznetsova polymer@mail.ru, ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН,

<sup>4</sup>Ведущий научный сотрудник, s.rogovina@mail.ru, ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН,

<sup>5</sup>Главный научный сотрудник, shev@ispm.ru, ИСПМ им. Н.С.Ениколопова РАН

В работе представлен анализ морфологии, электрических и механических характеристик полимерных композиций полилактида с наночастицами восстановленного оксида графена, нанографита с концентрациями 1...20 мас. % на основе данных диэлектрической спектроскопии, дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской микротомографии и просвечивающей электронной микроскопии. Для характеризации процессов диэлектрической релаксации и фазовых переходов в полилактиде при образовании кластеров углеродных наночастиц предложена микроскопическая модель с мономерами на решетке, ее численное решение методом Монте-Карло дает оценки критических свойств нанокомпозитов, позволяет предсказывать их механические свойства в заданном диапазоне концентрации наполнителей.

Ключевые слова: полилактид, восстановленный оксид графена, нанографит, диэлектрическая релаксация, свободные объемы, механические свойства, моделирование, кинетический метод Монте-Карло на решетке.

С 1954 года по настоящее время «зеленые» полимеры привлекают все большее внимание ученых и промышленников в связи с возможностями их использования в медицине, косметике, пищевой отрасли, триботехнике и других сферах. Полимерные нанокомпозиты на основе биоразлагаемого полимера полилактида (ПЛА) с добавками в виде аллотропов углерода, наночастиц восстановленного оксида графена (ВОГ) и наноразмерных графита  $(H\Pi\Gamma)$ , отличаются улучшенными механическими, пластин термическими электропроводящими свойствами ПО сравнению беспримесным ПЛА [1].

В работах [1,2] методом диэлектрической спектроскопии исследованы композиты ПЛА/ВОГ и ПЛА/НПГ в диапазоне концентраций углеродных наночастиц от 0 до 15 и от 0 до 20 мас. % соответственно в полилактиде марки 4043D со степенью кристалличности 30,8 %. Построены частотные зависимости величин диэлектрической проницаемости є', диэлектрических потерь є" и проводимости о в диапазоне частот от  $10^{-1}$  до  $10^6$  Гц, найдены пороги перколяции при 2 мас. % для ПЛА/ВОГ и 7 мас. % для ПЛА/НПГ. С помощью рентгеновской микротомографии [1] получено размерное распределение агрегированных наночастиц ВОГ и НПГ в объеме ПЛА при толщине образцов 0,18-0,25 мм, с помощью растровой электронной микроскопии определены форма и размеры их кластеров в плоскости. По данным механических испытаний построены

концентрационные зависимости механических величин модуля жесткости E, разрывного напряжения  $\sigma_p$  и удлинения при разрыве  $\epsilon_p$ . Обнаружено изменение пористости образцов и степени кристалличности ПЛА в зависимости от концентрации наночастиц.

В частности, при первичном и вторичном нагреве образцов ПЛА/ВОГ при концентрациях от 0,05 до 0,25 мас. % термограммы ДСК [2] показали наличие эндо-пиков энтальпии релаксации перехода из стеклообразного в высокоэластичное состояние при температурах 63,6-68,2°С, экзо-пиков холодной кристаллизации от 111,5°С до115,6°С и пиков плавления при 160-162,4°С. Наблюдаемые переходы связаны с различными релаксационными процессами.

С помощью модели Рауза и Зимма димеров на решетке на основании имеющихся экспериментальных данных для энергии активации и др. величин можно вычислять времена релаксации и размерные параметры, в частности исключенные объемы, предсказывать различные физико-химические свойства полимеров, однако, имеются ограничения модели вблизи температуры стеклования [3]. Усложнение морфологии полимеров в присутствии наночастиц вынуждает учитывать поверхностные эффекты моделированием типа Садлера-Хоффмана [4]. В нашей работе предложена комбинированная модель мономеров на решетке с параметрами агрегации типа Эшелби [5]. Термодинамические свойства нанокомпозитов определяются численно с помощью кинетического метода Монте-Карло [6].

Модель может служить предсказанию механических характеристик нанокомпозитов как эксплуатационных показателей в зависимости от концентрации агрегатов наночастиц ПЛА/ВОГ и ПЛА/НПГ.

## Литература

- 1. Роговина, С.3. Композиции полилактида с углеродными нанонаполнителями: получение, структура, свойства / С.3. Роговина, О.П. Кузнецова, М.М. Гасымов, С.М. Ломакин, В.Г. Шевченко, А.А. Берлин // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2024. Т. 66. N 2. C. 140-155.
- 2. Роговина, С.З. Полимерные композиции на основе полилактида и восстановленного оксида графена / С.З. Роговина, С.М. Ломакин, М.М. Гасымов, О.П. Кузнецова, В.Г. Шевченко, В.П. Мельников, А.А. Берлин // Все материалы. Энциклопедический справочник. Композиционные материалы. 2022. Т. 6. С. 11–19.
- 3. Plazek D.J. Breakdown of the Rouse model for polymers near the glass transition temperature / D. J. Plazek, E. Schlosser, A. Schönhals, and K. L. Ngai // The Journal of Chemical Physics. -1993.-V.98.-P.6488-6491.
- 4. Sadler, D.M. Model for chain folding in polymer crystals / D. M. Sadler and G. H. Gilmer // Polymer. -1994.-V.25.-P.1446-1452.
- 5. Cong, C. A micromechanics model to predict effective thermal conductivity of rGO/MMT/polymer composites. C. Cong, Y. Chen, Z. Huang, S. Bai // Journal of Applied Physics. 2021. V. 129(15). P. 155108.
- 6. Koike, T. Analysis of the hydrolysis behavior of poly(lactic acid) (PLA) and prediction of molecular weight distribution changes via the kinetic Monte Carlo method / T. Koike, Y. Muranaka, Y. Okada, A. Onishi, T. Maki // Polymer Degradation and Stability. 2025. V. 235. P. 111272-1–111272-11.

## STRESS RELIEF IN FERROELECTRIC SOLID SOLUTIONS CONTAINING A TETRAGONAL PHASE IN A MORPHOTROPIC REGION

V.Yu. Topolov
Professor, vutopolov@sfedu.ru
FGAOU VO "Southern Federal University|"

The paper reports specifics of heterophase structures and stress relief therein at a coexistence of two ferroelectric phases from morphotropic regions in solid solutions with a perovskite-type structure, Attention is focused on stress-relief conditions for the coexisting phases (tetragonal and rhombohedral, or tetragonal and orthorhombic), which are split into non-180° domains. An active role of the tetragonal phase and its 90° domain types is discussed in the context of the complete (or incomplete) stress relief.

Keywords: heterophase, stress relief, tetragonal phase, morphotropic region. non-180° domain.

Our analysis of recent papers on heterophase ferroelectric (FE) solid solutions with compositions near a morphotropic phase boundary shows that in many publications, one can find experimental data on a coexistence of two phases, one of which is tetragonal with 4mm symmetry. Often the symmetry of the second phase is either rhombohedral or orthorhombic, for instance, from 3m or mm2 symmetry class, respectively. Recently-studied FE solid solutions, that are of interest as active dielectric materials, are characterised by the perovskite-type structure (see e.g. papers [1–3]). At the same time, the coexistence of three FE phases from different symmetry classes, including the tetragonal phase, is observed relatively rarely. Knowledge of the crystal, domain and heterophase structures is important when studying basic relationships 'composition – structure – properties' as well as when interpreting the role of phases and/or domain types in a relief of an internal stress field. Such a relief contributes to a minimisation of excessive elastic energy in heterophase samples [4]. A main reason for the presence of this energy contribution is associated with differences between spontaneous strains of unit cells of the coexisting morphotropic phases. The aim of the present work is to highlight results on the phase coexistence 'tetragonal rhombohedral' and 'tetragonal - orthorhombic' and on the stress relief in various FE solid solutions.

The heterophase structures are studied within the framework of concept [4]. Orientations and volume fractions of the non-180° domain types are considered in each FE phase and interlayers (Figure). For instance, the tetragonal and rhombohedral phases coexisting in each two-phase region (Figure, a) are described by distortion matrices ||T|| and ||R||, respectively. These matrices take the domain orientations into account and have the following general form:

$$||T|| = n_T ||T_1|| + (1 - n_T) ||M_{rot}|| ||T_2||$$
 (1)

and

$$||R|| = \sum_{i=1}^{4} r_i ||R_i||.$$
 (2)

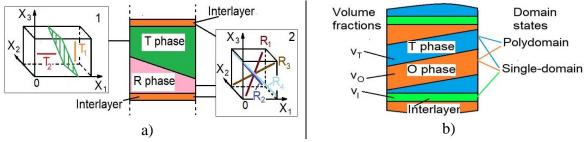


Figure. Schematics of heterophase structures at the tetragonal-rhombohedral phase coexistence (a) and tetragonal-orthorhombic phase coexistence (b).

By analogy with Eq. (2), the distortion matrix of the polydomain interlayer shown in Figure, a is written as

$$||R^*|| = \sum_{j=1}^4 d_j ||R_j||.$$
 (3)

In Eq. (1),  $n_T$  is the volume fraction of the 90° domain type ( $T_1$ ) shown in inset 1 of Figure, a. In Eqs. (2) and (3),  $r_i$  and  $d_j$  are volume fractions of the 71° (109°) domain types ( $R_i$ ) shown in inset 2 of Figure, a. The non-180° domains form mechanical twins. Conditions for the complete stress relief [4] are examined at the interphase boundaries that separate the FE phases and that separate the two-phase region and adjacent interlayer. The similar procedure is applied to the heterophase structure shown in Figure, b.

In the present study, we highlight an active role of the tetragonal phase in achieving complete stress relief at the interphase boundaries mentioned above. This role does not undergo changes when varying the chemical composition of the solid solution in the morphotropic region. The influence of the 90° domains in the tetragonal phase on the phase content is closely related to the anisotropy of the spontaneous strains of the perovskite unit cell in the tetragonal phase. Examples of a tendency of the tetragonal phase to a monodomainisation in some heterophase structures are of independent interest. Based on the volume fractions of the domain types in the coexisting phases, we evaluate their volume fractions. Agreement between the evaluated and experimental results on the volume fractions of the coexisting phases is achieved in most cases at complete stress relief.

This research was supported by the Southern Federal University (contract No. 176/22-D, July 11th, 2022).

#### References

- 1. Phase evolution, dielectric, ferroelectric, and piezoelectric properties of  $Bi(Mg_{0.5}Hf_{0.5})O_3$ -modified  $BiFeO_3$ – $BaTiO_3$  / W. Wang, X.-G. Tang, Y.-P. Jiang et al. // Mater. Chem. Today. -2022. Vol. 24. Art. No. 100825.
- 2. A combined powder x-ray and neutron diffraction studies on (1 x)NaNbO<sub>3</sub>–xNa<sub>0.50</sub>Bi<sub>0.50</sub>TiO<sub>3</sub> solid solution / V.B. Jayakrishnan, S.K. Mishra, A.B. Shinde et al. // J. Solid State Chem. 2023. Vol. 322. Art. No. 123996.
- 3. Dhifallah N. Orthorhombic–tetragonal phase coexistence and enhanced piezoelectric properties at room temperature in Zn and Ta modified  $(Ba_{0.95}Ca_{0.05})(Zr_{0.05}Ti_{0.95})O_3$  ceramics through the synergistic effect of lattice distortion / N. Dhifallah, M.A. Hentati, H. Khemakhem // RSC Adv. -2024. Vol. 14, N 37. P. 27042–27059.
- 4. Topolov V.Yu. Heterogeneous ferroelectric solid solutions. Phases and domain states. 2nd ed. Cham: Springer International, 2018. 192 p.

## КРИТИЧЕСКИЙ ТОК В ОКСИДНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ С МАЛОУГЛОВЫМИ ГРАНИЦАМИ НАКЛОНА И ОДНОМЕРНЫМ ДВОЙНИКОВЫМ ДЕФЕКТОМ

Ю.А. Померанцев

Канд. физ.-мат. наук, доцент, pomerant\_yu@mail.ru ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Вычислены компоненты тензора напряжений малоугловой границы наклона высокотемпературного сверхпроводника, образованной чередующимися сорока пяти градусными дислокациями и содержащей одномерный двойниковый дефект. Определена упругая энергия одномерного двойникового дефекта границы. Вычисленная зависимость критического тока высокотемпературного сверхпроводника от угла наклона границы с одномерным двойником удовлетворительно соответствует экспериментальным данным.

Ключевые слова: малоугловые границы наклона, частичные дислокации, высокотемпературные сверхпроводники, плотность критического тока.

На рис. а) представлена граница наклона в высокотемпературном сверхпроводнике (ВТСП)  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ , образованная 45° дислокациями с осью наклона [001], медианной плоскостью (110) и содержащая одномерный двойниковый дефект. Дислокации с номерами 1, 3 и 4 имеют вектор Бюргерса  $\vec{b}_1 = \frac{a}{2}$  [001], а дислокации с номерами 2 и 5 имеют вектор Бюргерса  $\vec{b}_2 = \frac{a}{2}$  [101]. Область вокруг дислокации 3 представляет собой одномерный двойниковый дефект границы наклона.

Выражение для упругой энергии нерелаксированного дефекта типа одномерного двойника на единицу длины дислокации получено в рамках теории упругости в виде:

$$W_1^L \cong \frac{\mu}{4\pi} \frac{b_x^2 (3 - 2\sigma)}{1 - \sigma} \left[ C + \ln \frac{h}{r_{450}} \right]. \tag{1}$$

Здесь h — расстояние между дислокациями в границе,  $r_{45^0}$  - радиус ядра 45° дислокации,  $b_x$  - наклонная компонента вектора Бюргерса 45° дислокации.

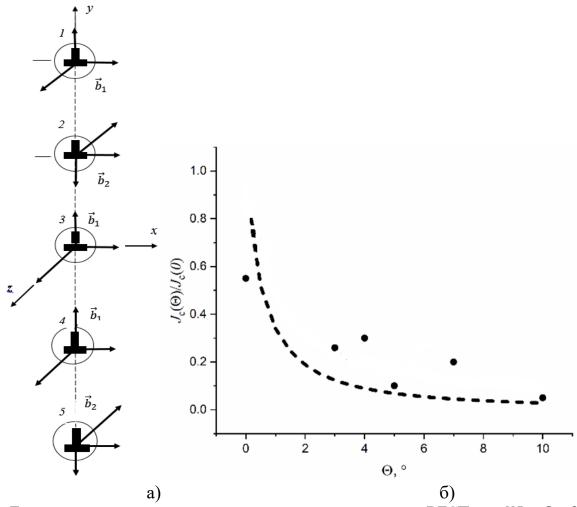
Зависимость критического тока ВТСП от угла наклона границы определялась подобно тому, как это сделано в работах [1,2] по формуле

$$J_c(\theta) = J_c(0) \frac{1}{S} \iint \exp\left(-\frac{d(y,z)}{\xi}\right) dy dz . \tag{2}$$

Здесь d(y,z) - толщина неидеальной области границы зерна,  $\xi$  – характеристическая длина затухания ВТСП.

График зависимости величины критического тока ВТСП от угла наклона границы представлен на рис. б). Анализ показал, что незначительное увеличение упругой энергии дислокационной границы наклона с одномерным двойником по сравнению с упругой энергией регулярной границы наклона, образованной

чередующимися 45° дислокациями, не приводит к существенному изменению зависимости величины критического тока ВТСП от угла наклона границы по сравнению с зависимостью критического тока от угла наклона регулярной границы, что позволяет предполагать о наличии такого типа дефектов в границах зерен ВТСП.



а) Дислокационная модель границы наклона ВТСП  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ , содержащей одномерный двойниковый дефект границы; б) зависимость приведенной плотности критического тока  $J_c(\theta)/J_c(0)$  от угла наклона границы  $\theta$ ; точки – экспериментальные данные [1], пунктирная – теоретическая кривая для границы наклона ВТСП  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ , образованной 45° дислокациями и содержащей одномерный двойниковый дефект.

### Литература

- 1. Бобылев С.В. Дислокационная структура и транспортные свойства малоугловых границ наклона в высокотемпературных сверхпроводниках/ С.В. Бобылев, И.А. Овидько // Журнал технической физики. -2003.- Т. 73.- Вып. 6.- С. 61-65.
- 2. Pomerantsev Yu.A. Transport properties of low-angle grain boundaries in high-temperature superconductors in the model of split dislocations of the boundary/ Yu.A. Pomerantsev// Bulletin of the Russian Academy of Science: Physics. 2023. Vol. 87. No. 9. pp.1405-1410.

## РАСЧЁТ НЕКОТОРЫХ НЕУПРУГИХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ МАРЧЕНКО – МИСБАХА

Д.О. Фролов<sup>1,2</sup> fdolegovich@yandex.ru

<sup>1</sup>Ассистент кафедры Физики ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет» <sup>2</sup>Инженер лаборатории ФХИКМ «Федеральный исследовательский Центр проблем химической физики и медицинской химии РАН»

В работе представлены результаты решения уравнений пластичности Марченко-Мисбаха. Получена формула внутреннего трения в терминах механики сплошных сред. Найдена частота осцилляций, при которой наблюдается минимум диссипации энергии. Согласно закона Аррениуса получена формула высокотемпературного фона внутреннего трения. Выполнен численный эксперимент по исследованию эффекта гистерезиса при периодически меняющихся напряжениях и деформациях. Построена кривая нагружения материала при постоянной скорости деформации кручением. Установлено, что известные модели Максвелла и Фойгта могут быть объединены в одну модель Марченко-Мисбаха, которая является естественным продолжением теории упругих и вязких твердых тел.

Ключевые слова: первая вязкость, микропластичность, внутреннее трение, эффект гистерезиса, модель Максвелла, высокотемпературный фон.

В 2011 году В.И. Марченко и Ш. Мисбах ввели для описания пластической деформации изотропных аморфных материалов диссипативную функцию [1]

$$N = \eta^{s} \left( \dot{u}_{ik} - \frac{\delta_{ik}}{3} \dot{u}_{ll} \right)^{2} + \frac{\zeta}{2} \dot{u}_{ll}^{2} + 2\alpha \dot{u}_{ik} \dot{w}_{ik}^{pl} + \eta (\dot{w}_{ik}^{pl})^{2}, \tag{1}$$

где  $\eta^s$  — «первая» вязкость,  $\zeta$  — «вторая» вязкость,  $\alpha$  и  $\eta$  — реологические коэффициенты,  $w_{ik}^{pl}$  — тензор пластической деформации. На этой основе в работе [1] составлен набор уравнений пластичности, исходя из вариационных принципов лагранжева формализма.

Стартуя с уравнений Марченко-Мисбаха, мы исследуем колебательный процесс в области микропластичности и для деформаций, удовлетворяющих условию сдвига  $u_{ll} = 0$ , определяем фон внутреннего трения при циклическом нагружении материала

$$Q_{\phi o \mu}^{-1} \approx \left[ \frac{\eta \mu}{\omega} + \frac{\omega}{\mu} \left( \eta \eta^s - \alpha^2 \right) \cdot \left( \eta + \eta^s - 2 \alpha \right) \right] / (\eta - \alpha)^2, \tag{2}$$

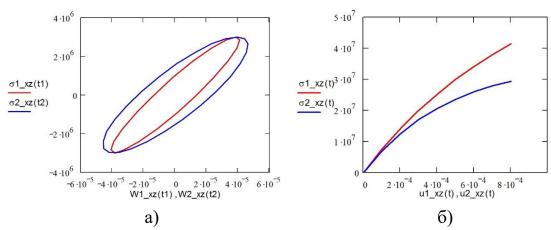
где ω – круговая частота. Поскольку внутреннее трение характеризуется дисперсией – это следует из формулы (2), далее определяется минимум диссипации энергии. В этом случае соответствующая частота дается формулой

$$\omega_{\kappa p} = \frac{\eta \mu}{\eta \eta^s - \alpha^2} \left\{ 1 + \frac{(\eta - \alpha)^2}{\eta \eta^s - \alpha^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}, \tag{3}$$

где  $\eta\eta^s-\alpha^2>0$ . В случае  $\alpha\to 0$  и согласно закона Аррениуса нами выводится

формула высокотемпературного фона внутреннего трения, которая, по сути, получается из общих принципов механики сплошной среды.

Затем, опираясь на работу Ю.В. Фурсовой [2], мы исследуем два вопроса. Первый вопрос связан с построением овалов гистерезиса (см. рисунок) на основе полученного решения уравнений Марченко-Мисбаха. Второй вопрос относится к построению кривой нагружения материала в случае, когда скорость деформации является постоянной величиной. Графики строятся в параметрическом виде, где в качестве параметра выбрано t — время процесса.



Зависимости напряжения (Па) от величины деформации в случае периодического внешнего воздействия (а) – эффект гистерезиса и равномерно возрастающего с постоянной скоростью (б) – кривая нагружения материала

Интерпретация рис. в части (б) позволяет сделать заключение, что в отличие от материала Максвелла, который на ранней стадии деформации ведёт себя абсолютно упруго согласно закона Р. Гука [3], реальный материал, описываемый расширенной моделью Марченко-Мисбаха проявляет неупругие свойства уже в деформации, фактически, самом начале ТО есть. демонстрирует Как микропластичность. формулируется гипотеза следствие микропластической деформации.

Кроме того, установлено, что модель Марченко-Мисбаха содержит в себе модели Максвелла и Фойгта в качестве особых частных случаев описания тела и, таким образом, объединяет общепринятые модели в единую теорию.

Выражаю признательность своему научному руководителю д.ф.-м.н., проф. Ю.Р. Колобову за постоянное внимание к работе и полезное обсуждение результатов данного исследования.

### Литература

- 1. Marchenko V.I. Model of plasticity of amorphous materials / V.I. Marchenko, Ch. Misbah // Phys. Rev. E. -2011.- Vol. 84.- P. 021502 (1-7).
- 2. Фурсова Ю.В. Измерения инфранизкочастотного внутреннего трения в металлическом стекле / Ю.В. Фурсова, В.А. Хоник // Изв. АН. Серия Физическая. 1998. Т. 62. N07. С. 1288-1295.
- 3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебник в 10 томах. Т. VII. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2003. 264 с.

# SESSION 2 MECHANICAL AND STRUCTURAL RELAXATION

#### ОСОБЕННОСТИ НЕУПРУГОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОКЕРАМИКИ С ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ

И.К. Носолев<sup>1</sup>, А.В. Резников<sup>2</sup>, Н.В. Токий<sup>3</sup>, В.В. Токий

<sup>1</sup>Научный сотрудник, igor.nosolev@yandex.ru

<sup>2</sup>Ведущий инженер-исследователь, reznikov\_al@bk.ru

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник, nvt1976@mail.ru

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина»

Проведены измерения амплитудных зависимостей внутреннего трения (ВТ) и дефекта модуля упругости (ДМУ) в гибридной нанокерамике на основе диоксида циркония. Установлено, что во всей области измеряемых деформаций наблюдается значительное изменение ДМУ при неизменном ВТ. Для объяснения полученных результатов предложена теоретическая модель в рамках линейного приближения теории упругости.

**Ключевые слова:** внутреннее трение, нанокерамика, ионная проводимость, теоретическая модель, диоксид циркония.

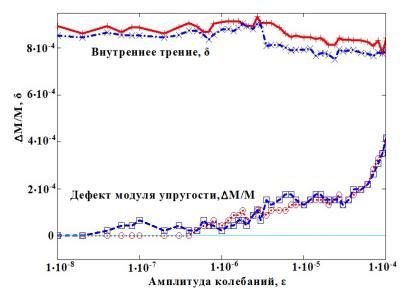
Актуальность исследования обусловлена необходимостью решения современной энергетической проблемы - высокоэффективного прямого преобразования химической энергии в электрическую, которое осуществляется в керамических топливных элементах. Для изготовления электролита в топливных элементах используется диоксид циркония, стабилизированный оксидом иттрия с разными рабочими температурами.

При исследовании электрических характеристик компактов нанопорошков на основе  $ZrO_2$  было обнаружено, что порошки, полученные по двум различным технологиям, отличаются электропроводностью на несколько порядков [1], при этом физический механизм обнаруженного явления не был установлен.

Нами исследовалась керамика, спеченная при температуре  $1500^{0}$ С из нанопорошков  $ZrO_{2} + 3mol\% Y_{2}O_{3}$ , полученных методом соосаждения [2] с применением хлор- и азотсодержащего сырья [1], прокаленных при температуре  $1000^{0}$ С и обжатых при P=500 MPa.

Измерения осуществлялись резонансным методом двойного составного вибратора [3]. Резонатор состоял из двух частей: пьезокварца, служащего для возбуждения и приема механических колебаний, и исследуемого образца. Пьезокварц представлял собой монокристаллический брусок размером  $3x3x34 \text{ мм}^3$ , вырезанный таким образом (XYS/18,5°-срез), что в нем под действием переменного электрического напряжения возбуждались продольные механические колебания на частоте 91 кГц. Измерения проводились при комнатной температуре. Погрешность измерения модуля упругости не более 1%.

Результаты измерений представлены на рисунке.



Амплитудные зависимости внутреннего трения и дефекта модуля упругости в высокопроводящих (синие линии) и низкопроводящих (красные линии) компонентах диоксидциркониевой керамики

В рамках упругого подхода предложена модель, позволяющая объяснить изменения механических свойств керамики [4].

Экспериментально установлено, что модуль Юнга в керамиках, полученных из компактов с низкой ионной проводимостью, больше, чем в образцах из компактов с высокой ионной проводимостью. Это указывает на адекватность предложенной теоретической модели.

- 1. Doroshkevych O.S. Impedance Spectroscopy of Concentrated Zirconia Nanopowder Dispersed Systems Experimental Technique / O.S. Doroshkevych, A.V. Shylo, O.V. Saprukina, I.A. Danilenko, T.E. Konstantinova, L.A. Ahkozov // World Journal of Condensed Matter Physics. -2012. V. 2. № 1. P. 1-9.
- 2. Константинова Т. Е. Получение нанодисперсных порошков диоксида циркония. От новации к инновации / Т.Е. Константинова, И.А. Даниленко, В.В. Токий, В.А. Глазунова // Наука и инновации. 2005. Т. 1. № 3. С. 76–87.
- 3. Никаноров С.П. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов / С.П. Никаноров, Б.К. Кардашёв. М.: Наука, 1985г. -253 с.
- 4. Токий Н.В. Упругая модель влияния примеси замещения на подвижность кислорода в диоксидциркониевой керамике / Н.В. Токий, В.В. Токий, Н.А. Гребенюк // Вестник Луганского государственного университета имени Владимира Даля. -2018. №5(11). С. 115-118.

#### ПРИРОДА СТЕКЛОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ ПОСЛЕ ГЛУБОКОЙ РЕЛАКСАЦИИ

А.С. Макаров<sup>1</sup>, Г.В. Афонин<sup>2</sup>, Р.А. Кончаков<sup>3</sup>, Н.П. Кобелев<sup>3</sup>, <u>В.А. Хоник<sup>4</sup></u>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>a.s.makarov.vrn@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, <u>afoningv@gmail.com</u>

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник, <u>konchakov@mail.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник ФГБУН ИФТТ РАН, <u>kobelev@issp.ac.ru</u>

<sup>4</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Представлены температурные зависимости избыточной теплоемкости, полученные экспериментально и рассчитанные на основе измерений модуля сдвига. Обнаружено их удовлетворительное согласие. Установлено, что для сильно релаксированных образцов проявляются особенности, характерные для фазового перехода I рода.

Ключевые слова. Стекло Vit106, избыточная теплоемкости, энтропия, фазовый переход I рода.

Выяснение природы стеклования является одной из важнейших проблем физики некристаллических материалов. Существует два подхода к этой проблеме. Первый подход рассматривает стеклование как чисто кинетический процесс, второй подход интерпретирует стеклование как фазовый переход II рода с некоторыми особенностями, обусловленными неравновесностью стекла. Подробный анализ стеклования может быть выполнен путем детальных измерений теплоемкости вблизи температуры стеклования  $T_g$  в зависимости от предварительной термообработки. В настоящей работе, с одной стороны, были выполнены такие измерения теплоемкости, с другой стороны, теплоемкость была рассчитана на основе прецизионных измерений модуля сдвига. Результат оказался довольно неожиданным: стеклование сильно релаксированных образцов проявляет особенности, характерные для фазового перехода I рода.

Расчет теплоемкости был выполнен на основе Межузельной теории (МТ). Избыточная теплоемкость стекла относительно материнского кристалла дается формулой

$$\Delta C_G = \frac{N_A V_0}{B} \left[ G \frac{d l n_G^{\mu}}{dT} \left( 1 - T \frac{d l n G}{dT} \right) - T l n \left( \frac{\mu}{G} \frac{G_m}{\mu_m} \right) \frac{d^2 G}{dT^2} \right]. \tag{1}$$

Как видно, избыточная теплоемкость определяется модулем сдвига кристалла  $\mu(T)$ , модулем сдвига G(T), а также его 1-й и 2-й производными. Значения остальных величин в (1) приведены в (Makarov *et al. J.Non-Cryst.Sol.* 666 (2025) 123667). На рис.1 приведены калориметрические данные по избыточной теплоемкости  $\Delta C$  в сравнении с расчетом этой величины по  $\phi$ .(1). Как видно, вблизи  $T_g$  возникает пик  $\Delta C$ , высота которого растет со временем предварительного отжига. При этом расчет хорошо воспроизводит эксперимент. Соответственно, МТ вполне подходит для анализа. Согласно МТ, плавление кристалла связано с быстрой генерацией межузельных атомов в

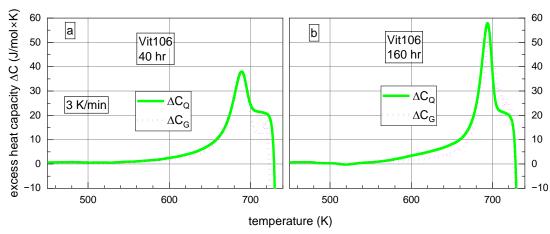


Рис.1. Температурные зависимости избыточной теплоемкости стекла Vit106, определенные калориметрией и рассчитанные по (1), после отжига в течение 40 час (а) и 160 час (b) при 653 К.

гантельной конфигурации. Тогда, наоборот, переход сильно релаксированного стекла в состояние переохлажденной жидкости должен вызывать большую генерацию дефектов типа межузельных гантелей, что соответствует фазовому переходу I рода. С целью проверки этого утверждения мы рассчитали избыточные энтропии стекла Vit106 в зависимости от времени предварительного отжига (а) и плавления кристалла (b). Эти результаты показаны на рис.2.

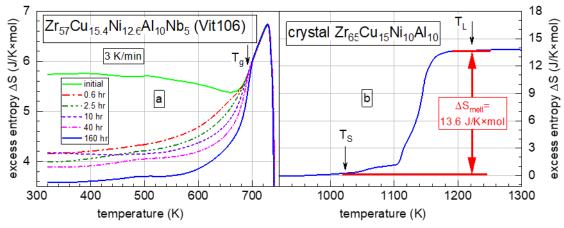


Рис.2. Температурные зависимости избыточной энтропии стекла Vit106 в зависимости от времени предварительного отжига (а) и избыточной энтропии при плавлении близкого по составу кристалла. Показаны температуры солидус  $T_S$  и ликвидус  $T_L$ .

Как видно, скорость роста избыточной энтропии вблизи  $T_g$  быстро растет с увеличением времени предварительного отжига. Тенденция такова, что рост энтропии с увеличением этого времени становится все ближе с скачкообразному по мере приближения к  $T_g$ . Такое поведение похоже на фазовый переход I рода. С другой стороны, вполне аналогичное поведение энтропии имеет место при плавлении кристалла, что подтверждает гипотезу о стекловании сильно релаксированного стекла как о фазовом переходе I рода.

Работа поддержана РНФ в рамках проекта № 23-12-00162.

#### НЕИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАНДАРТНЫХ И ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ И ЕЁ СВЯЗЬ С ЭНТРОПИЕЙ СМЕШЕНИЯ И ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИЕЙ

Г.В. Афонин<sup>1</sup>, С.Л. Щербаков<sup>2</sup>, Р.А. Кончаков<sup>3</sup>, Н.П. Кобелев<sup>4</sup>, В.А. Хоник<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>afoningv@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Магистрант, Сергей Щербаков, <u>geralt-iz-riv@mail.ru</u>

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник, <u>konchakov@mail.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>4</sup>Старший научный сотрудник ФГБУН ИФТТ РАН, <u>kobelev@issp.ac.ru</u>

<sup>5</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Проведены калориметрические исследования и измерения релаксации крутящего момента стандартных и высокоэнтропийных металлических стекол. Обнаружено, что в окрестностях температуры стеклования глубина релаксации напряжений  $\Delta_M$  снижается с ростом энтропии смешения  $\Delta S_{mix}/R$  и растет с увеличением параметра  $\Delta_S$ , характеризующим рост энтропии и структурного разупорядочения в состоянии переохлажденной жидкости.

Ключевые слова. Высокоэнтропийные металлические стекла, релаксации крутящего момента, избыточная энтропия.

Проведены калориметрические исследования и измерения релаксации крутящего момента шести стандартных и высокоэнтропийных металлических стекол (МС) с энтропиями смешения  $0.86R \le \Delta S_{mix} \le 1.79R$  (R-универсальная газовая постоянная). Кривые релаксации нормированного крутящего момента  $M/M_0$  в зависимости от нормированной температуры  $T/T_g$  ( $T_g$ - температура стеклования) для МС с различными  $\Delta S_{mix}$  показаны на рис.1. Видно, что интенсивная релаксация напряжений в высокоэнтропийных МС ( $\Delta S_{mix} > 1.5R$ ) имеет место при существенно более высоких  $T/T_g$ .

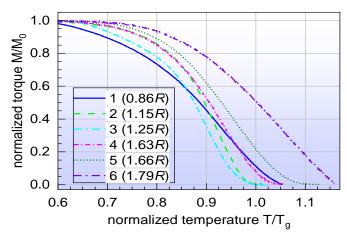


Рис.1. Температурные зависимости нормированного крутящего момента  $M/M_0$  от нормированной температуры  $T/T_g$  исследуемых МС с различной энтропией смешения  $\Delta S_{mix}$  (в единицах газовой постоянной R).

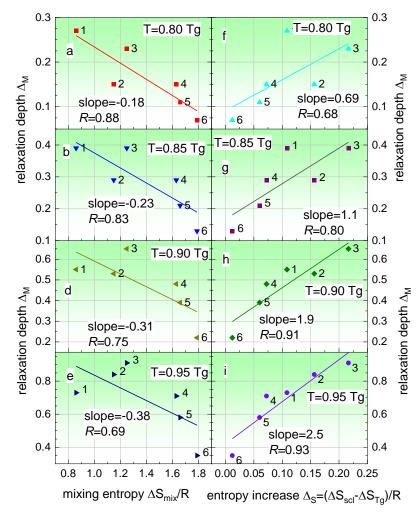


Рис.2. Зависимости глубины релаксации  $\Delta_M$  от энтропии смешения  $\Delta S_{mix}$  и роста энтропии в состоянии переохлажденной жидкости, характеризуемого параметром  $\Delta_S$  .

На основе калориметрических данных были рассчитаны температурные зависимости избыточной энтропии  $\Delta S$  стекол по отношению к материнским кристаллам и введен безразмерный энтропийный параметр  $\Delta_S = (\Delta S_{scl} - \Delta S_{Tg})/$ R, где  $\Delta S_{scl}$  и  $\Delta S_{Ta}$ - значения избыточной энтропии в конце и начале интервала переохлажденной жидкости, соответственно. На рис.2 показаны зависимости глубины релаксации напряжений  $\Delta_M = 1 - M/M_0$  ( $M_0$ - исходный крутящий Мкрутящий момент при температуре T) при указанных температурах в диапазоне  $0.80T_g \le T \le 0.95T_g$ . Как видно, температурах в указанном интервале глубина релаксации напряжений  $\Delta_{M}$  a) снижается с ростом энтропии смешения  $\Delta S_{mix}/R$  и б) растет с увеличением характеризующего энтропии параметра  $\Delta_{S}$ , рост структурного разупорядочения в состоянии переохлажденной жидкости. Обсуждаются возможные причины этих зависимостей.

Работа поддержана РНФ в рамках проекта № 23-12-00162.

# ВЗАИМОСВЯЗЬ ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТРОПИИ И ИЗБЫТОЧНОЙ ЭНТАЛЬПИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ ЖИДКОСТИ СО СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ МАТЕРИНСКИХ РАСПЛАВОВ

Р.А. Кончаков<sup>1</sup>, Г.В. Афонин<sup>2</sup>, А.С. Макаров<sup>3</sup>, В.А. Хоник<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, konchakov@mail.ru

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, afoningv@gmail.com

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник, a.s.makarov.vrn@gmail.com

<sup>4</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, v.a.khonik@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Стеклообразующая способность (СОС) металлических стекол (МС) традиционно оценивается через критическую скорость охлаждения  $R_c$  или максимальный диаметр полностью аморфного образца (критический диаметр)  $D_{max}$ . Существующие косвенные методы оценки СОС (на основе характеристических температур) не учитывают различие термодинамических свойств стеклообразного и кристаллического состояний. В работе проверена гипотеза о связи СОС с избыточной энтропией  $\Delta S$  и энтальпией  $\Delta H$  МС относительно кристалла.

Ключевые слова: металлические стекла, стеклообразующая способность, избыточная энтропия, избыточная энтальпия, критическая скорость охлаждения, критический диаметр, дефекты

Исследованы 26 МС (ленты и объемные образцы) методами ДСК при нагреве со скоростью  $\dot{T}=3$  К/мин. Избыточная энтальпия  $\Delta H(T)$  и энтропия  $\Delta S(T)$  рассчитывались относительно кристалла по формулам [1]:

$$\Delta H(T) = \frac{1}{\dot{T}} \int_{T}^{T_{cr}} \Delta W(T) dT$$
,  $\Delta S(T) = \frac{1}{\dot{T}} \int_{T}^{T_{cr}} \frac{\Delta W(T)}{T} dT$ , где  $\Delta W(T)$  - разность тепловых потоков в стекле и кристалле,  $T_{cr}$  — температура полной кристаллизации. Были введены безразмерные параметры  $\sigma_{scl} = 1 - \Delta S_{T_g} / \Delta S_{scl}$  и  $\eta_{scl} = 1 - \Delta H_{T_g} / \Delta H_{scl}$ , характеризующие степень структурного разупорядочения в области переохлажденной жидкости (scl). Детали экспериментов описаны в работе [2].

В области переохлажденной жидкости ( $T_g < T < T_x$ ,  $T_g$  — температура стеклования,  $T_x$  — температура начала кристаллизации) наблюдается рост  $\Delta S$  и  $\Delta H$ , отражающий структурное разупорядочение. Этому росту способствует увеличение концентрации дефектов, согласно Межузельной теории [3]. Параметры  $\sigma_{\rm scl}$  и  $\eta_{scl}$  отражают изменение концентрации дефектов, что может объяснять их связь с устойчивостью расплава и СОС. Предварительный отжиг не влияет на  $\Delta S(T)$  и  $\Delta H(T)$  при  $T > T_g$ , что соответствует "стиранию" термоистории в области переохлажденной жидкости.

Установлено, что  $log(R_c)$  монотонно уменьшается с ростом  $\sigma_{scl}$ , что соответствует росту СОС при усилении разупорядочения (коэффициент корреляции Пирсона 0.89 для лент и 0.86 для объемных образцов). Установлено,

что  $log(D_{max})$  растет с увеличением  $\sigma_{scl}$  (см. рис. 1, коэффициент корреляции 0.94). Наивысшая СОС у сплава  $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$  ( $\sigma_{scl}\approx 0.35,\,R_c=0.1\,$  K/c,  $D_{max}=72\,$  мм). Параметр  $\eta_{scl}$  демонстрирует линейную связь с  $\sigma_{scl}$  ( $d\eta_{scl}/d\sigma_{scl}=0.92,\,$  см. рис. 2) и, соответственно, корреляцию с  $R_c$  и  $D_{max}$ .

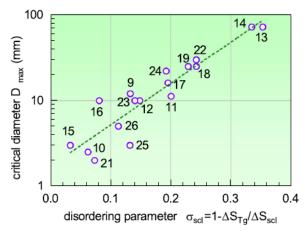


Рис. 1. Критический диаметр  $D_{max}$  (в логарифмических координатах) как функция параметра разупорядочения  $\sigma_{scl}$  для объемных стекол. Пунктирной линией показана линейная аппроксимация методом наименьших квадратов (коэффициент корреляции Пирсона 0.94).

Рис. 2. Связь между параметрами структурной разупорядоченности на основе энтальпии  $\eta_{scl}$  и энтропии  $\sigma_{scl}$  в области переохлажденной жидкости. Пунктирной линией показана линейная аппроксимация методом наименьших квадратов, наклон  $d\eta_{scl}/d\sigma_{scl} = 0.92 \pm 0.01$ .

#### Основные выводы:

- Параметры  $\sigma_{scl}$  и  $\eta_{scl}$  коррелируют с критической скоростью охлаждения и критическим диаметром, что позволяет оценивать СОС на основе стандартных ДСК-измерений без достижения температур ликвидуса.
- Установлена фундаментальная связь СОС со структурным разупорядочением и дефектной структурой в состоянии переохлажденной жидкости. Утверждается, что СОС переохлажденного расплава связана с концентрацией дефектов в scl-состоянии стекла.
- Полученные результаты открывают новые возможности для экспрессоценки СОС и направленного дизайна металлических стекол.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-12-00162.

- 1. Макаров А.С. Избыточная энтропия металлических стекол и ее связь со стеклообразующей способностью материнских расплавов / А.С. Макаров, Р.А. Кончаков, Г.В. Афонин, Ц.Ч. Цзиао, Н.П. Кобелев, В.А. Хоник // Письма в ЖЭТФ. -2024. Т. 120. В. 10. С. 794-801.
- 2. Cui J.B. Relationship of structural disorder and stability of supercooled liquid state with glassforming ability of metallic glasses / J.B. Cui, R.A. Konchakov, G.V. Afonin, A.S. Makarov, G.J. Lyu, J.C. Qiao, N.P. Kobelev, V.A. Khonik // Intermetallics. 2025. V. 185. P. 108858.
- 3. Кобелев Н.П. Новые представления о природе образования металлических стекол, их структурной релаксации и кристаллизации / Н.П. Кобелев, В.А. Хоник // Успехи физических наук. -2023. Т. 193. № 7. С. 717-736.

#### ТЕРМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ ТЕЛЛУРИТНЫХ СТЁКОЛ ПРИ МЕДЛЕННОМ ОХЛАЖДЕНИИ ИЗ СОСТОЯНИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЁННОЙ ЖИДКОСТИ

Г.В. Афонин<sup>1</sup>, В.А. Хоник<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>afoningv@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

В работе показано, что контролируемое охлаждение теллуритных стекол  $(\text{TeO}_2)_{0.7}(\text{CuO})_{0.3}$  и  $(\text{TeO}_2)_{0.45}(\text{V}_2\text{O}_5)_{0.55}$  из переохлажденного жидкого состояния (выше температуры стеклования  $T_g$ ) со скоростью  $0.03{\text -}10$  К/мин позволяет осуществить термическое восстановление избыточной энтальпии, утраченной при предшествующей структурной релаксации ниже  $T_g$ . Теллуритные стекла демонстрируют максимальную среди изученных классов склонность к восстановлению, количественно характеризуемую коэффициентом чувствительности, что открывает возможность использования данного метода для восстановления функциональных свойств стекол, деградировавших при эксплуатации или хранении.

Ключевые слова: теллуритные стекла, восстановление свойств, дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), энтальпия, структурная релаксация.

Структурная релаксация стекол ниже температуры стеклования  $T_{\rm g}$  приводит к уменьшению избыточной энтальпии и изменению свойств. В литературе для металлических и некоторых полимерных стекол широко изучена возможность обратного процесса — восстановления свойств. Для теллуритных стекол, обладающих уникальными оптическими свойствами, аналогичные исследования отсутствуют. В настоящей работе показана возможность термического восстановления теллуритных стекол путем контролируемого медленного охлаждения из состояния переохлажденной жидкости (выше  $T_{\rm g}$ ).

Для исследований были выбраны теллуритные стекла ( $TeO_2$ )<sub>0.7</sub>(CuO)<sub>0.3</sub> и ( $TeO_2$ )<sub>0.45</sub>( $V_2O_5$ )<sub>0.55</sub>. Стекла синтезировались из оксидов с чистотой 99.9%. Аморфность полученных отливок контролировалась дифракцией рентгеновских лучей. Калориметрические исследования проводили на приборе Hitachi DSC 7020 в потоке азота особой чистоты. Нагрев образцов массой 40-50 мг осуществляли со скоростью 3 К/мин. После нагрева в область переохлажденной жидкости образец контролируемо охлаждали со скоростью в диапазоне 0.03 К/мин  $\leq \dot{T} \leq 10$  К/мин. При скоростях 0.03 К/мин  $\leq \dot{T} \leq 0.3$  К/мин скорость охлаждения поддерживали постоянной до температуры примерно на  $\approx 30$  К ниже  $T_g$ , с дальнейшим свободным охлаждением при меньших температурах. На рисунке показаны результаты калориметрических измерений на образцах теллуритного стекла ( $TeO_2$ )<sub>0.45</sub>( $V_2O_5$ )<sub>0.55</sub>, предварительно охлажденных из области переохлажденной жидкости с указанными скоростями. Наблюдается

сильная зависимость эндотермического эффекта от скорости предшествующего охлаждения: снижение скорости с 10 до 0.03 К/мин увеличивает амплитуду пика поглощения тепла в 2.6 раза. Аналогичные результаты получены для теллуритного стекла ( $TeO_2$ )0.7(CuO)0.3.

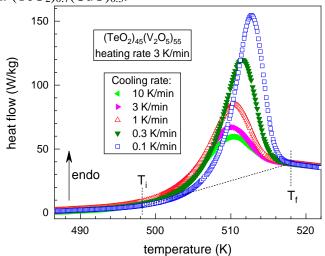


Рисунок. Результаты ДСК-измерений для теллуритного стекла  $(TeO_2)_{0.45}(V_2O_5)_{0.55}$ .

Для количественной оценки степени восстановления была определена энтальпия структурной релаксации  $\Delta H_r = \dot{T}^{-1} \int_{T}^{T_f} W(T) \ dT$ . Расчеты дали значения энтальпии  $\Delta H_{\rm r}$  в диапазоне от 0.33 до 0.86 кДж/моль для стекла  $(TeO_2)_{0.7}(CuO)_{0.3}$  и от 0.9 до 2.06 кДж/моль для  $(TeO_2)_{0.45}(V_2O_5)_{0.55}$  при изменении скорости охлаждения от 10 до 0.1 К/мин. Это составляет 2-5% от энтальпии кристаллизации ( $\Delta H_{cr} \approx -18.5 \text{ кДж/моль}$ ). Следует также отметить, что эффект обратим: изменение скорости циклическое воспроизводимо меняет параметры ДСК-пиков. Коэффициент чувствительности  $S_r = -\Delta (\Delta H_r) / \Delta \dot{T}_{cr}$ скорости охлаждения составил 0.054 - 0.12К кДж·мин/(моль·К) — выше, чем для оксидного стекла K15 (0.035) и металлического  $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$  (0.008) [1]. Таким образом установлено, что теллуритные стекла проявляют наибольшую склонность к восстановлению среди изученных классов. Ключевое отличие от металлических стекол заключается в значительно большей величине  $\Delta H_{r}$  относительно энтальпии кристаллизации при сохранении сходства ДСК-кривых.

Полученные результаты открывают возможность управления свойствами теллуритных стекол (оптических, диэлектрических) путем регулирования скорости охлаждения из переохлажденного состояния. Процесс позволяет компенсировать деградацию свойств, вызванную технологическим старением или длительным хранением, и перспективен для создания материалов с заданными параметрами для волоконной оптики, лазеров и сенсоров.

Литература

1. Afonin G.V. Rejuvenation of a Metallic and Oxide Glass by Cooling from the Supercooled Liquid State at Laboratory Rates / G.V. Afonin, N.P. Kobelev, V.A. Khonik, S.V. Nemilov // Physica Status Solidi Rapid Research Letter. 2018. – T. 12. – Вып. 8. – С. 1800167.

УДК: 539.213.2:548.51

### ВЛИЯНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ СКОРОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ НА ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ Fe40Ni40P14B6 и Fe48C032P14B6

С.В. Васильев<sup>1</sup>, Е.А. Свиридова<sup>2</sup>, В.И Ткач<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., vasils75@gmail.com

<sup>2</sup>Канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., ksvir@list.ru

<sup>3</sup>Д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр., stalker\_1345@mail.ru

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк
ФГБОУ ВО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры», Макеевка

Проведен сравнительный анализ факторов, определяющих повышенную термическую устойчивость металлического стекла  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$  по сравнению с устойчивостью  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ . Определены вклады в термическую устойчивость, различий диффузионной подвижности, работы образования критического зародыша и степени нестационарности зарождения.

Ключевые слова: металлические стёкла, термическая устойчивость, теоретические модели, скорости зарождения и роста кристаллов, нестационарность

Фундаментальные исследования процессов кристаллизации металлических стекол (МС) имеют важное прикладное значение, поскольку создают основу для разработки аморфных сплавов, сохраняющих уникальные комплексы физических свойств в расширенном температурном диапазоне.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований и анализа кинетики и механизмов нестационарной кристаллизации МС  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$  и  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$ . Цель работы — установить причины различий приведенных (нормированных на температуры плавления) температур (Tr) начала кристаллизации при нагреве (в 1.1 раза) и времен начала кристаллизации ( $t_{ons}$ ) при одних и тех же температурах (в 5.6–9.35 раза).

Анализ изотермических кинетических кривых в рамках модели Аврами показал, что в диапазонах Tr 0.523–0.561 (МС  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ ) и 0.540–0.564 (МС  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$ ) показатели Аврами (n), характеризующие степень нестационарности скорости зарождения кристаллов, снижаются с повышением температур отжига от 6.8 до 4.36 и от 9.1 до 6.57 соответственно.

В рамках комбинированной модели Колмогорова-Кэщиева [1] по экспериментальным изотермическим кинетическим кривым, определены характеристические времена кристаллизации  $\tau_c$  и нестационарности  $\tau_{ns}$  процесса зарождения. В свою очередь по значениям  $\tau_c$  и предварительно определённым температурным зависимостям скоростей роста кристаллов U(T) в МС  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$  [2] и  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$  [3] найдены значения стационарных скоростей зарождения  $J_{st}$  в этих стеклах, составляющие  $3.5\times10^{15}-10^{17}$  и  $3\times10^{17}-9\times10^{17}$  м<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> соответственно в диапазонах температур отжига (рис. 1).

Установлено, что в диапазоне температур исследования  $J_{\rm st}$  в МС  ${\rm Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6}$  выше, чем в МС  ${\rm Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6}$  (рис. 1), что обусловлено более низкими значениями работ образования критических зародышей. Тем не менее,

 $t_{\rm ons}$  в MC на FeCo основе для стационарного режима в 3.5–1.5 раз выше, чем в MC на FeNi основе, что объясняется повышенной скоростью роста кристаллов в MC  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$  (рис. 1), связанной с более высокой диффузионной подвижностью атомов на границе раздела кристаллической и аморфной фаз.

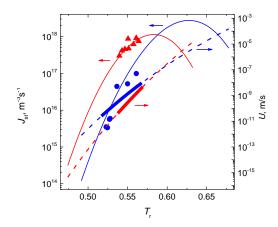


Рис. 1. Зависимости скоростей зарождения (стационарных) и роста кристаллов в МС  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$  ( $\bullet$ ) и  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$  ( $\blacktriangle$ ) в зависимости от приведенных температур. Жирными линиями выделены значения U(T), определенные по экспериментальным данным [2, 3], а символами показаны значения  $J_{\rm st}$ , рассчитанные по характеристическим временам кристаллизации.

Рис. 2. Зависимость отношения времен начала кристаллизации: экспериментально определенных  $t_{\text{ons}}^{\text{exp}}$  и рассчитанных для стационарного режима зарождения  $t_{\text{ons}}^{\text{st}}$  от показателя Аврами МС  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_{6}$  ( $\bullet$ ) и  $\text{Fe}_{48}\text{Co}_{32}\text{P}_{14}\text{B}_{6}$  ( $\bullet$ ).

Существенное различие отношений экспериментально определенных времен начала кристаллизации (от 9.35 до 5.6) и времен, рассчитанных для свидетельствует определяющем стационарного режима, об вкладе повышенную термическую устойчивость МС Fe<sub>48</sub>Co<sub>32</sub>P<sub>14</sub>B<sub>6</sub> нестационарного характера процесса зарождения, подтверждается что впервые продемонстрированной связью между отношением времен начала кристаллизации и показателями Аврами (рис. 2).

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, бюджетная тема FREZ-2023-0003.

- 1. Vasiliev, S.V. Analysis of the transient behavior of nucleation in the  $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$  glass / S.V. Vasiliev, V.I. Tkatch, A.S. Aronin, O.V. Kovalenko, S.G. Rassolov // J. Alloys Compds. -2018. Vol. 744. P. 141–145.
- 2. Vasiliev S.V., Kovalenko O.V., Svyrydova K.A., Limanovskii A.I., Tkatch V.I. Crystallization kinetics of the Fe $_{40}$ Ni $_{40}$ P $_{14}$ B $_{6}$  metallic glass in an extended range of heating rates // J. Mater. Sci. -2019. Vol. 54, No. 7. pp. 5788-5801.
- 3. Vasiliev S.V., Parfenii V.I., Aronin A.S., Pershina E.A., Tkatch V.I. The effect of transient nucleation behavior on thermal stability of  $Fe_{48}Co_{32}P_{14}B_6$  metallic glass // J. Alloys Compds. 2021. Vol. 869. art. 159285.

### СВЯЗЬ ТЕРМОАКТИВИРУЕМЫХ ИЗМЕНЕНИЙ МОДУЛЯ СДВИГА С РЕЛАКСАЦИЕЙ ДЕФЕКТНОЙ ПОДСИСТЕМЫ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКЛАХ

А.С. Макаров<sup>1</sup>, Е.В. Гончарова<sup>2</sup>, Р.А. Кончаков<sup>3</sup>, В.А. Хоник<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>a.s.makarov.vrn@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Научный сотрудник, <u>goncharova.evg@mail.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>4</sup>Старший научный сотрудник, <u>konchakov.roman@gmail.com</u>

<sup>5</sup>Главный научный сотрудник, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Проведено комплексное исследование ряда высокоэнтропийных металлических стёкол (ВЭМС), включающее прецизионные измерения температурной зависимости высокочастотного (~500 кГц) модуля сдвига и калориметрию в исходном, релаксированном и кристаллическом состояниях. Установлено, что в отсутствие структурной релаксации температурный коэффициент модуля сдвига ВЭМС совпадает с таковым для материнского кристалла. Предложена интерпретация результатов, согласно которой модуль сдвига ВЭМС неразрывно связан с концентрацией дефектов, ответственных за структурную релаксацию.

Ключевые слова: высокоэнтропийные металлические стёкла, структурная релаксация, модуль сдвига.

Взаимосвязь системы дефектов, модуля сдвига стекла G и модуля сдвига материнского кристалла  $\mu$  может быть интерпретирована в рамках межузельной теории (МТ) [1]. Эта теория обеспечивает количественное описание различных релаксационных явлений в металлических стёклах (обзор МТ и её интерпретации экспериментальных данных представлен в работе [2]). Согласно МТ, дефектная подсистема, модуль сдвига стекла G и материнского кристалла  $\mu$  взаимосвязаны согласно уравнению

$$G = \mu \exp(-\alpha \beta c), \tag{1}$$

где c — концентрация дефектов, аналогичных межузельным гантелям в кристаллах, ответственных за снижение модуля сдвига стекла (диаэластический эффект),  $\beta$  — безразмерная сдвиговая восприимчивость и безразмерная константа  $\alpha \approx 1$  [1].

Измерения модуля сдвига G(T) при нагреве BЭМС в исходном, релаксированном и кристаллизированном состояниях позволили установить взаимосвязь между G и концентрацией дефектов c. Показано, что релаксационное увеличение G в исходном состоянии BЭМС может быть объяснено экзотермическим снижением концентрации дефектов типа межузельных гантелей c. Напротив, уменьшение G обусловлено эндотермическим ростом концентрации c. Последний процесс особенно выражен в состоянии переохлаждённой жидкости (интервал между температурой стеклования  $T_g$  и температурой начала кристаллизации  $T_x$ ).

Обнаружено, отсутствие термоактивированной структурной ЧТО релаксации (в диапазоне от комнатной температуры до температур начала структурной релаксации для исходного  $T_{sr}^{ini}$  и релаксированного  $T_{sr}^{rel}$  состояний) температурные коэффициенты модулей сдвига стеклообразного равны. В кристаллического состояний качестве примера на представлены зависимости модуля сдвига (а), теплового потока (b) и концентрации дефектов (c) для ВЭМС  $Zr_{31.6}Cu_{37.8}Hf_{13.4}Al_{8.7}Ag_{8.4}$  в исходном, релаксированном и кристаллизированном состояниях. Концентрация дефектов c(T) рассчитана с использованием уравнения (1) при  $\beta = 20$ .

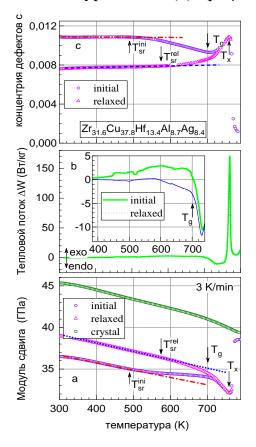


Рисунок. Температурные зависимости модуля сдвига (а), теплового потока  $\Delta W$  (b) и концентрации дефектов (c) ВЭМС  $Zr_{31.6}Cu_{37.8}Hf_{13.4}Al_{8.7}Ag_{8.4}$  в исходном и релаксированном состояниях. Указаны температуры начала структурной релаксации в исходном состоянии  $T_{sr}^{ini}$  и релаксированном состоянии  $T_{sr}^{rel}$  вместе с калориметрической температурой стеклования  $T_g$  и температурой начала кристаллизации  $T_x$ . Сплошные линии дают соответствующие линейные аппроксимации данных.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 23-12-00162.

- 1. Granato A.V. Interstitialcy model for condensed matter states of face-centered-cubic metals / A.V. Granato // Physical Review Letters. 1992. V. 68, № 7. P. 974–977.
- 2. Kobelev N.P. A novel view of the nature of formation of metallic glasses, their structural relaxation, and crystallization / N.P. Kobelev, V.A Khonik // Physics–Uspekhi. 2023. V. 66. P. 673-690.

### СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКОЛ И ПЕРЕОХЛАЖДЁННЫХ РАСПЛАВОВ

А.С. Макаров<sup>1</sup>, Р.А. Кончаков<sup>2</sup>, Н.П. Кобелев<sup>3</sup>, В.А. Хоник<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>a.s.makarov.vrn@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, <u>konchakov.roman@gmail.com</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник ФГБУН ИФТТ РАН, <u>kobelev@issp.ac.ru</u>

<sup>4</sup>Главный научный сотрудник, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

сравнительный температурной зависимости анализ термодинамических функций состояния — энтальпии H, энтропии S и энергии  $\Gamma$ иббса G — для двух систем: 1) переохлажденных расплавов (на основе литературных данных) и 2) твердого стеклообразного состояния (рассчитанной по калориметрическим измерениям с использованием недавно нами предложенного подхода). Установлено, что температурные зависимости H(T), S(T) и G(T), полученные обоими методами, совпадают в диапазоне состояния переохлажденной жидкости металлического стекла (МС) ( $T_q < T < T_x$ , где  $T_q$  и  $T_x$ - температуры стеклования и начала кристаллизации соответственно). Для достижения совпадения потребовалась корректировка литературной методики, связанная с расчетом энтропии плавления.

Ключевые слова: металлические стёкла, переохлаждённые металлические расплавы, термодинамических функций состояния, энтальпия плавления, энтропия плавления.

В литературе широко применяется термодинамический метод определения разности функций состояния между расплавом (L) и его твердой кристаллической фазой (X) [1–2]. Метод основан на интегрировании разности удельных теплоёмкостей жидкой  $C_p^L(T)$  и кристаллической  $C_p^X(T)$  фаз  $\Delta C_p^{L-X}(T) = C_p^L(T) - C_p^X(T)$  в интервале температур от температуры стеклования  $T_g$  до температуры солидус или ликвидус ( $T_S$ ):

$$\Delta H_{L-X}(T) = \Delta H_f - \int_T^{T_S} \Delta C_p^{L-X}(T) dT, \tag{1}$$

$$\Delta S_{L-X}(T) = \Delta S_f - \int_T^{T_S} \frac{\Delta C_p^{L-X}(T)}{T} dT, \qquad (2)$$

$$\Delta G_{L-X}(T) = \Delta H_{L-X}(T) - T\Delta S_{L-X}(T), \tag{3}$$

где  $\Delta H_f$  и  $\Delta S_f$  — энтальпия и энтропия плавления.

В работах [3—4] предложен метод определения избыточных термодинамических функций состояния МС относительно их кристаллических аналогов. Уравнения для избыточных функций состояния МС имеют следующий вид:

$$\Delta H_{G-X}(T) = \frac{1}{\tau} \int_{T}^{T_{CT}} \Delta W_{G-X}(T) dT, \tag{4}$$

$$\Delta S_{G-X}(T) = \frac{1}{T} \int_{T}^{T_{cr}} \frac{\Delta W_{G-X}(T)}{T} dT, \qquad (5)$$

$$\Delta G_{G-X}(T) = \int_{T}^{T_{cr}} \Delta S_{G-X}(T) dT, \qquad (6)$$

где  $\dot{T}$  — скорость нагрева,  $\Delta W_{G-X}(T)$  — разность молярных тепловых потоков, регистрируемых для стеклообразного образца и того же образца после его полной кристаллизации,  $T_{cr}$  — температура полной кристаллизации МС, достигаемая в процессе нагрева.

Поскольку расчеты избыточных термодинамических функций состояния как для переохлаждённых расплавов (литературный подход [1-2]), так и для МС (подход, развиваемый авторами настоящей работы [3-4]) проводятся в общем температурном диапазоне, возможен сравнительный анализ этих двух методов.

Рис. иллюстрирует совпадение избыточных термодинамических функций состояния высокоэнтропийного MC  $Zr_{35}Hf_{13}Al_{11}Ag_8Ni_8Cu_{25}$  в интервале переохлажденной жидкости с избыточными функциями состояния расплава, взятыми из работы [1], при корректировке методики расчета энтропии плавления.

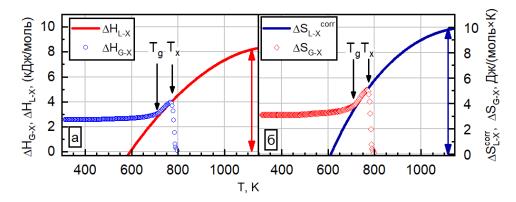


Рисунок. Температурные зависимости избыточной энтальпии (а) и энтропии (б) MC  $Zr_{35}Hf_{13}Al_{11}Ag_8Ni_8Cu_{25}$  (индекс G-X) и переохлажденного расплава (индекс L-X)

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 23-12-00162.

- 1. Ohashi Y. High-entropy design and its influence on glass-forming ability in Zr–Cu-based metallic glass / Y. Ohashi, T. Wada, H. Kato // Journal of Alloys and Compounds. -2022.-V.915.-P. 165366.
- 2. Chegeni M.R. Thermodynamic analysis and modeling of Pd-Ni-S bulk metallic glass-forming system / M.R. Chegeni, W. Ma, S.S. Riegler, A. Ghavimi, M. Rohde, F. Yang, H.J. Seifert, I. Gallino, R. Busch // Acta Materialia. 2025. V. 294. P. 121074.
- 3. Makarov A.S. Determination of the thermodynamic potentials of metallic glasses and their relation to the defect structure / A.S. Makarov, G.V. Afonin, J.C. Qiao, A.M. Glezer, N.P. Kobelev, V.A. Khonik // Journal of Physics: Condensed Matter. -2021. Vol. 33. P. 435701.
- 4. Макаров А.С. Избыточная энтропия металлических стёкол и ее связь со стеклообразующей способностью материнских расплавов / А.С. Макаров, Р.А. Кончаков, Г.В. Афонин, Ц.Ч. Цзиао, Н.П. Кобелев, В.А. Хоник // Письма в ЖЭТФ. 2024. Т. 120. В. 10. С. 794-801.

#### БЫСТРАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЁКЛАХ

Г.В. Афонин<sup>1</sup>, А.С. Макаров<sup>2</sup>, Н.П. Кобелев<sup>3</sup>, В.А. Хоник<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>afoningv@gmail.com</u>

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, <u>a.s.makarov.vrn@gmail.com</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник ФГБУН ИФТТ РАН, <u>kobelev@issp.ac.ru</u>

<sup>4</sup>Зав. науч.-исслед. лаб. ФНМ ВГПУ, <u>v.a.khonik@yandex.ru</u>

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет»

Выполнены исследования внутреннего трения (ВТ) в 14 объемных металлических стеклах на частотах f=0.5-1.8 МГц методами резонансной ультразвуковой спектроскопии (RUS) и электромагнитного акустического преобразования (ЕМАТ). Пример результатов, полученных методами RUS и EMAT, показан на рис.1. Видно наличие пика внутреннего трения в области 380-400 К на частотах около 0,5 МГц. При этом измерения методами RUS и EMAT дают весьма близкие результаты.

Ключевые слова. Внутреннее трение, металлические стекла, релаксация дефектов

Пик внутреннего трения при температурах 400–500 К (на частоте около 0,5 МГц) обнаружен в 12 из 14 исследованных стекол (см.рис.2). Высота пика почти не зависит (или слабо зависит) от предварительной термообработки.

Пик внутреннего трения смещается в сторону высоких температур с ростом частоты, что говорит о его релаксационной природе. Положение пика внутреннего трения определяется условием  $2\pi f \tau = 1$ . Соответственно, можно рассчитать время релаксации  $\tau$ , которое составило примерно  $3 \times 10^{-7}$ с во всех

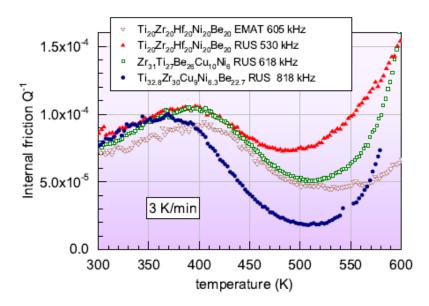


Рис.1. Внутреннее трение металлических стекол в зависимости от температуры. Измерения выполнены методами EMAT и RUS. Наблюдается пик внутреннего трения в области 380-400 К на указанных частотах.

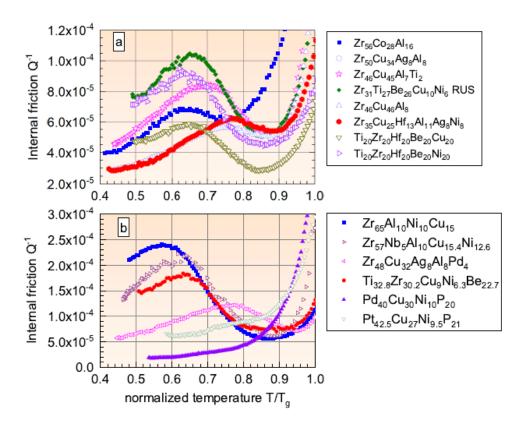


Рис.2. Температурные зависимости внутреннего трения для всех исследованных металлических стекол на частотах 400-600 кГц в зависимости от нормированной температуры  $T/T_g$  ( $T_g$ - температура стеклования). Показана только часть измеренных экспериментальных точек. Во всех стеклах, кроме стекол на основе Pd и Pt, наблюдается пик внутреннего трения при температуре  $0.58\ T_g \le T_{max} \le 0.78\ T_g$ .

случаях. Столь быстрый релаксационный процесс в металлических стеклах установлен впервые.

Четыре металлических стекла исследованы подробно методом RUS на различных частотах. Установлено, что энтальпии активации пиков внутреннего трения изменяются от 0.6 эВ до 1.1 эВ, в зависимости от состава. Впервые определены энтропии активации, которые оказались весьма большими — от 18 до 32 (в единицах постоянной Больцмана).

Физическая природа обнаруженных пиков ВТ связывается с релаксацией дефектов типа межузельных гантелей, вмороженных в твердое стекло при закалке расплава. Эти дефекты являются упругими диполями. Переориентация таких дефектов под действием знакопеременного напряжения вызывает неупругую деформацию и возникновение релаксационного пика ВТ.

Исследование поддержано РНФ в рамках проекта № 23-12-00162.

УДК: 539.213.2:539.219.3:548.51

#### ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ТЕРМИЧЕСКУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ Al<sub>86</sub>Ni<sub>9</sub>Y<sub>5</sub> и Al<sub>86</sub>Ni<sub>9</sub>Gd<sub>5</sub>

Е.А. Свиридова<sup>1</sup>, С.В. Васильев<sup>2</sup>, В.И Ткач<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., ksvir@list.ru

<sup>2</sup>Канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., vasils75@gmail.com

<sup>3</sup>Д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр., stalker 1345@mail.ru

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк ФГБОУ ВО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры», Макеевка

Проведен анализ кинетики неизотермической нанокристаллизации металлических стекол  $Al_{87}Ni_8Gd_5$  и  $Al_{87}Ni_8Y_5$  с различной термической устойчивостью. Определены значения скоростей зарождения и роста нанокристаллов Al, термодинамических и кинетических параметров и установлены причины различия температур кристаллизации в условиях непрерывного нагрева со скоростью 5~K/мин.

Ключевые слова: стекла на основе алюминия, линейный нагрев, нанокристаллизация, скорости зарождения и роста, коэффициент диффузии.

Исследования факторов, определяющих термическую устойчивость металлических стекол на основе Al, важны с практической точки зрения, поскольку формирование на первой стадии кристаллизации нанокомпозитных структур приводит к значительному увеличению прочностных характеристик.

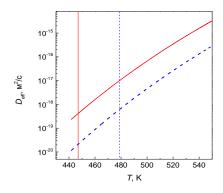
В работе методами дифференциальной сканирующей калориметрии и рентгенографии экспериментально изучены кинетика формирования нанофазных композитов И изменения ИΧ структурных параметров Al<sub>87</sub>Ni<sub>8</sub>Gd<sub>5</sub>  $Al_{87}Ni_8Y_5$ , температуры металлических стеклах И кристаллизации которых при нагреве со скоростью q = 5 K/мин составляют 447 и 479 К соответственно.

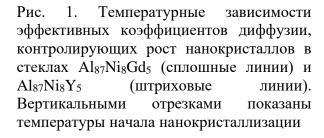
Оцененные по изменениям размеров нанокристаллов эффективные (контролирующие рост) коэффициенты диффузии в диапазоне температур нанокристаллизации в стекле  $Al_{87}Ni_8Gd_5$  приблизительно в 10–20 раз выше, чем в стекле  $Al_{87}Ni_8Y_5$  (рис. 1), однако при температурах начала кристаллизации они близки ( $4\times10^{-19}$  м²/с и  $6\times10^{-19}$  м²/с соответственно) и по абсолютной величине близки к экспериментально измеренным значениям коэффициента самодиффузии чистого Al в этом диапазоне температур [1].

В рамках модели кинетики нанокристаллизации без жесткого столкновения растущих кристаллов по изменениям доли закристаллизованного объема X(T) и средних размеров нанокристаллов  $\left\langle L^3(T) \right\rangle$  оценены изменения скорости зарождения  $J_{\rm exp}(T)$ ,

$$J_{\exp}(T) = \frac{q}{1 - X(T)} \frac{6}{\pi} \frac{d}{dT} \left[ \frac{X(T)}{\langle L^{3}(T) \rangle} \right]$$

#### показанные символами на рис. 2.





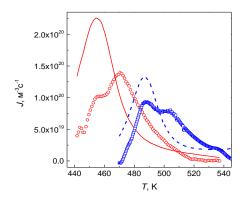


Рис. 2. Определенные по экспериментальным данным  $J_{\rm exp}(T)$  (точки) и расчетные изменения скорости зарождения  $J_{\rm st}$  нанокристаллов Al в стеклах  $Al_{87}Ni_8Gd_5$  ( $\circ$  и сплошная линия) и  $Al_{87}Ni_8Y_5$  ( $\square$  и штриховая линия) при нагреве со скоростью 5 К/мин

Путем аппроксимации изменений  $J_{\rm exp}(T)$  классическим уравнением скорости стационарного гомогенного зарождения  $J_{\rm st}$  (рис. 2) определены значения работы образования критических зародышей  $W^*$ , составляющие (0.45—0.65) от энергий активации эффективной диффузии. Расчеты с использованием значений  $W^*$  и термодинамических моделей, описывающих температурные зависимости разности термодинамических потенциалов кристаллической и аморфной фаз различного состава при больших отклонениях от равновесия, дали значения величины удельной свободной межфазной энергии в стеклах  $Al_{87}Ni_8Gd_5$  и  $Al_{87}Ni_8Y_5$  в пределах 0.09-0.096 и 0.09-0.092 Дж/м² соответственно. Показано, что полученные значения  $\sigma$  и рассчитанные по ним линейные зависимости  $\sigma(T)$  хорошо согласуются с известными литературными данными [2].

Из результатов сравнительного количественного анализа скоростей зарождения и роста нанокристаллов и параметров, определяющих их значения, установлено, что повышенная термическая устойчивость аморфного состояния в сплаве  $Al_{87}Ni_8Y_5$  по сравнению с  $Al_{87}Ni_8Gd_5$  обусловлена более низкой диффузионной подвижностью.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, бюджетная тема FREZ-2023-0003.

- 1. Volin T.E., Baluffi R.W. Annealing kinetics and the self-diffusion coefficient in aluminum // Phys. Stat. Sol. 1968. V. 25. P. 163–173.
- 2. Henits P., Revesz A., Varga L.K., Kovacz Zs. The evolution of the microstructure in amorphous  $Al_{85}Ce_8Ni_5Co_2$  alloy during heat treatment and severe plastic deformation: A comparative study // Intermetallics. -2011.-V. 19. -P. 267–275.

#### УДК.539.67

#### INELASTICITY OF POROUS Ti-18Zr-15Nb POWDER ALLOY

G.V. Markova, Tula State University, Tula, prof., D.Sc. (Eng.), galv.mark@rambler.ru D.V.Permyakova, Tula State University, Tula, postgraduate student, darya.per@gmail.com A.D.Gusev, Tula State University, Tula, postgraduate student, dkines07@gmail.com

The temperature spectra of internal friction and resonant frequency of a porous Ti-18Zr-15Nb powder alloy with varying porosity levels were analyzed. A peak in internal friction accompanied by inflections in the temperature-dependent frequency curve was observed in high-porosity samples. A hypothesis regarding the origin of this phenomenon is proposed.

Keywords: porosity, titanium alloys, internal friction, relaxation maximum, resonant frequency.

Modern biomedical implant requirements necessitate materials with optimal combinations of functional properties that ensure high biological and biomechanical compatibility, effective osseointegration, and absence of toxic effects on the human body. Ti-Zr-Nb system alloys are particularly promising due to their characteristics (corrosion resistance, Young's modulus values closer to bone tissue than currently used alloys). Increased material porosity further enhances osseointegration. Powder metallurgy has proven effective for creating porous structures. Understanding the material's elastic and inelastic behavior enables prediction of implant performance characteristics.

This study investigates elastic and inelastic effects in porous Ti-18Zr-15Nb powder alloy.

The material under study was Ti-18Zr-15Nb powder alloy synthesized via hydride-calcium synthesis, with porosity ranging from 2% to 50%, as determined by hydrostatic weighing. Elastic and inelastic characteristics were evaluated using square-section wire samples (2×2 mm, length 50–55 mm) through mechanical spectroscopy on an RKM-TPI setup in free-decay oscillation mode within the hertz frequency range. The temperature range was  $-150^{\circ}$ C to  $+600^{\circ}$ C, with heating/cooling rates of  $\sim 3-5^{\circ}$ C/min. Strain amplitude was  $\gamma = 1.15 \times 10^{-4}$ . Temperature dependencies of internal friction (TDIF) and squared resonant frequency (TDSF²) were obtained and processed using Origin software.

Several inelastic effects of different origins were observed in the TDIF. At subzero temperatures (down to  $-150^{\circ}$ C), an increase in internal friction (IF) was detected. In the 250–400°C range, an energy dissipation region (up to  $12\times10^{-3}$ ) was identified in the TDIF, accompanied by anomalous extremal behavior in TDSF<sup>2</sup> for samples with porosity below 22%. No such anomaly was observed in less compact samples.

Literature analysis and multi-frequency IF measurements suggested that the IF peak consists of superimposed Snoek-type partial peaks resulting from interactions between the alloy's base components (Ti, Zr, Nb) and oxygen atoms. Heating to 550°C led to an IF increase, likely of grain-boundary origin.

Highly porous samples (P=51% and 54%) exhibited a broad IF peak (height  $150 \times 10^{-4}$ ) with inflections in TDSF<sup>2</sup>. The peak retained its height and temperature

position after two thermal cycles ("heating to  $+100^{\circ}\text{C} \leftrightarrow \text{cooling to } -150^{\circ}\text{C}$ ") but disappeared upon reheating to  $+600^{\circ}\text{C}$ .

Replotting TDSF<sup>2</sup> in "df<sup>2</sup>/T - T" coordinates revealed that inflection points coincided with the IF peak's temperature range, suggesting a relaxation mechanism. The broad IF peak decomposed into two sub-peaks: one at ~25–30°C (height ~0.01, background-subtracted) and another at ~-30°C (height ~0.007).

Based on the analysis of literature, several hypotheses can be proposed regarding the nature of this maximum. If the porous structure is considered as a system containing internal stress concentrators similar to microcracks, then dislocation reactions result in the formation of a destructive internal friction (IF) peak [1]. On the other hand, in heterophase systems, which include porous alloys, when the propagation of elastic waves at pore/matrix interfaces generates elastic stress oscillations that disrupt the phase equilibrium between pores and vacancy solutions in the crystal lattice. A periodic process of vacancy migration into pores and its growth or emission of vacancies into the lattice and causing pore "dissolution". This mechanism accounts for the irreversible dissipation of elastic energy and the observed increase in internal friction [2]. The second hypothesis also explains the formation of two closely spaced maxima, as the studied alloy contains two distinct pore types with different specific surface areas – branched pores with a low form factor and Near-spherical pores with a form factor close to unity.

#### List of references.

- 1. Chukanov A. N., Levin D. M., Muravleva L. V. Internal friction as a measure of local damage to metallic materials // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2000. Vol. 64. No. 9. P. 1714 1717.
- 2. Geguzin Ya. E., Krivoglaz M. A. Movement of macroscopic inclusions in solids. Moscow: Metallurgy. 1971. 344 p.

The study was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 25-29-20055, https://rscf.ru/project/25-29-20055/) and the Tula Region Committee for Science and Innovation.

#### ОЦЕНКА ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ В ВЫСОКООМНОМ GaAs ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.И. Митрохин $^{1}$ , А.В. Гуров $^{2}$ , Л.Н. Коротков $^{3}$ <sup>1</sup>Профессор, mitro4@yandex.ru <sup>2</sup>Аспирант, gurov981998@mail.ru <sup>3</sup>Профессор, 1 korotkov@mail.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В данной работе представлен анализ температурной зависимости внутреннего трения GaAs, легированного примесями с глубокими центрами, при импульсном оптическом облучении и в его отсутствии. Расчёт на основе суперпозиции пиков Дебая с различными частотными факторами позволил воспроизвести форму экспериментальной зависимости.

Ключевые слова: внутреннее трение, полупроводниковый пьезоэлектрик, фотопьезоэлектрическое индуцирование резонансных аккустических волн.

Приборы на основе эффекта оптического индуцирования механических колебаний в GaAs [1] являются перспективным направлением развития приемников оптического сигнала. Приоритетной задачей в этом направлении является увеличение эффективности преобразования оптической энергии в энергию аккустических колебаний в диапазоне рабочих температур прибора.

Как показано в исследовании [2], определяющим фактором эффективности возбуждения механических колебаний является величина внутреннего трения (BT) GaAs. Соответственно при разработке и проектировании подобных необходимость приборов появляется возможности количественной оценки температурной зависимости внутреннего трения.

Внутреннее трение определяется пьезоэлектрическими свойствами кристалла, напряженно-деформированное состояние, в котором описывается тензорным уравнением:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - e_{kij} E_k, \tag{1}$$

где  $\sigma_{ij}$  и  $\varepsilon_{kl}$  - тензоры напряжения и деформации,  $E_k$  - вектор напряженности электрического поля,  $C_{ijkl}$  и  $e_{kij}$  – тензоры жесткости и пьезоэлектрической взаимосвязи.

Изменение напряженности электрического поля, связанного термическим выбросом носителей заряда с глубоких центров, а также фотогенерацией в случае освещения кристалла приводит к изменению жесткости кристалла. Относительное изменение жесткости называется дефектом модуля Δ.

Внутреннее трение в полупроводиковом пьезоэлектрике при отсутствии оптического излучения описывается уравнением Дебая:  $Q^{-1} = \Delta \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2},$ 

$$Q^{-1} = \Delta \frac{\omega t}{1 + \omega^2 \tau^2},\tag{2}$$

где  $\omega$  — угловая частота колебаний;  $\tau$  — время релаксации, зависящее от температуры и определяющееся скоростью термоактивации носителей заряда с глубоких примесных уровней, определяется по формуле:

$$\tau^{-1} = \tau_0^{-1} exp(-\Delta E/kT), \tag{3}$$

где  $\tau_0^{-1}$  – частотный фактор;  $\Delta E$  – энергия активации.

При импульсном оптическом облучении наблюдается уширение пика BT [2]. Объясняется это тем, что оптически сгенерированные носители участвуют в релаксации наряду с термическими, формируя дополнительный спектр релаксационных времён, проявляющийся в области более низких температур. В этом случае BT описывается как сумма пиков  $Q_{Total}^{-1}(T) = \sum_i Q_i^{-1}(T)$ .

Используя эту модель, были аппроксимированы методом наименьших квадратов экспериментальные температурные зависимости пластин GaAs, легированных Cr и Fe.

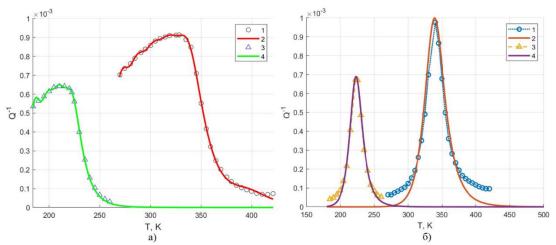


Рисунок. Температурная зависимость внутреннего трения  $Q^{-1}$  в пластине GaAs с примесями Cr(1,2) и Fe(3,4) при импульсном оптическом облучении (а) и на затемненных образцах (б). Точки 1 и 3 – экспериментальные результаты [2], 2 и 4 – аппроксимирующие кривые.

Моделирование на основе суперпозиции дебаевских релаксационных пиков с различными временами релаксации позволило описать уширение спектров внутреннего трения под действием света, подтверждая наличие множественных релаксационных механизмов.

- 1. Митрохин В.И. Эффект оптического индуцирования механических колебаний в монокристаллах арсенида галлия / В.И. Митрохин, С.И. Рембеза, А.А. Руденко // Письма в ЖТФ. -2006. Т. 32. № 11. С. 32 36.
- 2. Митрохин В.И., Кривенко Н.Н., Логинов В.А., Железный С.В. Повышение эффективности фотопьезоэлектрического индуцирования акустических волн в полуизолирующих монокристаллах арсенида галлия // Письма в ЖТФ, 2022, том 48, вып. 10. С. 37-39.

#### РЕЛАКСАЦИЯ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОЭКСТРУЗИИ

Е.В. Яшарова<sup>1</sup>, А.Н. Гангало<sup>2</sup>, С.В. Васильев<sup>3</sup>, Е.А. Свиридова<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Инженер-исследователь, <u>yasharova.liza@yandex.ru</u>

<sup>2</sup>Канд. тех. наук, ст. научн. сотр., заведующий лабораторией, <u>al-gangalo@yandex.ru</u>

<sup>3</sup> Канд. физ.-мат. наук, ст. научн. сотр., <u>vasils75@gmail.com</u>

<sup>4</sup> Канд. физ.-мат. наук, ст. научн. сотр., <u>ksvir@list.ru</u>

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»

ГО ВПО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры», Макеевка

В работе исследовалось влияние деформационного режима гидроэкструзии (ГЭ) на изменение прочностных свойств ультрамелкозернистой (УМЗ) меди, полученной методом равноканального углового прессования. Показано, что прочность монотонно возрастает с ростом деформации вплоть до  $\varepsilon$ =0,9, а при дальнейшем увеличении деформации происходит релаксационное понижение прочности, связанное с деформационным разогревом и падением плотности дислокаций. Влияние деформации ГЭ на характер кривой пластичности носит немонотонный осциллирующий характер.

Ключевые слова: ультрамелкозернистая медь, гидроэкструзия, деформация, прочность, пластичность, плотность дислокаций.

В качестве исследуемого материала использовалась бескислородная медь марки М0б в отожженном состоянии. После предварительной обработки равноканальным угловым прессованием с углом пересечения каналов  $\Phi$ =90° по маршруту В<sub>С</sub> (12 переходов) в исследованном материале формировалась УМЗ структура с характерным размером зерен 200-300 нм. Затем УМЗ медь подвергалась последующей деформации ГЭ при комнатной температуре в интервале логарифмической степени деформации  $\varepsilon$ =0,3-1,2. Механические свойства (предел прочности и пластичность), как исходного УМЗ материала, так и после обработки ГЭ определялись методом испытания на растяжение согласно ГОСТ 1497–84. Величина адиабатического разогрева материала в процессе деформации ГЭ ( $\Delta T$ ) оценивалась по известному соотношению [1]:  $\Delta T = \frac{\beta p}{\rho c_p}$ , где

 $\rho$  — плотность материала,  $c_p$  — удельная теплоемкость, p — давление гидроэкструзии в стабильной стадии процесса, а  $\beta$  — безразмерный параметр, равный 0,95 [1]. Плотность дислокаций рассчитывалась по выражению [2] с использованием данных по средним размерам областей когерентного рассеяния (OKP) — <D> и величинам микронапряжений (< $\epsilon$  $^2>^{1/2}$ ), полученных из анализа

$$(ORP) - \langle D \rangle$$
 и величинам микронапряжении ( $\langle \varepsilon^2 \rangle^{3/2}$ ), полученных из анализа XRD:  $L_d = \frac{2\sqrt{3} \left\langle \varepsilon^2 \right\rangle^{1/2}}{\left\langle D \right\rangle b}$ , где  $b$  — модуль вектор Бюргерса для Cu, равный 0.2556 нм.

Влияние степени деформации ГЭ на прочность и величину адиабатического разогрева УМЗ меди приведены на рис. 1а. Видно, что с увеличением степени деформации величина адиабатического разогрева монотонно возрастает плоть

до 220 К, а прочность увеличивается от 434 МПа до 474 МПа. При превышении разогрева свыше 170 К наблюдается процесс релаксации прочностных свойств, что связано с процессом динамической рекристаллизации меди [3].

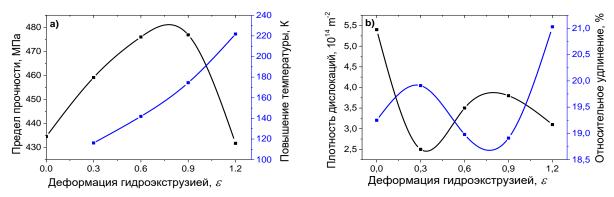


Рисунок 1. Влияние деформации ГЭ УМЗ меди на: а) прочность и адиабатический разогрев, b) пластичность и плотность дислокаций.

Влияние деформации ГЭ на относительное удлинение и плотность дислокаций показано на рис 1b. Видно, что во всем интервале деформирования поведение кривых имеет зеркальный характер, при снижении плотности дислокаций повышается относительное удлинение, а при росте плотности дислокаций происходит его снижение. Значение максимального относительного удлинения  $\delta$ =21% достигается при величине деформации гидроэкструзией  $\varepsilon$ =1,2, при максимальной величине адиабатического разогрева рис 1а. Максимальная наблюдается после дислокаций равноканального плотность прессования (в состоянии УМЗ). Таким образом, в процессе обработки УМЗ меди гидроэкструзией наблюдается два релаксационных процесса, приводящих к понижению плотности дислокаций: первый при  $\varepsilon$ =0,3 связанный с изменением схемы деформирования, в процессе которого происходит снижение плотности дислокаций, но, тем не менее, происходит рост прочности, и второй при  $\varepsilon$ =1,2 связанный с разогревом материала в процессе деформации и резким падением прочности.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, бюджетная тема FREZ-2024-0001.

- 1. Pachla W. Enhanced strength and toughness in ultra-fine grained 99.9% copper obtained by cryo-hydrostatic extrusion / Pachla W., Rulczyk M., Smalc-Koziorowska J., Przybysz S., Wro blewska M., Skiba J., Przybysz M. // Materials Characterization. 2018. Vol.141. P. 375–387.
- 2. Williamson G.K. Dislocation densities in some annealed and cold-worked metals from measurements on the X-ray Debye-Scherrer spectrum / Williamson G.K., Smallman R.E // Philos. Mag. -1956. Vol 1, No. 1.-pp. 34-46
- 3. Утяшев Ф.3. Научные основы деформационных технологий формирования ультрамелкозернистых и наноструктурных объемных материалов: монография / Ф.3. Утяшев, Г.И. Рааб; Москва; Вологда: Инфра-Инженерия, 2021. 160с.

### УЛЬТРАЗВУКОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ОРТО- И ПАРА-ТЕРФЕНИЛЕ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 1 ГПА И ТЕМПЕРАТУРЕ 77-300 К

И.В. Данилов<sup>1</sup>, Е.Л. Громницкая<sup>2</sup>, В.В. Бражкин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, <u>idanilov@hppi.troitsk.ru</u>

<sup>2</sup>Ведущий научный сотрудник, <u>grom@hppi.troitsk.ru</u>

<sup>3</sup>Директор ИФВД РАН, <u>brazhkin@hppi.troitsk.ru</u>

ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк, г. Москва

В работе представлены результаты ультразвукового исследования упругих свойств кристаллического и стеклообразного орто-терфенила, а также пара-терфенила, в котором наблюдается переход 2 рода как под давлением, так и при изменении температуры.

Ключевые слова: скорость ультразвуковых волн, высокие давления, переход стекложидкость, молекулярные глассформеры, фазовые переходы

Орто-терфенил (ОТР  $C_{18}H_{14}$ ) является типичным примером неассоциированного хрупкого глассформера ( $T_g = 243$  K) [1,2]. Мы провели ультразвуковое исследование ОТР  $C_{18}H_{14}$  в кристаллическом и стеклообразном состояниях, а также другой изоморфной модификации терфенила, паратерфенила (РТР), и сравнили упругие свойства кристаллических орто-, пара-, и также стеклообразного о-терфенила.

Были проведены низкотемпературные (77 K) эксперименты по определению скоростей ультразвуковых волн при давлениях до 1 ГПа для орто-терфенила в кристаллической и стеклообразной формах, а также для кристаллического паратерфенила (рис. 1). Сравнение упругих свойств этих модификаций показало, что

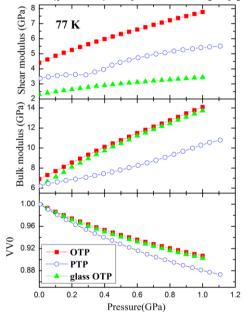


Рисунок 1. Модули упругости при изотермическом сжатии орто- (стекло и кристалл) и пара-терфенила при 77 К

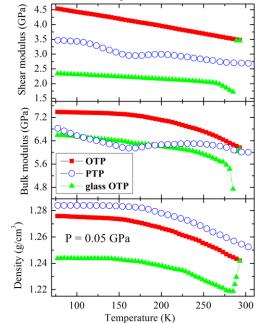


Рисунок 2. Модули упругости при изобарическом нагреве орто- (стекла и кристалла) и пара-терфенила при 0,05 ГПа

стеклообразный и кристаллический ОТР имеют близкие сжимаемость и объемный модуль упругости. Однако модуль сдвига стекла почти в 2 раза ниже, чем у кристаллического ОТР (разница более 80%). В пара-терфениле при 0,34 ГПа наблюдался фазовый переход из триклинной в моноклинную фазу, легко обнаруживаемый по излому скоростей ультразвука и модуля сдвига. Однако ни объемный модуль упругости, ни плотность не демонстрируют существенных аномалий в области перехода. Поэтому мы считаем, что фазовый переход в ОТР является фазовым переходом 2 рода.

Изобарический отогрев при низких давлениях (0,05 ГПа) (рис. 2) показал, что стеклообразный ОТР превращается в переохлажденную жидкость при 280 К, которая довольно быстро кристаллизуется при 290 К. Скачок плотности при кристаллизации составляет около 2%. Кристаллический орто-терфенил имеет слабую температурную зависимость как модулей упругости, так и плотности. В пара-терфениле мы наблюдали фазовый переход из триклинной в моноклинную структуру. Так же, как и под давлением, нам не удалось обнаружить скачок плотности при этом переходе, но объемный модуль упругости В пара-терфенила при изобарическом нагреве демонстрирует небольшое размягчение перед переходом, в отличие от изотермического сжатия.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-12-00037.

- 1. Cai Q. Pressure- and temperature-dependent inelastic neutron scattering study of the phase transition and phonon lattice dynamics in para-terphenyl / Q. Cai, M. McIntire, L. L. Daemen, C. Li and E. L. Chronister // Physical Chemistry Chemical Physics. 2021. T. 23. C. 8792.
- 2. Vaidya S.N. Compressibility of 18 Molecular Organic Solids to 45 kbar / S.N. Vaidya, G.C. Kennedy // The Journal of Chemical Physics. 1971. T. 55. C. 987.

## SESSION 3 DIELECTRIC RELAXATION

#### УДК 537.62, 544.47

#### СТРУКТУРА, ДИССИПАТИВНЫЕ И ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Pb<sub>2</sub>ScNbO<sub>6</sub>

К.Г. Абдулвахидов<sup>1</sup>, Ч. Ли<sup>2</sup>, Д.С.Ким<sup>3</sup>, М. М. Дудургов<sup>4</sup>, Б.С. Кульбужев<sup>5</sup>, С.М. Отажонов<sup>6</sup>, Н. Юнусов<sup>7</sup>

<sup>1</sup>Главный научный сотрудник, phys.kam@mail.ru

<sup>2</sup>Научный сотрудник, lizhengyou5@yandex.ru

<sup>3</sup>Студент, kim dmitriy2005@mail.ru

ФГБОУ «Южный федеральный университет»

<sup>4</sup>Ассистент, physics@ingg.ru

<sup>5</sup> Декан факультета,

ФГБОУ «Ингушский государственный университет»

<sup>6</sup> Завкафедрой технологического образования, otajonov\_s@mail.ru

<sup>7</sup>Ассистент, otajonov\_s@mail.ru

«Ферганский государственный университет», Узбекистан

В работе представлены результаты изучения свойств композита  $CoFe_2O_4$ - $Pb_2ScNbO_6$ . На диэлектрических спектрах обнаружены два максимума, первый из которых обусловлен фазовым переходом  $Pb_2ScNbO_6$  и максвелл-вагнеровской релаксацией, а второй - магнитным фазовым переходом в  $CoFe_2O_4$  и сменой типа проводимости. Обнаружено, что коэффициент магниторезистивности MR(H) имеет колоссальное значение и зависит от частоты измерительного поля. Для описания магнитных свойств композита использована модель случайной магнитной анизотропии.

Ключевые слова: композит, шпинель, катализатор

Целью данной работы являлось изучение отклика физических свойств композита 0.5 CFO- 0.5 PSN как на магнитные, так и на электрические поля и температуру, а также возможности использования его в качестве катализатора для получения водорода. Композит был получен совместным спеканием  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  и  $\text{Pb}_2\text{ScNbO}_6$  при температуре  $900\ ^{\circ}\text{C}$  в течение  $2\ \text{vacob}$ .

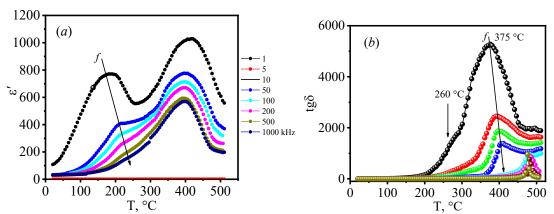


Рис.1 Температурные зависимости диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'(a)$  и тангенса угла диэлектрических потерь  $tg\delta(b)$  композита 0.5CFO-0.5PSN

Диэлектрическими измерениями обнаружены два максимума. Первый обусловлен фазовым переходом в PSN, второй при более высоких температурах—

фазовым переходом в СГО. Для измерения магнитодиэлектрических MD(H) и магниторезистивных MR(H) коэффициентов при ортогональном расположении векторов H и E использовали следующие общеизвестные формулы:

$$MD(H) = (\varepsilon'(H) - \varepsilon'(0))/\varepsilon'(0) \tag{1}$$

$$MR(H) = (R'(H)-R'(0))/R'(0)$$
 (2)

Результаты приведены на рис.2.

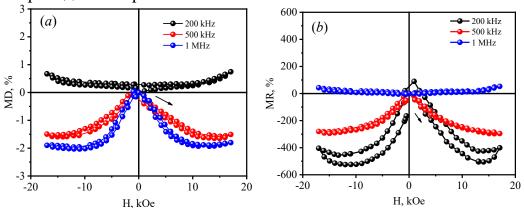


Рис. 2. Зависимости магнитодиэлектрических коэффициентов MD(H) (a) и магниторезистивности MR(H) (b) композита 0.5CFO-0.5PSN от величины H

Для изучения магнитных свойств композита использованы закон приближения намагниченности к насыщению и модель стохастической магнитной структуры и обнаружено, что основные параметры магнитных петель гистерезиса у композита меньше, чем у СГО. Результаты приведены в таблице.

Таблица Параметры петель магнитного гистерезиса и стохастических доменов CFO и  $0.5 {\rm CFO} {-} 0.5 {\rm PSN}.$ 

x	CFO	0.5CFO		CFO	0.5CFO		CFO	0.5CFO
H <sub>c</sub> , Oe	1049	1037	H <sub>R</sub> , Oe	3421	3952	$\rho$ , g.cm <sup>3</sup>	5.289	5.289
$M_{\rm r}$ *10 <sup>-3</sup> ,	23.45	24.04	H <sub>a</sub> , Oe	12131	11208	$M_s$ ,	72.05	60.36
emu/g	23.43	24.04				emu/g		
$2R_{\rm c}$ , nm	68	128	$2R_L$ ,	99	232	$K_{\rm eff}, \times 10^6$		
			nm			erg/cm <sup>3</sup>	2.311	1.789
$H_L$ , Oe	1594	1199	A, 10 <sup>-8</sup> erg/cm	0.75	2.58	$M_r/M_s$	0.325	0.398

Изучение электрокаталитических свойств как CFO, так и композита показало эффективность композита в качестве катализатора при разложении воды на водород и кислород.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание в сфере научной деятельности № ФЕНВ-2023-0019).

### **ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НА ОСНОВЕ НИТРИДОВ АЛЮМИНИЯ И ГАЛЛИЯ**

И.Т. Зезянов<sup>1</sup> <u>А.В. Солнышкин<sup>2</sup></u> О.Н. Сергеева<sup>3</sup>, Е.Ю.Каптелов<sup>4</sup>, Ш.Ш. Шарофидинов<sup>5</sup>, И.П. Пронин<sup>6</sup>, <sup>1</sup> Аспирант, a.solnyshkin@mail.ru <sup>2</sup> Д-р физ.-мат. наук, профессор, a.solnyshkin@mail.ru <sup>3</sup> К-т физ.-мат. наук, вед. инженер, о\_n\_sergeeva@mail.ru Тверской государственный университет, Тверь, Россия <sup>4</sup>К-т физ.-мат. наук, с.н.с., kaptelov@mail.ioffe.ru <sup>5</sup>К-т физ.-мат. наук, с.н.с, Petrovich@mail.ioffe.ru <sup>6</sup>Д-р физ.-мат. наук, в.н.с., Petrovich@mail.ioffe.ru

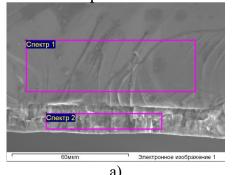
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

В работе исследованы гетероструктуры на основе полярных пленок AlN и AlGaN, эпитаксиально выращенных на подложках SiC/Si. Установлено, что в отличии от пленок AlN в гетероструктуре AlGaN/SiC/Si содержащих чередующиеся слои AlN и AlGaN различного состава наблюдается ярко выраженная дисперсия.

Ключевые слова: эпитаксиальные пленки AlGaN, диэлектрическая спектроскопия.

Пьезоэлектрические тонкие плёнки привлекают внимание в области микроэлектромеханических систем (МЭМС) с самого начала развития этих технологий. Это связано с тем, что пьезоэлектрический эффект по своей природе представляет собой электромеханическое взаимодействие, что делает его особенно актуальным для подобных применений [1, 2]. Нитриды алюминия и галлия являются ключевыми материалами, способствующим расширению областей применения этих датчиков в условиях высоких температур и агрессивных внешних воздействий [3].

Для исследований выбраны пленки нитрида алюминия (AlN) и аглана (AlGaN), эпитаксиально выращенные на подложках SiC/Si, методом хлоридгидридной эпитаксии. СЭМ-изображения исследованных структур представлены на рис.1.



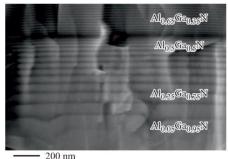


Рис. 1. СЭМ-изображения боковых сколов: a - AlN/SiC/Si,  $\delta - AlGaN/SiC/Si$ .

Верхний слой толщиной 12 мкм соответствует пленке AlN, рис.1(а), который по данным энергодисперсионного анализа соответствует составу близкому к стехиометрическому. Тонкий светлый слой между кремниевой подложкой и пленкой AlN является карбидом кремния SiC. На рис. 1(б) представлена гетероструктура, состоящая из повторяющихся тонких (70 нм и

менее) слоев AlGaN с переменным составом. Причем состав образца изменяется от подложки к поверхности пленки. Вначале находится слой практически чистого GaN с содержание GaN, равным приблизительно 95 ат.%. Затем, по мере увеличения толщины, слой все более и более обогащается Al. По достижению слоем толщины, приблизительно равной 1,1 мкм, происходит резкое изменение состава слоя. Общая толщина структуры AlGaN составляет 4 мкм.

Частотные зависимости диэлектрической проницаемости для пленок, структуры которых рассмотрены выше, представлены на рис. 2.

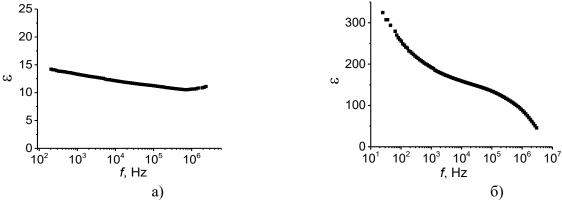


Рис.2. Дисперсионные зависимости диэлектрической проницаемости для структур: a - AlN/SiC/Si,  $\delta - AlGaN/SiC/Si$ .

Как видно из рис.2(a), в области низких частот до 1 к $\Gamma$ ц наблюдается незначительная дисперсия диэлектрической проницаемости, которую можно связать с небольшим вкладом проводимости пленок по постоянному току. Начиная с частоты  $5\cdot10^5$   $\Gamma$ ц и вплоть до  $3\cdot10^6$   $\Gamma$ ц, наблюдается незначительный рост диэлектрической проницаемости, которую можно связать с объемно зарядовой поляризации, возникающей на границе раздела AlN/SiC.

Для гетероструктуры AlGaN (рис.2(б)) наблюдается значительная частотная зависимость диэлектрической проницаемости. Как видно из данного рисунка, существует две области дисперсии – низкочастотная и высокочастотна. Низкочастотная дисперсия связана с проводимостью  $\sigma$  по постоянному току, значение которой составляет  $\sim 10^{-6}~\rm Om^{-1}m^{-1}$ . В области частот свыше  $10^4~\rm \Gamma$ ц происходит дальнейшее уменьшение величины диэлектрической проницаемости, связанное с объемно зарядовой поляризацией, которая формируется на границах раздела AlGaN различного состава, а также на интерфейсе слоя Al–GaN.

- 1. Almur, A.S. Aluminum Nitride Out-of-Plane Piezoelectric MEMS Actuators / A.S. Almur, M. Kazemi, M. Ménard, F. Nabki // Micromachines. 2023. V. 14. P. 700
- 2. Qi, H. Simulation and preparation of FBARs based on AlN thin films / H. Qi, H. Zhang, N. Gao, Y. Fang, X. Xie, L. Bian, Y., Fang, G. Chen // Materials Science in Semiconductor Processing. 2025. V. 185. P. 108886
- 3. Yadav, N. Effect of Growth Induced Residual Stress in Epitaxial AlN Thin Film on SiC Substrate for MEMS Applications / N. Yadav, S. Dutta, K. Narang, I. Yadav, A. Pandey, R. Jha, M.V.G. Padmavati // Transactions on Electrical and Electronic Materials. 2025. V. 26. P.125-133

### ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ДОНОРНОЙ ПРИМЕСИ ВА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ НИОБАТА КАЛИЯ НАТРИЯ

E.B. Барабанова<sup>1</sup>, А.А. Макулин<sup>2</sup>, Н.М. Оспельников<sup>3</sup>

<sup>1</sup>доцент, к.ф.-м.н., barabanova.ev@tversu.ru

<sup>2</sup>магистр, andr.makulin@mail.ru

<sup>3</sup>аспирант, orionikita@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

В работе представлены результаты исследования влияния концентрации донорной примеси бария на диэлектрические свойства керамики ниобата калия натрия. Установлено, что увеличение концентрации примеси до 5 мол. % не приводит к значительным изменениям фазовых переходов в керамике. Показано, что параметры релаксационного процесса, обусловленного миграционной поляризацией, испытывают экстремум в точке низкотемпературного фазового перехода и не меняются при переходе через температуру Кюри.

Ключевые слова: сегнетоэлектрическая керамика, гетеровалентное легирование, дисперсия диэлектрической проницаемости, фазовый переход, миграционная поляризация.

Данная работа посвящена исследованию керамики ниобата калия натрия (K,Na)NbO<sub>3</sub>, легированной барием в количестве 1 (KNBN1) и 5 (KNBN5) мол.%. Изготовление образцов было проведено по классической керамической технологии путём предварительного раздельного синтеза ниобатов калия и натрия. Готовые ниобаты смешивались с карбонатом бария в требуемых пропорциях, далее проводилось формование керамики при приложении давления 650 МПа и спекание образцов при температуре 1100 °C.

Проведено исследование керамики KNBN методом диэлектрической спектроскопии в широкой области частот (1Гц-1МГц) и температур (30-500 °C). Показано, что не зависимо от концентрации примеси в образцах наблюдаются два фазовых перехода, характерных для керамики ниобата калия натрия, при практически одинаковых температурах.

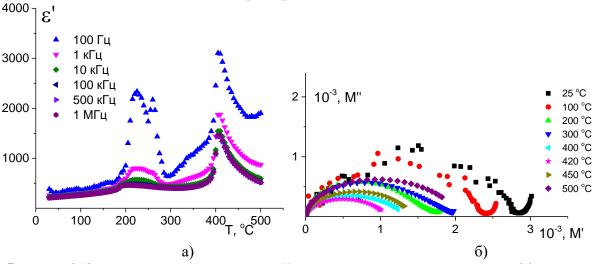


Рисунок 1. Зависимость диэлектрической проницаемости от температуры (a) и диаграмма дисперсии электрического модуля (б) для керамики KNBN1

Диаграммы дисперсии диэлектрической проницаемости для исследуемых составов представляют собой прямые линии. В связи с этим удобно перейти к описанию диэлектрических свойств через электрический модуль. В таком случае диаграммы будут представлять собой уже дуги полуокружности (рис. 1б). Причем угол раствора диаграммы уменьшается при приближении к температуре Кюри и увеличивается в области температур выше точки Кюри. Такого вида диаграммы говорят о протекании релаксационного процесса, вероятнее всего, связанного с миграционной поляризацией, характерной для керамических диэлектриков, и часто обусловленной повышенной проводимостью материала.

Если построить график зависимости частоты, на которой наблюдается максимум мнимой части электрического модуля от температуры (рис.2), то можно описать поведение релаксационного процесса при фазовых переходах. Показано, что область фазового перехода из орторомбической фазы в тетрагональную характеризуется резким ростом  $\nu_m$ , достижением максимума при 225-230 °C и спадом. Такое поведение связано с перестройкой структуры в данной области и, следовательно, с изменением подвижности зарядов, участвующих в поляризации и проводимости. Иная картина наблюдается в температуры Кюри: зависимость  $ln\nu_{\rm m}(1/T)$ линейная. предположить, что подвижность (и/или концентрация) носителей заряда повышается за счет тепловой энергии и становится нечувствительной к изменениям структуры при фазовом переходе. При этом повышение легирующей примеси увеличивает концентрации также разупорядоченности структуры и приводит к ослаблению связи между частицами вещества, что способствует уменьшению времени релаксации данного процесса (увеличению  $v_{\rm m}$ ). Это объясняет большие значения диэлектрической проницаемости на низких частотах у образца KNBN5.

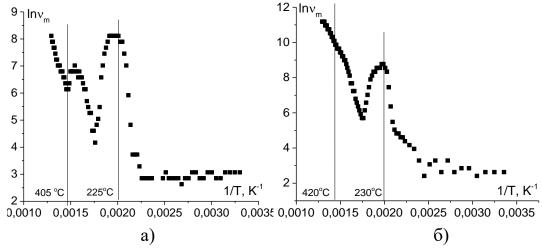


Рисунок 2. Зависимость частоты максимума мнимой части электрического модуля от температуры для керамики KNBN1 (a) и KNBN5 (б)

Работа выполнена в рамках Государственного задания по научным исследованиям № 0817-2023-0006.

#### РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В КЕРАМИКЕ НИОБАТА КАЛИЯ НАТРИЯ С ДОНОРНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

E.B. Барабанова<sup>1</sup>, А.А. Макулин<sup>2</sup>, В.А. Озеров <sup>3</sup>

<sup>1</sup>доцент, к.ф.-м.н., barabanova.ev@tversu.ru

<sup>2</sup>магистр, andr.makulin@mail.ru

<sup>3</sup>магистр, vlad\_ozerov02@mail.ru

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

В работе представлены результаты исследования влияния типа донорной примеси на диэлектрические свойства керамики ниобата калия натрия. Установлено, что в зависимости от типа легирующей примеси в керамике можно выделить различные релаксационные процессы. Для керамики, легированной барием, наблюдается процесс миграционной поляризации, а для керамики, легированной кальцием, - миграционной и тепловой ионной поляризации.

Ключевые слова: сегнетоэлектрическая керамика, гетеровалентное легирование, дисперсия диэлектрической проницаемости, фазовый переход, механизмы поляризация.

Сегнетоэлектрическая керамика относится к важным функциональным материалам, находящим свое применение практически во всех отраслях промышленности. Это различные датчики, преобразователи, генераторы, актюаторы и т.д. Одним из наиболее интересных и перспективных составов является керамика ниобата калия натрия KNN. она относится к материалам со структурой перовскита, описываемых формулой ABO<sub>3</sub>. Для модификации свойств применяют легирование. При этом замещение возможно как по позиции A, так и по позиции B.

В работе проводилось исследование керамики ниобата калия натрия (K,Na)NbO<sub>3</sub>, легированной барием (KNBN) и кальцием (KNCN) в количестве 1 мол.%. Замещение проводилось по катионам щелочных металлов в позиции А. Изготовление образцов было проведено по классической керамической технологии путём предварительного раздельного синтеза ниобатов калия и натрия. Готовые ниобаты смешивались с карбонатом бария или кальция в требуемых пропорциях, далее проводилось формование керамики при приложении давления 650 МПа и спекание образцов при температуре 1100 °C.

Проведено исследование синтезированной керамики методом диэлектрической спектроскопии в широкой области частот (1Гц-1МГц) и температур (30-500 °C). Показано, что независимо от типа примеси в образцах наблюдаются два фазовых перехода, характерных для керамики ниобата калия натрия [1]: в области 220 и 420 °C.

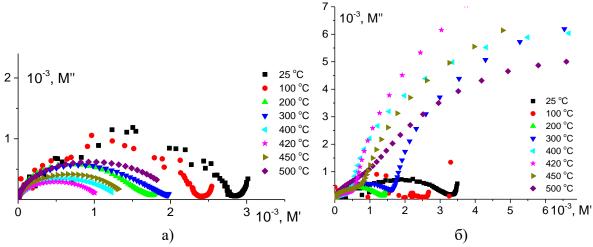


Рисунок. Диаграммы дисперсии электрического модуля для керамики KNBN (a) и KNCN (б)

Для анализа диэлектрических свойств рассматривали поведение электрического модуля, который является величиной обратно комплексной диэлектрической проницаемости:

$$M = \frac{1}{\varepsilon} = \frac{M'}{M'^2 + M''^2} + i \frac{M''}{M'^2 + M''^2}$$

На диаграммах M''(M') можно наблюдать дуги полуокружности (рис.). В случае легирования барием одна дуга полуокружности соответствует одному релаксационному процессу, который, согласно величине времени релаксации ( $10^{-2}$ - $10^{-3}\,$  с), обусловлен миграционной поляризацией. В керамических материалах накопление слабосвязанных зарядов возможно на границах зерен.

В тоже время для образца, легированного кальцием, можно выделить две дуги полуокружности и, следовательно, два релаксационных процесса: низкочастотный, как и случае образца KNBN, связан с миграционной поляризацией, а высокочастотный — с тепловой ионной поляризацией. Т.е. можно разделить вклады от процессов на границах и внутри зерен. Вероятнее всего, такая разница в диэлектрических свойствах объясняется отличием ионных радиусов легирующих примесей. Радиус катиона  $Ba^{2+}$  (1,38 Å) близок к радиусу катиона  $K^+$  (1,33 Å), а катиона  $Ca^{2+}$  (1,04 Å) — к  $Na^+$  (0,98 Å) [2]. Следовательно, в первом случае преобладают более крупные катионы, а во втором — катионы меньшего радиуса. Таким образом, возникающее при легировании искажение элементарной ячейки в керамиках будет различным.

Работа выполнена в рамках Государственного задания по научным исследованиям N = 0.817-2023-0006.

- 1. Li J.-F. (K,Na)NbO3-based lead-free piezoceramics: fundamental aspects, processing technologies, and remaining challenges / J.-F. Li, K. Wang, F.-Y. Zhu, L.-Q. Cheng, F.-Z. Yao // J. Am. Ceram. Soc. -2013. -V. 96. -p. 3677 3696.
  - 2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия / Г.Б. Бокий. М.: Hayka, 1971. 400 c.

# ОСОБЕННОСТИ РЕЛАКСАЦИИ ГАРМОНИК ТОКА ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИИ КРИСТАЛЛА Rb<sub>2</sub>ZnCl<sub>4</sub>B НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЕ ПОСЛЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТЖИГА

В.В. Горбатенко<sup>1</sup>, Б.Н. Прасолов<sup>2</sup>, Н.В. Даценко<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ΦГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», доцент, к.ф-м.н., доцент, vlgorbatenko@mail.ru

<sup>2</sup>OOO « Инвестиции и технологии», Воронеж, Россия, директор, д.ф.-м.н., профессор, vlgorbatenko@mail.ru

<sup>3</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», доцент, к.т.н., доцент, natdatsenko@mail.ru

В работе представлены результаты гармонического анализа двойных петель диэлектрического гистерезиса, возникающих в процессе переполяризации кристалла  $Rb_2ZnCl_4$  в несоразмерной фазе после электрического отжига. Экспериментально установлено, что в индуцированной электрическим полем сегнетоэлектрической фазе в несоразмерной фазе имеются доменные границы и процесс освобождения доменных границ от дефектов

Ключевые слова: несоразмерная фаза, сегнетоэлектрическая фаза, фазовый переход, поляризация, гармонический анализ, доменные границы

Известно [1], что в исследуемых образцах сегнетоэлкетрических кристаллов, вследствие приложения к ним переменного электрического поля  $E(t) = E_m \sin \omega_0 t$  частотой  $\omega_0$  и амплитудой  $E_m$ , достаточной для полной монодоменизации образца, возникает ток сложной периодической формы, плотность которого описывается рядом Фурье:

$$J_{x}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} J_{k} \cos(k\omega_{0}t - |\varphi_{k}|),$$

где k — номера гармоник ряда Фурье,  $J_k$  — амплитуда k-гармоники плотности тока,  $\varphi_k$  — углы сдвига фаз между соответствующими гармониками тока и их реактивными составляющими. Во время изотермической выдержки в несоразмерной фазе (НФ) исследуемого образца кристалла Rb<sub>2</sub>ZnCl<sub>4</sub> при температуре  $T = T_c + 3,2$  К ( $T_c$  - точка Кюри) методом гармонического анализа [2] временной зависимости плотности тока  $J_x(t)$  определены  $J_k$  и  $\varphi_k$ . Процесс переполяризации исследуемого образца проводился в НФ под действием E(t) частотой 0,3 Гц и амплитудой  $E_m = 1,6\cdot 10^6$  В/м, достаточной для полной монодоменизации образца. При помощи пакета прикладных программ Mathcad синтезированы временные зависимости  $J_x(t)$  и временные зависимости реактивной  $J_c(t)$  слагающей и активной  $J_g(t)$  слагающей плотности тока  $J_x(t)$ . Электрический отжиг [1] производился при изотермической выдержке исследуемого образца кристалла Rb<sub>2</sub>ZnCl<sub>4</sub> путем подключения переменного электрического поля ( $E_x$ ) с частотой 7 кГц и амплитудой выше коэрцитивного

поля  $(E_k)$ . Известно [1], что воздействие поля  $E_{\sim}$  на образец в сегнетоэлектрической фазе (СФ) приводит к уменьшению  $E_k$ , что подтверждает процесс освобождения доменных границ (ДГ) от дефектов. После выключения  $E_{\sim}$  происходит увеличение  $E_k$ , то есть обратный процесс - процесс закрепления ДГ дефектами.

Установлено, что после отключения  $E_{\sim}$  наблюдается релаксация амплитуд гармоник  $J_{s}$  и  $J_{c}$ , а релаксация амплитуд гармоник  $J_{s}$  не наблюдается, то есть амплитуды гармоник  $J_{s}$  остаются постоянными, а соответствующие им углы  $\phi_{k}$  увеличиваются после отключения  $E_{\sim}$ . Таким образом, экспериментально установлено, что в индуцированной электрическим полем СФ в НФ имеются ДГ и процесс освобождения доменных границ от дефектов.

- 1. Горбатенко, В. В. Исследование коэффициентов в разложении свободной энергии кристалла  $Rb_2ZnCl_4$  по поляризации методом гармонического анализа / В. В. Горбатенко, Б. Н. Прасолов // Известия Российской академии наук. Серия физическая. -2016. -T. 80, № 9. -C. 1247-1250. DOI 10.7868/S0367676516090143.
  - 2. Харкевич, А. А. Спектры и анализ / А. А. Харкевич. М.: ГИФМЛ, 1962. 288 с.

#### СТЕПЕНЬ РАЗМЫТИЯ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА И ТЕМПЕРАТУРА ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ В ПРОЗРАЧНОЙ КЕРАМИКЕ

 $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3 - xPbZr_{0.53}Ti_{0.47}O_3$ 

Л.С.Камзина<sup>1</sup>, В.Г.Залесский<sup>2</sup>, К.В.Дьяконов<sup>3</sup>

- <sup>1</sup> Старший научный сотрудник, к.ф.м.н., ASKam@mail.ioffe.ru
- <sup>2</sup> Старший научный сотрудник, к.ф.м.н., vg.zalessky@gmail.com
- 3 Старший научный сотрудник, к.ф.м.н., K.Dyakonov@mail.ioffe.ru Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

В работе представлены результаты исследования влияния содержания компоненты  $PbZr_{0.53}Ti_{0.47}O_3$  (PZT) на степень размытия фазового перехода, а также

на взаиморасположение температуры деполяризации (Td) и морфотропного фазового перехода ( $T_{F-R}$ ) в прозрачной керамике Pb(Mg1/3Nb2/3)O3-xPbZr0.53Ti0.47O3 (PMN-xPZT) (x = 10, 16, 23, 33%). Обнаружена связь величины x со свойствами керамики:

составы с малой величиной x = 10, 16% обнаруживают чисто релаксорные свойства, а низкотемпературная фаза является неэргодической релаксорной фазой, в то время как составы с x = 23, 33%, наряду с релаксорным поведением, претерпевают спонтанный фазовый переход 1рода в сегнетоэлектрическую фазу в отсутствие электрического поля, а низкотемпературная фаза является эргодической фазой. Показано, что

во всех составах происходит одноэтапный переход поляризованного образца в релаксорную фазу, т. е. температуры Td и TF-R совпадают.

Ключевые слова: прозрачная керамика, релаксоры, сегнетоэлектричество, индуцированный фазовый переход.

В последнее время прозрачная сегнетоэлектрическая керамика привлекает все большее внимание исследователей из-за ряда преимуществ по сравнению с прозрачными монокристаллами, такими как низкая стоимость, простота изготовления, хороший контроль состава и т. д. Исследуемая в данной работе прозрачная керамика PMN–xPZT с x = 10, 16, 23 33, изготовленная нами [1], обладала высокой прозрачностью ( $\sim 65\%$  для x=10,16,23) и большой величиной электрооптического эффекта [2].

В работах, посвященных этой системе, совсем нет сведений о взаимосвязи между температурой деполяризации предварительно поляризованных образцов Td и температурой морфотропного фазового перехода (МФП)  $T_{F-R}$ . Эти температуры могут совпадать друг с другом как в большинстве релаксоров (одноэтапный переход) [3], так и различаться как в релаксорах, имеющих размытый фазовый переход в отсутствие электрического поля (двухэтапный переход) [4]. С этой целью в работе проводились диэлектрические, оптические и пироэлектрические измерения.

Диэлектрические измерения показали, что в отсутствие электрического поля во всех образцах наблюдается только один максимум  $\varepsilon$  и tan  $\delta$ , причем эти температуры не совпадают, что свидетельствует о размытом фазовом переходе из релаксорной в параэлектрическую фазу. Других резких аномалий, например, соответствующих МФП переходу, не наблюдается. Дополнительные аномалии

при МФП проявляются в образцах, поляризованных в электрическом поле. Более чувствительные оптические измерения показали, что даже в отсутствие электрического поля составы с x = 23, 33%, наряду с релаксорным поведением, претерпевают спонтанный фазовый переход 1рода в сегнетоэлектрическую фазу, в то время как составы с x = 10, 16% обнаруживают только релаксорные свойства (рис.1).

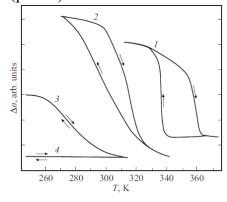


Рис .1. Зависимости  $\Delta n$  от температуры в режимах охлаждения (ZFC) и нагревания (ZFH) в отсутствие электрического поля для PMN–xPZT с x = 33 (I), 23 (I), 16 (I), 10% (I).

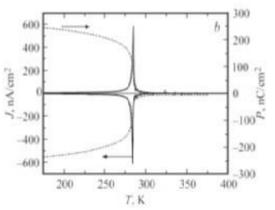


Рис.2. Температурные зависимости пироэлектрического тока и остаточной поляризации для керамики x=16%

При измерении температурных зависимостей пироэлектрического тока и остаточной поляризации для исследуемых керамик обнаружено, что во всех образцах при температуре, соответствующей температуре МФП ( $T_{F-R}$ ), наблюдаются максимум пиротока, перегиб на кривой остаточной поляризации, а также максимум tan  $\delta$  поляризованного образца. Это свидетельствует об одноэтапном переходе поляризованного образца в релаксорную фазу, т.е. температуры деполяризации  $T_d$  и  $T_{F-R}$  совпадают. В качестве примера на рис.2 представлены эти зависимости для керамики с х=16%. Исследуемые образцы имеют разную структуру низкотемпературной фазы. В образцах с х=10,16%, в которых отсутствует спонтанный фазовый переход, низкотемпературная фаза является неэргодической релаксорной фазой, в то время как в образцах со спонтанным фазовым переходом (х=23,30%) низкотемпературная фаза является эргодической сегнетоэлектрической фазой.

Таким образом, несмотря на разную структуру низкотемпературной фазы, во всех образцах наблюдается одноэтапный переход поляризованного образца в релаксорную фазу.

- 1. W. Ruan, G. Li, J. Zeng, L. S. Kamzina, H. Zeng, L, Zheng, A. Ding. J. Am. Ceram. Soc. **95**, 2103 (2012)
- 2. Л.С. Камзина, W. Ruan, G. Li, J. Zeng. ФТТ **54**, 10,1899 (2012)
- 3. V. Bobnar, Z. Kutnjak, R. Pirc, A. Levstik. Phys. Rev. B 60, 9, 6420 (1999).
- 4. E. Sapper, S. Schaab, W. Jo, T. Granzow, J. R"odel. J. Appl. Phys. 111, 014105 (2012)

## STUDY OF DIELECTRIC PROPERTIES OF (1-x)Ba<sub>0.95</sub>Pb<sub>0.05</sub>TiO<sub>3</sub>+x Co<sub>2</sub>O<sub>3</sub> FERROELECTRICS CERAMICS WITH COBALT OXIDE IMPURITY

R. V. Dikov<sup>1</sup>, A. V. Sopit<sup>2</sup>

Cand. Phys.-Mat. Sci., Associate Professor, <a href="mailto:romanodc@yandex.ru">romanodc@yandex.ru</a>
 Volgograd State Social-Pedagogical University, Russia
 Cand. Phys.-Mat. Sci., Associate Professor, sandrej74@mail.ru
 Volgograd State Technical University, Russia

Annotation. The effect of cobalt concentration on the character of the polarization loops in the Ba<sub>0.95</sub>Pb<sub>0.05</sub>TiO<sub>3</sub> ferroelectric ceramics is studied.

Keywords: ferroelectric ceramics, cobalt oxide impurity, polarization loops.

The low- and infra-low-frequency dielectric response of  $(1-x)Ba_{0.95}Pb_{0.05}TiO_3+xCo_2O_3$  (x=0.3 and x=1 wt.%) ferroelectric ceramics was studied in the temperature range, including the temperature of the ferroelectric phase transition in strong sinusoidal fields.

Ferroelectric samples with a diameter of 15 mm and a thickness of 0.5 mm were fabricated using solid-phase synthesis technology

The study of the dielectric properties was carried out using polarization loops using a modified Sawyer-Tower scheme. Figure illustrates a family of polarization loops obtained at room temperature at a frequency of 10 Hz. It has been found that at room temperature without prolonged exposure to an external field, such a feature as double polarization loops occurs. This indicates the presence of an internal field, which is due to the defective structure of the ferroelectric ceramics [1].

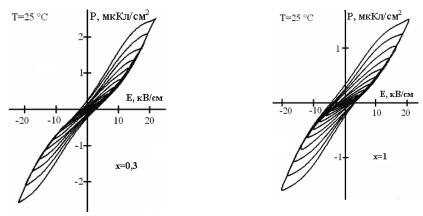


Figure. Polarization loops of ferroelectric ceramics (1-x)Ba<sub>0.95</sub>Pb<sub>0.05</sub>TiO<sub>3</sub>+xCo<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

#### References

1. Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials / M.E. Lines, and A.M. Glass / Clarendon Press,. Oxford, 1977-525 p.

#### РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ ФЛЕКСОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ-ПЕРОВСКИТАХ

В.Г. Залесский<sup>1</sup>, Е.Д. Обозова<sup>2</sup>, К.В. Дьяконов<sup>3</sup>, А.В. Халипов<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, nsh@mail.ioffe.ru,

<sup>2</sup>Научный сотрудник, oed1990@gmail.com,

<sup>3</sup>Старший научный сотрудник, k.dyakonov@mail.ioffe.ru,

<sup>4</sup>Лаборант, студент, antonhalipov@yandex.ru,

ФГБУН Физико-Технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН,194021, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия

В работе рассмотрены релаксационные явления, которые оказывают влияние на флексоэлектрический эффект в тонких пластинках сегнетоэлектриков  $SrTiO_3$ ,  $KTaO_3$  и  $BaTiO_3$ . Ключевые слова. Флексоэлектрический эффект, сегнетоэлектрики, диэлектрическая релаксация.

Флексоэлектрический эффект, определяемый взаимной связью между градиентом деформации и диэлектрической поляризацией, наиболее ярко проявляется в диэлектрических и полупроводниковых кристаллах и пленках микронного и наноскопического масштаба [1,2]. В настоящее время перспектива практического использования этого эффекта в таких областях, как интегральная электроника, микроэлектромеханические системы (МЭМС), стрейнтроника мотивирует теоретические и экспериментальные исследования.

Для описания связи между поляризацией и градиентом деформации используют флексоэлектрические коэффициенты, тензоры четвертого ранга, теоретические оценки и экспериментальное измерение которых является одной из главных задач при изучении явления [1]. Для многих известных активных диэлектриков были проведены расчеты тензоров и, в большинстве случаев, между рассчитанными и измеренными величинами наблюдается расхождение вплоть до нескольких порядков [2]. Кроме того, значительное расхождение существует и в экспериментально измеренных величинах тензоров. Причиной такого расхождения может быть наличие релаксационных явлений. Подтверждением наблюдение ЭТОГО также является гистерезиса флексоэлектрического отклика "несегнетоэлектрической" природы.

В реальных кристаллах влияние на флексоэлектрический отклик могут оказать следующие релаксационные явления: 1) Диэлектрическая релаксация, диэлектрической восприимчивостью. Флексоэлектрический связанная коэффициент μ прямо пропорционален диэлектрической восприимчивости γ и тензору флексоэлектрического взаимодействия,  $\mu_{klij} = \chi_{is} f_{klsj}$ , поэтому этот быть существенным. Прямая вил релаксации должен зависимость флексоэлектрического коэффициента от диэлектрической восприимчивости также означает, что флексоэлектрический отклик наиболее ярко проявляется в материалах с высокими диэлектрическими восприимчивостями, например, в сегнетоэлектриках. 2) Релаксация поляризации за счет транспорта и перераспределения носителей заряда (электронов, ионов или кислородных вакансий) в объеме кристалла [3]. 3) Релаксация, связанная с механической пластичностью кристаллов.

В работе представлены результаты исследования интерферометрическим методом прямого и обратного флексоэлектрического эффекта в тонких монокристаллических пластинах сегнетоэлектриков в кубической фазе  $SrTiO_3$  и  $KTaO_3$  и в керамике  $BaTiO_3$ .

Эксперимент проводился в следующих условиях: 1. При измерении прямого эффекта использовалась деформация только сферического изгиба пластин, что упрощает сравнение полученных данных с результатами исследования деформации того же типа при обратном эффекте. 2. Измерялся отклик на воздействие квазистатических механических и электрических полей в случае прямого и обратного эффекта, соответственно. В эксперименте по прямому эффекту применялись градиенты деформации 0 -  $0.2 \, \mathrm{m}^{-1}$ , а по обратному – однородные поля 0 –  $50 \, \mathrm{kB/cm}$  в тонких  $\sim \! 150 \, \mathrm{m}$  мкм пластинах. В работе также измерялась релаксация неоднородной деформации тонких пластин на квазистатическую неоднородную механическую нагрузку.

В результате выявлена релаксация флексоэлектрического отклика за счет транспорта свободных носителей заряда и захвата их кислородными вакансиями, а также релаксация за счет пластичности образцов. Измерены характерные времена релаксациикаждого из этих процессов. По полученным данным также произведены оценки эффективных поперечных флексоэлектрических тензоров.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (тема FFUG-2024-0042).

- 1. Tagantsev A.K. Flexoelectricity in solids: From Theory to Application / A.K. Tagantsev, P.V. Yudin // World Scientific Publishing Co., 2017. 396 p.
- 2. Zubko P. Flexoelectric Effect in Solids /P. Zubko, G.Catalan and A.K. Tagantsev// Annual Review of Materials Research. 2013. V. 43. P. 387-421.
- 3. Morozovska A.N. Nanoscale electromechanics of paraelectric materials with mobile charges: Size effects and nonlinearity of electromechanical response of  $SrTiO_3$  films / A.N. Morozovska, E.A. Eliseev, G.S. Svechnikov, S.V. Kalinin // Physical Review B. -2011.-V.84.-P.045402.

#### ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ДИСПЕРСИЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ

О.В. Малышкина<sup>1</sup>, О.С. Гусева<sup>2</sup>, Н.Е. Малышева<sup>3</sup>, Ф.О. Денисов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Тверской государственный университет. г. Тверь, Россия

<sup>2</sup>Тверской государственный медицинский университет, г. Тверь, Россия

<sup>3</sup> Военная академия воздушно-космической обороны имени Маршала Советского Союза Г.К. Жукова, г. Тверь, Россия

Olga.Malyshkina@mail.ru

В работе представлены результаты исследования влияния температуры повторного синтеза керамики титаната бария на дисперсию диэлектрической проницаемости в широком температурном интервале, включающем температуру сегнетоэлектрического фазового перехода. Установлено, что поведение диэлектрической проницаемости в области сегнетоэлектрического фазового перехода у керамики титаната бария зависит от размера зерен. Высказано предположение, что существование резонансной дисперсии возможно только в отсутствии у образцов спонтанного дипольного момента.

Ключевые слова: пьезоэлектрическая керамика титаната бария, дисперсия комплексной диэлектрической проницаемости, релаксационные процессы, резонансная поляризация.

Твердофазный синтез керамики BaTiO<sub>3</sub>, исследуемой в работе, осуществлялся при 1350°C, повторное спекание образцов — при температурах 1150, 1250 и 1350 °C. Проведенные ранее [1] измерения пьезомодулей, спонтанной поляризации и пироэлектрического коэффициента, показали, что, несмотря на то, что образцы керамики титаната бария, синтезированные при температуре 1350°C уже обладают сегнетоэлектрическими свойствами, у образцов, повторно спеченных при температуре 1150°C, сегнетоэлектрические свойства практически отсутствуют.

Анализа гистограмм распределения зерен по размеру, проведенный по изображениям, полученным на растровом электронном микроскопе JEOL 6510LV (рис. 1, слева), показал, что размер зерен у образцов, спеченных при температуре 1150С значительно меньше, чем у двух других. Таким образом, к сегнетоэлектрическим керамическим материалам, по всей видимости, справедлива теория минимального зародыша сегнетоэлектрической фазы, согласно которой возникновение сегнетоэлектрических свойств в образцах (применительно к керамике — в зернах) меньше определенного размера затруднено.

Исследования дисперсионных зависимостей образцов, спеченных при разных температурах (рис. 1, справа), в широком температурном интервале, включающем точку Кюри, также продемонстрировали существенные различия хода частотных зависимостей у образца, спеченного при 1150 °C и образцов, спеченных при 1250 и 1350°C.

Мелкий размер зерен (также можно допустить, что, в данном случае, важную роль играет отсутствие спонтанного дипольного момента) приводит к существованию у образцов, спеченных при 1150°C резонансной дисперсии в

области частот 6-20 МГц во всем исследуемом температурном интервале. Тогда как у образцов, спеченных при 1250 и 1350°C, аномальный минимум на частотной зависимости диэлектрической проницаемости, свидетельствующий о присутствии в образце резонансной дисперсии, наблюдается только при температурах в области сегнетоэлектрического фазового перехода. В точке Кюри у этих образцов также имеет место изменение времен релаксации, о чем свидетельствует резкое смещение частоты спада диэлектрической проницаемости.

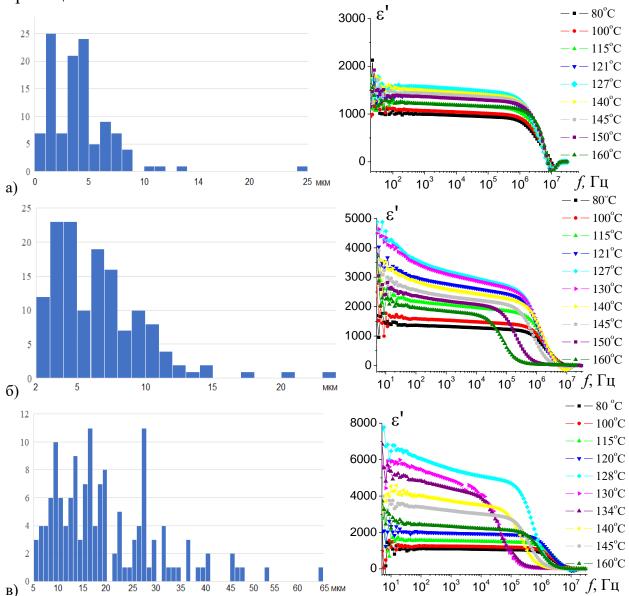


Рисунок. Гистограммы распределения зерен по размерам (слева) и частотные зависимости диэлектрической проницаемости (справа) керамики титаната бария. Температура спекания 1150 (а) 1250 (б) и 1350 (в) °C.

1. Malyshkina O.V. Effect of sintering temperature on dielectric properties of barium titanate ceramics and composite/ O.V. Malyshkina, G.S. Shishkov, A.A. Martyanov, A.I. Ivanova // Modern Electronic Materials. – 2020. – Т. 6. – Вып. 4. – С. 141-146.

# ВКЛАД ПРОВОДИМОСТИ В ДИСПЕРСИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ НИОБАТА НАТРИЯ

Н.Е. Малышева<sup>2</sup>, О.В. Малышкина<sup>1</sup>, Д.В. Мамаев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Тверской государственный университет. г. Тверь, Россия

<sup>2</sup> Военная академия воздушно-космической обороны имени Маршала Советского Союза Г.К. Жукова, г. Тверь, Россия

mne.70@mail.ru

В работе представлены результаты сравнительных исследований влияния пор на диэлектрические свойства керамики ниобата натрия-калия и ниобата натрия-лития. Установлено, что наличие пор, во-первых, приводит к появлению нелинейной области на температурной зависимости проводимости в диапазоне температур 250 – 300 °C, что не связано со структурным фазовым переходом, и объясняется присутствием на внутренней полости пор остатков стирола. Во-вторых, у пористых образцов уменьшается вклад резонансной составляющей поляризации в суммарный диэлектрический отклик.

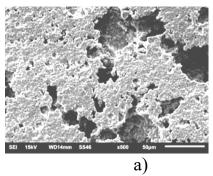
Ключевые слова: пьезоэлектрическая керамика, пористая керамика, дисперсия комплексной диэлектрической проницаемости, релаксационные процессы, резонансная поляризация, проводимость.

Пьезоэлектрическая керамика на основе ниобата натрия, является одной из возможных замен керамике ЦТС. Актуальность исследования пористой керамики заключается в возможности ее использования в качестве источника ультразвуковых волн для осуществления связи в подводных лодках. Важной характеристикой пьезоэлектрических преобразователей является коэффициент передачи. Он тем лучше, чем ближе плотность этого преобразователя к плотности среды – морской воды.

В настоящей работе рассмотрено влияние пор на диэлектрические свойства пористой керамики ниобата натрия-лития (LNN) и ниобата натрия-калия (KNN). Образцы были изготовлены методом твердофазного синтеза. Для получения пор использовался мелкодисперсный полистирол, имеющий размер гранул  $\sim 2~\mu m$ , что предполагает получение пор малого размера. Исследовались образцы с 10~u 40 объемных % пор.

Исследования структуры проводились на растровом электронном микроскопе JEOL 6510LV (рис. 1). Выявлено, что размер и распределение пор не зависит от химического состава образца керамики. Это позволило провести сравнительный анализ влияния пор на дисперсионные зависимости проводимости и диэлектрической проницаемости.

Исследования комплексной диэлектрической проницаемости проводились в широком температурном интервале: от комнатной температуры ( $\sim$ 25°C) до 500°C. Диэлектрические спектры снимались с использованием фазочувствительного измерителя иммитанса Вектор-175 в режиме непрерывного нагрева образца со скоростью не более 1 градуса в минуту. Данная скорость позволяла записывать спектры в диапазоне 1 Hz – 30 MHz за время, не превышающее нагрев образца на один градус.



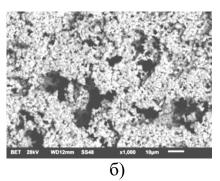
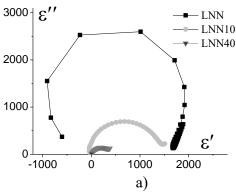


Рис.1. РЭМ изображения образцов LNN (а) и KNN (б) с 40 % содержанием пор.

По результатам измерений были построены диаграммы дисперсии диэлектрической проницаемости  $\varepsilon''(\varepsilon')$  (рис. 2) и зависимости проводимости от обратной температуры (рис. 3). На графике, для удобства анализа, представлена температура (в °C), соответствующая значениям 1/T (в 1/K).



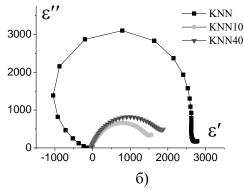
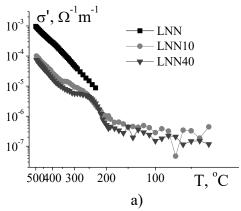


Рис. 2. Диаграммы дисперсии диэлектрической проницаемости образцов LNN (а) и KNN (б) с 0, 10, 40 % содержанием пор ( $T_{\text{изм}} = 420 \, ^{\circ}\text{C}$ ).



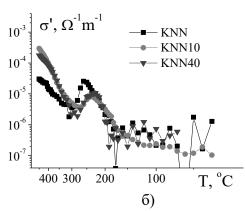


Рис. 3. Графики зависимости проводимости от обратной температуры образцов LNN (а) и KNN (б) с 0, 10, 40 % содержанием пор.

В диапазоне температур 250 - 300 °C на зависимости проводимости от обратной температуры выявлена нелинейная область, существующая у обоих составов керамик. Этот температурный диапазон не связан с температурой структурного фазового перехода образцов, что позволяет связать это явление с материалом порообразователя (предположительно часть паров стирола остаются во внутренней поверхности пор, не испаряясь в процессе спекания образцов).

## ВКЛАД ПРОВОДИМОСТИ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК (МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ)

О.В. Малышкина<sup>1</sup>, Н.Е. Малышева<sup>2</sup>, Е.В. Дьякова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Тверской государственный университет. г. Тверь, Россия

<sup>2</sup> Военная академия воздушно-космической обороны имени Маршала Советского Союза Г.К. Жукова, г. Тверь, Россия

Olga.Malyshkina@mail.ru

В работе представлены результаты математического моделирования диэлектрического отклика сегнетоэлектрических керамик, проведено сравнение с экспериментально наблюдаемым. Установлено, что наблюдаемый в эксперименте отклик диэлектрика на воздействие внешнего переменного поля, по сути, состоит из двух неразделимых в эксперименте частей — собственно диэлектрического отклика системы и проводимости. Выделено два разных типа проводимости — низкочастотная, вклад которой приводит к резкому росту диэлектрической проницаемости в области низких частот, и релаксационная, обусловленная резонансной поляризацией. В математической модели в качестве источника резонансных процессов предполагается присутствия в керамическом материале затухающего осциллятора.

Ключевые слова: пьезоэлектрическая керамика, дисперсия комплексной диэлектрической проницаемости, релаксационные процессы, резонансная поляризация.

Диэлектрический отклик системы на внешнее воздействие, под которым в первую очередь понимают переменное электрической поле, зависит как от макроскопических параметров, так и от внутренней микроструктуры материала. В случае сегнетоэлектрической керамики это в первую очередь границы зерен, и различные внутренние дефекты, возникающие либо случайным образом в процессе спекания образцов, либо вводимые намерено — например, поры, модифицирующие добавки. Наличие внутренних микро- и нано- структурных дефектов приводит в ряде случаев к аномальному поведению диэлектрического отклика, не вписывающегося в классическое описание диэлектрических спектров.

Математическое описание дисперсионных зависимостей диэлектрической проницаемости и проводимости в переменном электрическом поле предполагает оперирование комплексными величинами. Мнимые части при этом не являются математическими абстракциями, а имею реальную физическую интерпретацию.

При учете вклада в диэлектрический отклик проводимости, используется связь между комплексной проводимостью  $(\sigma^*(\omega))$  и комплексной диэлектрической проницаемостью  $(\varepsilon^*(\omega))$ , которая, согласно [1] имеет вид

$$\sigma^*(\omega) = i\varepsilon^*(\omega)\varepsilon_o\omega = (\varepsilon''(\omega) + i\varepsilon'(\omega))\varepsilon_o\omega, \tag{1}$$

где  $\omega = 2\pi f$  — циклическая частота, f — частота электрического поля,  $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  F/m — диэлектрическая постоянная.

Для расчета диэлектрического спектра использовано уравнение,

учитывающее существование N релаксационных процессов, описываемых эмпирическим уравнением теории Гаврильяка—Негами (первое слагаемое), эффектов затухания (второе слагаемое) и вклада комплексной проводимости (третье и четвертое слагаемые):

$$\varepsilon^{*}(\omega) = \varepsilon(\infty) + \sum_{n=1}^{N} \frac{\varepsilon_{n}(0) - \varepsilon_{n}(\infty)}{\left(1 + \left(i\omega\tau_{n}\right)^{1-\lambda_{n}}\right)^{\gamma}} + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{o}}\right)^{2} + i\Gamma\frac{\omega}{\omega_{o}}} - \frac{1}{\varepsilon_{o}} \tau_{\sigma}\sigma_{\infty} \frac{1 - i\omega\tau_{\sigma}}{1 + \left(\omega\tau_{\sigma}\right)^{2}} + \frac{1}{\varepsilon_{o}} iB\omega^{s-1}. \tag{2}$$

Здесь  $\varepsilon(\infty)$  – диэлектрическая проницаемость соответствующая бесконечной частоте,  $\Gamma$  – параметр затухания,  $\sigma_{\infty}$  – проводимость на бесконечной частоте,  $\tau_{\sigma} = 1/\omega_{o}$  – время релаксации тока проводимости,  $\omega_{o}$  – частота резонансной поляризации (определяется по максимуму на частотной действительной части комплексной проводимости). Эта частота соответствует максимуму на частотной зависимости действительной части комплексной проводимости.  $\tau_n$ , где n=1, 2, ..., N – времена релаксации различных релаксационных процессов. Соответственно,  $\lambda_n = 2\psi / \pi$  — ширина спектра времен релаксации каждого из процессов, у - угол раствора дуги диаграммы  $\varepsilon''(\varepsilon')$ ,  $\varepsilon_n(0)$  и  $\varepsilon_n(\infty)$  — есть максимальная и минимальная диэлектрическая проницаемость для каждого процесса, причем:  $\varepsilon_{n+1}(0) = \varepsilon_n(\infty)$ , а  $\varepsilon_n(\infty) = \varepsilon_N(\infty)$ (подробно их определение из экспериментальных зависимостей см. [2]). В случае, когда поведение диэлектрического отклика описывается эмпирическим законом Дебая, отвечающим за вклад в диэлектрический отклик упорядоченной подсистемы,  $\lambda = 0$ . Когда вклад в диэлектрический отклик характеризуется неупорядоченной подсистемой (соответствует эмпирическому закону Коула-Коула или Гаврильяка—Негами), то  $\lambda \neq 0$ . В последнем слагаемом B —постоянная, составляющую определяющая частотно независимую проводимости, s – параметр, характеризующий угол наклона прямолинейных участков на частотной зависимости действительной части комплексной проводимости в логарифмическом масштабе [1].

Если четвертое слагаемое характеризует вклад в диэлектрический отклик процессов низкочастотной проводимости, то третье слагаемое характеризует релаксационную проводимость, имеющую место на более высоких частотах.

В эксперименте диэлектрические спектры снимались с использованием фазочувствительного измерителя иммитанса Вектор-175. Текстовые файлы частотных зависимостей, записанные на Вектор-175, содержат полную информацию по комплексному сопротивлению, проводимости и ёмкости, что позволяет проводить анализ температурных и дисперсионных зависимостей комплексных диэлектрических характеристик. Для апробации методики использовались результаты исследований диэлектрических спектров керамик ниобата лития-натрия и ниобата калия-натрия. Необходимые для расчета параметры находились из экспериментальных данных по методике, подробно рассмотренной нами в работах [2] и [3].

Полное соответствие рассчитанного диэлектрического отклика экспериментальному (рис. 1a), удалось получить только при учете вклада обоих типов проводимости (низкочастотной и релаксационной).

Минимум, наблюдаемый в эксперименте на частотной зависимости действительной проницаемости, выше 1 МГц, и уходящий при высоких температурах в отрицательные значения соответствует окружностям на диаграммах дисперсии (рис. 1б). Его воспроизведение в математической модели возможно только при одновременном учете второго (характеризует наличие в диэлектрической среде затухающих осцилляторов) и третьего (релаксационная проводимость) слагаемых уравнения (2).

Таким образом, можно предположить, что релаксационной проводимость является следствием инерционности затухающего осциллятора, а в эксперименте это проявляется как резонансный диэлектрический отклик с отрицательным значением ёмкости

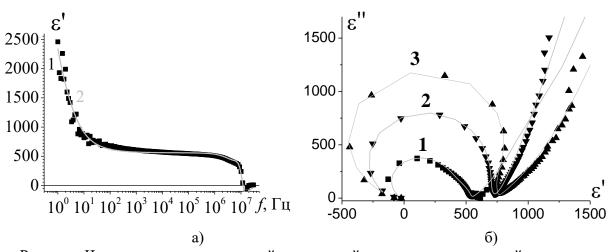


Рисунок. Частотные зависимости действительной части диэлектрической проницаемости образца ниобата натрия-лития (а) и диаграммы дисперсии диэлектрической проницаемости образца керамики ниобата натрия-калия при разных температурах (кривая  $1-150^{\circ}\text{C}, 2-250^{\circ}\text{C}, 3-350^{\circ}\text{C}$ ).

Символы – эксперимент, сплошные линии – результат моделирования.

- 1. Jonscher A.K. Universal relaxation law: a sequel to Dielectric relaxation in solids./ A.K. Jonscher Chelsea Dielectrics Press Limited, London, 1996. –415 p.
- 2. Малышкина О.В. Причины отрицательного диэлектрического отклика в частотном диапазоне 0.5-20 MHz: моделирование и эксперимент (на примере керамики ниобата натрия) / О.В. Малышкина, Н.Е. Малышева, Е.В. Дьякова, М. Али // Физика твердого тела 2024.-T.66.- Вып. 8.- С. 1384-1390.
- 3. Малышева Н.Е. Моделирование диэлектрического отклика пьезоэлектрической керамики / Н.Е. Малышева, Е.В. Дьякова, О.В. Малышкина // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов 2023. Вып. 15. С. 481-494.

#### ИЕРАРХИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЖИДКОЙ ВОДЕ

С.В. Чучупал<sup>1</sup>, А.А. Волков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научный сотрудник, MirrorMan@yandex.ru

<sup>2</sup>Главный научный сотрудник, aavol@bk.ru

ФГБУН Федеральный исследовательский центр

«Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

Обсуждается проблема молекулярного устройства жидкой воды. Выполнены мириады исследований, но тема остаётся дискуссионной. В работе предлагается механизм молекулярной динамики, отвечающий экспериментальным данным по рассеянию рентгеновских лучей, диэлектрической спектроскопии и термодинамике.

Ключевые слова: диэлектрические спектры, релаксационные процессы, структура жидкой воды, моделирование.

Дифракционные исследования жидкой воды относятся к числу первых рентгеновских экспериментов, выполненных Рентгеном [1]. Структурная тема спустя 40 лет получила продолжение в теоретических разработках Бернала и Фаулера [2]. Далее исследование молекулярного устройства жидкой воды мощное самостоятельное направление с привлечением разнообразных экспериментальных и теоретических методов: рассеяния света и диэлектрической спектроскопии, МД-моделирования, нейтронов, теоретического анализа [3]. Но, несмотря на значительные усилия, достигнутые результаты противоречивы и в общую картину не укладываются. Жизненно важное химически простое вещество — вода — до сих пор остаётся «the most anomalous liquid» [4]. Проблема представляется фундаментальной [5]. В работах [6,7] мы разрабатываем подход, альтернативный принятому (основанному на представлении о существовании водородных связей [4]), — динамическую модель ионной диффузии с кулоновским взаимодействием (ион-молекулярную модель).

С учётом ступенчатого вида экспериментально наблюдаемых спектров, показанных на рис. 1, взамен принятой картины разрушения/восстановления сетки водородных связей, показанной на рис. 2а, мы предлагаем для рассмотрения модель, представленную на рис. 2б. Ответственными за структурные особенности спектров на рис. 1 предполагаются диффузионные процессы, отмеченные на рис. 2б стрелками. Показаны последовательные стадии перемещения эстафетно передающегося заряда: за единичным О-О переходом протона (наделяющим молекулу  $H_2O$  дополнительным протоном и, соответственно, зарядом) с задержкой релаксирует 1) гидратная оболочка и 2) ионное облако. Большой стрелкой 3 представлена проводимость по постоянному току (dc). Релаксации в разных временных масштабах (в иерархической последовательности) позволяют единообразно и непротиворечиво передать большой набор свойств жидкой воды: электродинамических, тепловых и транспортных [5,8].

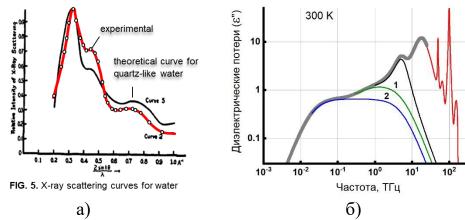


Рисунок 1. Рентгеновская дифрактограмма (a) [2] и спектрограмма диэлектрических потерь (б) (цифры 1 и 2 соответствуют процессам релаксации на рис. 2б) [6] жидкой воды

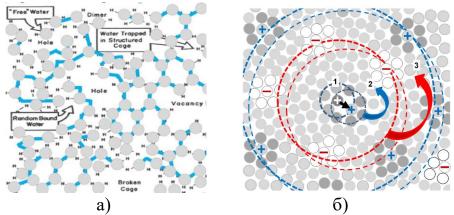


Рисунок 2. Современное представление о структуре жидкой воды как сетке водородных связей (а) и альтернативная, предлагаемая нами (б), — динамическая ион-молекулярная структура с эстафетной передачей заряда [5]

- 1. Röntgen W.C. Ueber die constitution des flüssigen wassers // Annalen Der Physik Und Chemie. 1892. Т. 281. Вып. 1. С. 91-97.
- 2. Bernal J.D. A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions / J.D. Bernal, R.H. Fowler // The Journal of Chemical Physics.  $-1933.-T.\ 1.-$  Вып. 8.- С. 515-548.
- 3. Эйзенберг Д. Структура и свойства воды. Пер. с англ. / Д. Эйзенберг, В. Кауцман. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 280 с.
- 4. Pettersson L.G.M. Water—the most anomalous liquid / L.G.M. Pettersson, R.H. Henchman, A. Nilsson // Chemical Reviews. 2016. Т. 116. Вып. 13. С. 7459-7462.
- 5. Васин А.А. Положение дел в понимании свойств жидкой воды: возможная альтернатива / А.А. Васин, А.А. Волков // Биофизика. 2020. Т. 66. Вып. 5. С. 837-844.
- 6. Volkov A.A. Dielectric spectra of liquid water: Ultrabroadband modeling and interpretation / A.A. Volkov, S.V. Chuchupal // Journal of Molecular Liquids. 2022. T. 365. C. 120044.
- 7. Волков А.А. Модификация уравнения Ван-дер-Ваальса для описания термодинамических свойств жидкой воды / А.А. Волков, С.В. Чучупал // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2025. Т. 89. Вып. 1. С. 122-128.
- 8. Васин А.А. Модельная среда с тепловыми и транспортными свойствами жидкой воды / А.А. Васин, А.А. Волков // Журнал технической физики. 2020. Т. 90. Вып. 9. С. 1470-1474.

## МЕТОДЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОЛИМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ПОЛИАЦЕНХИНОНОВ

Л.В. Мухаева<sup>1</sup>, Н.В. Афанасьев <sup>2</sup>, Д.В. Мухаева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>доцент кафедры электроснабжения и электротехники, mukhaeva57@mail.ru

<sup>2</sup> профессор кафедры электроснабжения и электротехники

ФГБОУ ВО «Иркутский национальный исследовательский технический университет»,

<sup>3</sup>заведующая аспирантурой ФГБУН «Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук», din vas@mail.ru

Предложены методы анализа диэлектрических спектров полимерных полупроводников полиаценхинонов. Показан оптимальный порядок применения этих методов. Определены параметры диэлектрических спектров. Эти исследования имеют важное значение для изучения внутримолекулярного переноса заряда в полимерных материалах и молекулярной электроники.

Ключевые слова: полимерный полупроводник, диэлектрическая проницаемость, коэффициент потерь, область дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости, электропроводность, механизмы поляризации.

Для математического описания диэлектрических спектров полиаценхинонов — полимерных полупроводников класса semiconductors-dielectrics (семиэлектриков) — в работе предложено обобщенное уравнение Дебая [1, 2]. Уникальные диэлектрические свойства этих материалов обусловлены новым электронным эффектом — постулированной локальной проводимостью макромолекул [10].

Исследуемые полиаценхиноны представляют собой сопряженные синтезированные путем циклополиконденсации пирена полимеры, Ранее пиромеллитовым диангидридом В среде хлорида цинка. ИΧ диэлектрические характеристики изучались зарубежными исследователями [3-5] с использованием традиционного (начертательного) метода диэлектрической спектроскопии.

Основная сложность в изучении поляризации таких систем связана с их высокой собственной электропроводностью, которая может доминировать над вкладом диэлектрических потерь.

Цель исследования заключалась в экспериментальной верификации методик анализа диэлектрических спектров семиэлектриков. Полученные результаты формируют эмпирическую основу для построения структурных моделей и выявления механизмов релаксационной поляризации в данном классе материалов.

Анализ диэлектрических спектров начинался с метода круговых диаграмм [6]. Круговые диаграммы следуют из обобщенного уравнения Дебая

$$\varepsilon^*(v) = \varepsilon'(v) - j\varepsilon''(v) = \varepsilon_{\infty}' + \frac{\varepsilon_{s}' - \varepsilon_{\infty}}{1 + (j 2\pi v \tau_{H})^{\alpha}}$$
(1)

Этот метод позволяет обнаружить сложную структуру спектра, например, с его помощью удалось найти 3 области дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости вместо одной, описанной ранее другими авторами [3-5].

Правильность построения круговых диаграмм осуществляется с помощью метода дисперсионных графиков [7]. Дополнительно метод вспомогательного максимума [8] и спектральных матриц [9].

При этом на первом этапе строится крупномасштабная круговая диаграмма, параметры которой отмечаются индексом «т», и условно относятся к теоретическим. Тем не менее эти параметры подлежат экспериментальной проверке разработанными методами.

На втором этапе сроятся входные дисперсионные графики, которые сравнивают с экспериментальными спектрами, параметры которых отмечаются индексом «э».

Погрешность измерений определяли путем сравнения теоретических и экспериментальных выходных дисперсионных графиков.

Развитие аналитической диэлектрической спектроскопии показывает хронологический порядок методов. С каждым методом увеличивается его трудоемкость, что связывается с усложнение метрологических ситуаций и сводится к постепенному признанию обобщенного уравнения Дебая в качестве адекватной феноменологической теории семиэлектриков.

- 1. Гейзенберг, В. Роль феноменологических теорий в системе теоретической физики // Успехи физических наук. 1967. Т. 91, вып. 4. С. 731-733.
- 2. Гинзбург, В.Л. О сверхпроводимости и сверхтекучести // УФН. 2004. Т. 174, № 11. С. 1240-1255.
- 3. Rosen, R. Some polymers of high dielectric constant / R. Rosen, H.A. Pohl // J. Polym. Sci.  $-1966. A-1. Vol.\ 4.\ No.\ 5. P.\ 1135 1149.$
- 4. Pohl, H.A. Nomadic polarization in quasi-one-dimensional solids / H.A. Pohl, M. Pollak // J. Chem. Phys. -1977. V. 66. No. 9. P. 4031-4049.
- 5. Pohl, H.A. Superdielectric polymers / H.A. Pohl // IEEE Transaction on electric insulation. 1986. V. EI-21. № 5. P. 683-692.
- 6. Афанасьев, Н.В. Исследование полиаценхинонов методом диэлектрической спектроскопии / Н.В. Афанасьев, Л.Н. Омельченко, Л.В. Мухаева, М.Г. Воронков, Т.Г. Ермакова [и др.] // Докл. Академии наук. − 1986. − Т. 289. − № 3. − С. 596-599. 7. Афанасьев, Н.В. Исследование явлений сильного поля в диэлектрической
- 7. Афанасьев, Н.В. Исследование явлений сильного поля в диэлектрической спектроскопии полимерных полупроводников /Н.В. Афанасьев, Л.В. Мухаева, М.Г. Воронков, Т.И. Вакульская [и др.] // Докл. Академии наук. − 1991. − Т. 319. − № 4. − С. 858-861.
- 8. Афанасьев, Н.В. Зависимость между параметрами диэлектрических спектров полимерных полупроводников / Н.В. Афанасьев, Л.В. Мухаева, М.Г. Воронков, Т.Г. Ермакова // Докл. Академии наук. 1994. T.336. N 2. C. 179-182.
- 9. Мухаева, Л.В. Электропроводность макромолекул полимерных полупроводников / Л.В. Мухаева, Н.В. Афанасьев, Д.В. Мухаева, М.Г. Воронков // Докл. Академии наук -2014. Т. 456. № 5. С. 541-544.
- 10. Мухаева, Л.В. Параметры диэлектрических спектров полимерных полупроводников полиаценхинонов и их зависимость от длительности процесса поликонденсации: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.07 / Мухаева Лариса Васильевна; Бурят. гос. ун-т. Улан-Удэ, 2011. 22 с.

## ELECTROMECHANICAL HYSTERESIS AND RELAXATION PROCESSES IN RELAXOR PIEZOCERAMICS UNDER HIGH ELECTRIC FIELDS

A.N. Reznichenko¹, M.A. Lugovaya², E.I. Petrova³, D.I. Makaryev⁴

¹Researcher, reznichenkoan@yahoo.com

²Researcher, maria.a.lugovaya@gmail.com

³Researcher, harigamypeople@gmail.com

⁴Senior Researcher, dmakarev@rambler.ru

Southern Federal University, 344090 Rostov-on-Don, Russia

This study focuses on the electromechanical hysteresis and relaxation phenomena in PZT-based relaxor piezoceramics. Hysteresis loops of electric displacement (D-E) and mechanical strain (S-E) were recorded under bipolar AC electric fields in the frequency range of 0.001–5 Hz. Measurements were carried out using the Electromechanical Response Characterization System (STEPHV) along with the STEP software, which enables large-signal modeling of the electromechanical behavior of ferroelectric materials under high electric fields. The results indicate a strong dependence of the coercive field, remnant and saturation polarization, hysteresis loop area, and relative strain on the applied field frequency. Based on these measurements, a comprehensive set of parameters characterizing the switching dynamics and hysteresis behavior in relaxor piezoceramics was obtained.

Keywords: relaxor piezoceramics, ferroelectric hysteresis, electric displacement, mechanical strain, domain walls, switching processes, hysteresis loops.

Relaxor ferroelectrics are a special class of functional materials that exhibit unique dielectric, piezoelectric, and ferroelectric properties compared to classical ferroelectrics. These materials have attracted growing interest due to their potential applications in modern electronic devices and energy storage systems [1]. One of the defining features of relaxor ferroelectrics is the shape of their ferroelectric hysteresis loops, typically slim or constricted, caused by the presence of randomly oriented nanoscale polar regions. This characteristic leads to low coercive fields, relatively high saturation polarization, and reduced remnant polarization, resulting in high energy density and fast discharge rates [2]. While relaxor ferroelectrics, like conventional ferroelectrics, possess spontaneous polarization in domains, the domain sizes are significantly smaller, typically in the nanometer range rather than micrometer scale. This feature allows for easier reorientation under an external field and requires less energy for polarization switching. Such properties make relaxors promising candidates for use in high-performance capacitors, energy storage systems, and memory devices [2].

In this work, we investigate the switching dynamics and relaxation mechanisms in  $Pb_{0.96}Sr_{0.04}Zr_{0.42}Ti_{0.435}W_{0.052}Mg_{0.052}Sb_{0.0426}Li_{0.0142}O_3$  relaxor piezoceramics under high-amplitude bipolar AC electric fields. The samples were fabricated using a large-block hot-pressing technique. In the depolarized state, the material exhibits relaxor behavior, whereas after poling, it demonstrates classical ferroelectric characteristics. Microstructural analysis was performed on fractured surfaces of the samples using a JEOL JSM-6390LA scanning electron microscope. The domain structure of etched surfaces was visualized via direct palladium-carbon replication methods.

Measurements of D-E and S-E hysteresis loops (see Fig.) were conducted over an electric field range of 0–5 kV/mm and at frequencies between 0.001 and 5 Hz using the STEPHV system and STEP software [3]. These tools allow for real-time tracking and modeling of nonlinear electromechanical responses under high electric fields. To assess the influence of frequency on polarization switching, we analyzed the evolution of hysteresis loop parameters as a function of excitation frequency.

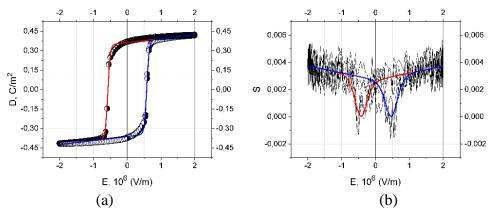


Fig. The electric displacement (D-E) (a) and mechanical strain (S-E) (b) hysteresis loops measured at a frequency of 0.001 Hz for the unpolarized relaxor piezoceramic samples

The STEP analysis revealed a significant frequency dependence of key hysteresis parameters such as coercive field  $E_C$ , remnant polarization  $D_r$ , saturation polarization  $D_s$ , and relative strain S. These dependencies can be attributed to the specific nanostructured domain configuration of the relaxor material. In particular, the coercive field  $E_C$  shows nearly linear growth with increasing frequency, a phenomenon previously observed in single crystals, bulk ceramics, and thin films. It is commonly associated with the kinetics of domain nucleation and switching processes for both  $180^\circ$  and non- $180^\circ$  domain walls. The decrease in remnant  $D_r$ , saturation  $D_s$  displacements, and strain S with increasing frequency suggests that polarization switching becomes progressively less complete and more difficult. The anomalous drop in these parameters at ultra-low frequency (0.001 Hz) may be explained by the influence of space charge carriers, which partially screen the applied electric field and pin domain walls, thereby hindering their motion.

The work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation [State assignment in the field of scientific activity, SFU, 2023, Project No. FENW-2023-0010/(GZ0110/23-11-IF)].

#### References:

- 1. Relaxor Ferroelectric Oxides: Concept to Applications / L.K. Pradhan, M. Kar // Multifunctional Ferroelectric Materials / D.R. Sahu. Namibia: IntechOpen, 2021.
- 2. Brown E. Controlling Dielectric and Relaxor-Ferroelectric Properties for Energy Storage by Tuning Pb<sub>0.92</sub>La<sub>0.08</sub>Zr<sub>0.52</sub>Ti<sub>0.48</sub>O<sub>3</sub> Film Thickness / E. Brown, C. Ma, J. Acharya, B. Ma, J. Wu, J. Li // ACS Applied Materials & Interfaces. 2014. V. 6. No 24. P. 22417-22422.
- 3. Shvetsova N.A., Switching Processes and Ferroelectric Hysteresis in Dense and Porous Piezoceramics in the Lead Zirconate Titanate System / N. A. Shvetsova, I. A. Shvetsov, E. I. Petrova, P. A. Abramov, M. G. Konstantinova, A. N. Rybyanets // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2024. V. 88. No 5. P. 699-703.

УДК 537.226.4

# ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВЕРХРЕШЕТОК И МНОГОСЛОЕК С МАТЕРИАЛАМИ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА

А.С.Сидоркин $^1$ , Б.М.Даринский $^1$ , Л.П.Нестеренко $^1$ , Л.Н.Коротков $^2$ , А.В.Калгин $^{1,2}$ , Ү.Gagou $^3$ , P.Saint-Gregoire $^4$ 

<sup>1</sup>Voronezh State University, <sup>2</sup>Voronezh State Technical University, <sup>3</sup>Universite Jules Verne, Amiens, France, <sup>4</sup>University of Nimes, Nimes, France

В работе рассматриваются результаты экспериментальных исследований процессов переполяризации сегнетоэлектрических сверхрешеток и многослоек с индивидуальными слоями в виде различных структур титаната бария и моделируются указанные процессы.

Ключевые слова: сегнетоэлектрические сверхрешетки, трехслойные сегнетоэлектрические структуры, переполяризация сверхрешеток и многослоек.

С использованием модифицированной схемы Сойера – Тауэра и методики Мерца исследованы переполяризационные свойства сегнетоэлектрических сверхрешеток цирконата бария/титаната бария BaZrO<sub>3</sub>/BaTiO<sub>3</sub> на подложке из монокристаллического оксида MgO трехслойных магния сегнетоэлектрических решетках с титанатом бария или титанатом свинца в качестве центрального слоя, окруженного слоями титаната Исследования температурных изменений в петлях диэлектрического гистерезиса решеток со слоями из титаната бария показали достаточно плавное понижение спонтанной поляризации и коэрцитивного поля при приближении к температуре перехода рассматриваемых неполярную фазу для Экспериментальные исследования токов переключения показали, что процессы переключения в синтезированных сверхрешетках и многослойках с титанатом бария осуществляются в две стадии – активационного движения (режим «переползания») и безактивационного движения (режим скольжения). Наличие активационной стадии переключения и численные оценки показывают, что с высокой вероятностью процессы переключения рассматриваемой В сверхрешетке осуществляются путем движения доменных границ. Пороговое поле, разделяющее указанные стадии, уменьшается с ростом температуры при приближении к точке Кюри сверхрешетки аналогично коэрцитивному полю. Выявленный в работе неподчиняющийся для данных объектов строго экспоненциальной зависимости от напряженности поля активационный режим движения смоделирован зависимостью с критическим показателем для приложенного электрического поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ №24-12-20010.

# АНОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДИСПЕРСИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЕРОВСКИТОВОЙ КЕРАМИКЕ ТИТАНАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ: ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Г.С. Григорян<sup>1</sup>, В.Е. Фролова<sup>2</sup>, И.Г. Руднева<sup>3</sup>

<sup>1</sup> к.ф.-м.н, доцент, gri7287@yandex.ru

<sup>1,2</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»

<sup>2</sup> к.ф.-м.н, доцент

<sup>3</sup>к.ф.-м.н., преподаватель

ВГУИТ «Воронежский государственный университет инженерных технологий»

Методом импедансной спектроскопии исследованы твердые растворы перовскитовой керамики титаната бария-стронция. Снимки поверхности образца и данные по элементному составу получены с помощью сканирующего электронного микроскопа. Измерения проводились в диапазоне частот  $10^2-10^6$  Гц и температурном интервале от 75 до  $112\,^{\circ}\mathrm{C}$  с помощью RLC-метра Данные эксперимента представлены дисперсией диэлектрической проницаемости. На частотной зависимости действительной части диэлектрической проницаемости наблюдается локальный рост  $\epsilon$ , что выражается дисперсией резонансного типа, сопровождающаяся появлением в эксперименте отрицательной емкости. Интерпретация результатов проводится в рамках эмпирического закона Коула-Коула с учетом вклада в дисперсию диэлектрической проницаемости упругой поляризации.

Ключевые слова: импедансная спектроскопия, полупроводниковая керамика, эффект отрицательной емкости.

В данной работе исследовались образцы полупроводниковой керамики на основе твердого раствора  $Ba_{0,947}$   $Sr_{0,05}$   $Ce_{0,003}$   $TiO_3$  в форме цилиндров диаметром 10 мм и высотой 1 мм с планарной конфигурацией электродов. Образцы были получены по стандартной технологии для позисторов [1]. Для электрических измерений использовали RLC-метр Wayne Kerr 4270.

На рисунке изображена частотная зависимость действительной части комплексной диэлектрической проницаемости при различных температурах. В области высоких частот диэлектрическая проницаемость монотонно спадает, такой диэлектрический отклик для разупорядоченных систем, к которым относятся и твердые растворы описывается эмпирическим законом Коула-Коула [1]. Однако в диапазоне низких частот, наблюдается нетипичное поведение: с ростом частоты диэлектрическая проницаемость уменьшается, а затем увеличивается. Такое поведение может отражать эффект «отрицательной емкости». Данное явление с физической точки зрения подразумевает наличие резонансных процессов в диэлектрическом отклике. Аномальное поведение, которое не соответствует классическому описанию диэлектрических спектров, может быть вызвано наличием структурных дефектов.

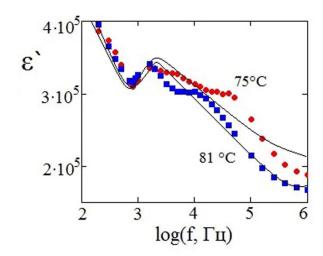


Рисунок. Дисперсия действительной части диэлектрической проницаемости. Сплошными линиями показаны расчетные кривые.

Эти процессы можно объяснить наличием потенциального барьера на границах зерен, который возникает за счет образования в полупроводниковой керамике неподвижного объемного заряда, аналогичного барьеру Шоттки, а также наличием глубоких ловушек различной природы для носителей заряда. Область исследуемых частот значительно ниже оптического диапазона. Тогда можно утверждать, что в резонанс вступают осциллирующие заряды, локализованные на различных дефектах.

Приводится математическое описание экспериментальных дисперсионных зависимостей диэлектрической проницаемости используя соотношение Коула-Коула и формулу Лорентца для дисперсии є при упругой поляризации [3]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \sum_{n=1}^{N} \frac{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_n(\infty)}{1 + (i\omega\tau_n)^{1-\lambda_n}} + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 + i\Gamma\frac{\omega}{\omega_0}}$$
(1)

где  $\epsilon$  (0) и  $\epsilon$  ( $\infty$ ) — величины диэлектрической проницаемости соответственно при более низкой и более высокой частоте по сравнению с частотой дисперсии, N — число релаксационных процессов с различными временами релаксации  $\tau_n$ ,  $\omega = 2\pi f$  — циклическая частота, а f — частота электрического поля,  $\omega_0$  — собственная частота осциллятора,  $\lambda$  — ширина спектра времен релаксации,  $\Gamma$  — относительное затухание.

- 1. Macklen E.D. Thermistors. Electrochem.; 1979. 208 p.
- 2. Cole K.S., Cole R.H. Dispersion and absorption in dielectric. 1. Alternating currents characteristics, The Journal of Chemical Physics, 1941, vol. 9, issue 4, pp. 341-351. DOI: 10.1063/1.1750906.
- 3. Поплавко Ю. М., Переверзева Л. П., Раевский И. П. Физика активных диэлектриков: учебное пособие / под ред. проф. Сахненко В. П. / Поплавко Ю. М., Переверзева Л. П., Раевский И. П. Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2009. 480 с.

УДК: 666.655, 666.3/.7

#### ЗАВИСИМОСТЬ СВОЙСТВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ ЦТС-21 ОТ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ИЗГОТОВЛЕНИЯ

М.А. Мараховский $^1$ , А.А. Панич $^2$   $^1$ Доцент, к.т.н., mmarahovsky@sfedu.ru  $^2$  Директор, д.т.н, rctt.rctt@mail.ru  $^2$  ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону, Россия

В работе исследована возможность корректировки свойств сегнетоэлектрической высокотемпературной керамики ЦТС-21 путем применения различных условий проведения твердофазного синтеза, методов и режимов измельчения порошков, а также условий спекания, без изменения химического состава. Установлены зависимости микроструктуры, механических и электрофизических свойств керамики от методов и технологических режимов спекания. В результате исследований обоснована целесообразность применения рассмотренных методов и режимов синтеза, измельчения, спекания для направленного изменения свойств сегнетоэлектрической керамики, а также снижения её себестоимости.

Ключевые слова: сегнетоэлектрическая керамика, синтез, спекание, методы измельчения.

Таким образом, свойства будущей сегнетоэлектрической керамики фиксированного состава зависят от целого комплекса технологических факторов, способных направленно воздействовать на процессы формирования структуры и керамического каркаса.

Эффективным способом изменения размеров частиц исходных порошков являются методы высокоэнергетического помола (планетарные и вибрационные мельницы). Размер частиц исходных порошков и степень их уплотнения влияют на качество массопереноса веществ в процессе твердофазного синтеза соединения. Размер частиц синтезированного материала также оказывает существенное влияние на процессы массопереноса веществ. Процесс формирования керамического каркаса также зависит от размеров, формы и уплотнения спекаемых частиц. Уплотнение частиц при спекании можно создать при помощи одноосного механического давления в установках горячего прессования и искрового плазменного спекания. Ранее авторами были получены положительные результаты использования таких методов [1 - 3].

Цель работы заключалась в исследовании влияния технологических параметров изготовления на функциональные характеристики сегнетоэлектрической керамики предназначенной для работы в условиях повышенных температур. Модельным объектом исследования был выбран коммерческий керамический материал ЦТС-21 на основе системы цирконаттитаната свинца, характеризующийся повышенной стойкостью к температурным воздействиям, а также устойчивостью к механическим напряжениям.

Синтез шихты сегнетоэлектрического материала ЦТС-21 проводился при фиксированной температуре, но при различных условиях: насыпным способом;

с вибрационным уплотнением порошка шихты; формованием порошка в брикет. Полнота прохождения синтеза оценивалась по результатам рентгенофазового анализа. Измельчение порошков материала проводилось планетарной шаровой мельницы Fritsch Pulverisette 6, вибромельницы Fritsch Pulverisette 0 и барабанной мельницы. Интенсивность помола для каждого метода была фиксированная, а продолжительность варьировалась. Результаты оценивались на лазерном анализаторе Fritsch помола частиц Analysette 22 NanoTec. Спекание заготовок из материала ЦТС-21 проводилось в печи Nabertherm HT16/16 и установке горячего прессования УССК-1 в диапазоне температур 1190 - 1230 °C с фиксированной изотермической выдержке. Плотность керамики определялось методом гидростатического взвешивания в дистиллированной воде. Качественный анализ полученных керамических элементов ЦТС-21 проводился по результатам сканирующей электронной микроскопии, значениям экспериментальной плотности и электрофизическим параметрам.

Установлено, что оптимальными условиями проведения синтеза является вибрационное уплотнение порошка шихты. Помол в планетарной мельнице в течение 1-2 часа обеспечивал лучшие показатели по основным электрофизическим параметрам. В таблице представлены основные свойства полученных керамических образцов.

Таблица Свойства пьезокерамических элементов полученных в результате исследования

Тех.услов.изг.	Тспек, °С	tg δ, %	d31, пКл/Н	<b>d</b> 33, пКл/Н
OCT	1230	1,8	40	100
Планет.мельн. 2 ч.	1190	1,32	42	117
Планет.мельн. 2 ч.	1210	1,28	42	114
Планет.мельн. 1 ч.	1230	1,18	43	118

В результате исследования установлено, что вибрационного уплотнения порошка перед синтезом в сочетании с помолом в течение двух часов повышает основные свойства и снижает температуру спекания керамики ЦТС-21 до 1190 °С. Это имеет положительный экономический аспект и повышает ресурс печного оборудования.

- 1. M.A. Marakhovsky, A.A. Panich, M.V. Talanov, V.A. Marakhovskiy. Study of the influence of technological factors on improving the efficiency of ferroelectrically hard piezoceramic material PCR-8. Ferroelectrics. 560 (2020) 1–6.
- 2. Мараховский М.А., Панич А.А. Получение пьезокерамики системы PMN-PT методом искрового спекания. Известия ЮФУ. Технические науки. 2017. 242;
- 3. М. А. Мараховский, М. В. Таланов, А. А. Панич. Сегнетоэлектрическая керамика на основе Bi4Ti3O12, предназначенная для экстремальных условий. Известия РАН. Серия физическая. Т.87(9) 2023. 1279.

#### ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В КЕРАМИКЕ ТИТАНАТА БАРИЯ СТРОНЦИЯ

В.В. Иванов<sup>1</sup>, О.В. Малышкина, И.Л. Кислова<sup>3</sup>, А.В. Солнышкин<sup>4</sup>.

<sup>1</sup> Аспирант, Vladislav\_40@mail.ru

<sup>2</sup> Профессор, olga.malyshkina@mail.

<sup>3</sup> Доцент, inkis@mail.ru

<sup>4</sup> Профессор, a.solnyshkin@mail.ru

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

В настоящей работе исследованы петли диэлектрического гистерезиса в керамике  $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$  (x=0,1-0,6). Установлено, что в образцах с содержанием сронция  $(1-x)\ge0,2$  петли диэлектрического гистерезиса имеют перетяжку. Величины переключаемой поляризации и коэрцитивного поля уменьшаются с увеличением содержания стронция.

Ключевые слова: титанат бария стронция, поляризация, коэрцитивное поле, пироэлектрический отклик.

Исследование процессов переключения осуществлялось осциллографическим методом изучения петель диэлектрического гистерезиса. Для наблюдения петель диэлектрического гистерезиса была использована модифицированная схема Сойера—Тауэра. Частота измерительного поля составляла 50 Гц.

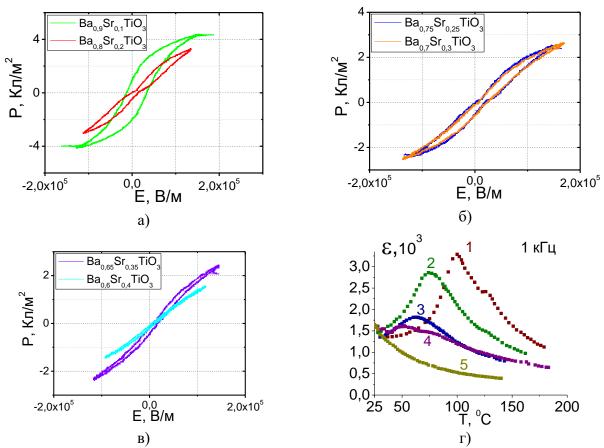


Рис. 1 Петли диэлектрического гистерезиса для составов  $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$  (а-в); (г) -зависимость диэлектрической проницаемости ( $\epsilon$ ) от температуры на разных частотах (Кривая 1 - состав  $Ba_{0.9}Sr_{0.1}TiO_3$ , 2 -  $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3$ , 3 -  $Ba_{0.7}Sr_{0.3}TiO_3$ , 4 -  $Ba_{0.75}Sr_{0.25}TiO_3$ , 5 -  $Ba_{0.6}Sr_{0.4}TiO_3$ ).

На рис. 1 (а-в) представлены полученные петли диэлектрического гистерезиса. В материалах  $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$  с  $(1-x) \ge 0,2$  петли имеют перетяжку, которая, как известно [1], характерна для сегнетоэлектриков—антисегнетоэлектриков. Значения переключаемой поляризации и величины коэрцитивного поля представлены в таблице.

Таблица

,	P,	E <sub>c</sub> ,	T₀. °C	$+\gamma$ , $10^{-4}$ Кл/(м <sup>2</sup> · К)	-γ 10 <sup>-4</sup> Kπ/(м <sup>2</sup> · K)
	<b>К</b> л/м²	кВ/м	10,	, 10 181/(W 11)	
$Ba_{0,9}Sr_{0,1}TiO_3$	0,042	250	100	0,11	3,70
Ba <sub>0,8</sub> Sr <sub>0,2</sub> TiO <sub>3</sub>	0,031	69	75	0,60	0,61
$Ba_{0,75}Sr_{0,25}TiO_3$	0,025	87	60	0,73	1,78
Ba <sub>0,7</sub> Sr <sub>0,3</sub> TiO <sub>3</sub>	0,025	87	57	0,56	0,55
Ba <sub>0,65</sub> Sr <sub>0,35</sub> TiO <sub>3</sub>	0,023	45	25	0,56	0,51
$Ba_{0,6}Sr_{0,4}TiO_3$	0,015	35	23	-	-

Изначально образцы не обладали самопроизвольной поляризацией. Воздействие переменным полем приводило к поляризации образцов, поскольку наблюдался пироэлектрический отклик. Исследования пироэлектрических свойств, образцов, поляризованных постоянным полем показали, что при изменении облучаемой стороны меняется направление пиротока в зависимости от направления спонтанной поляризации по отношению воздействию теплового излучения, модулированного прямоугольной формы. В образцах с содержанием стронция от 0,1 до 0,35 пироэлектрический наблюдался отклик прямоугольной формы, что свидетельствует об однородном состоянии поляризации в поверхностном слое. Величины пироэлектрических коэффициентов представлены в таблице. Во всех образцах обнаружен градиент поляризации, поскольку значения пирокоэффициентов со стороны +Р и -Р значительно отличаются. С увеличением концентрации Sr значения пирокоэффициентов уменьшаются, что хорошо согласуется с данными по переключаемой поляризации.

#### Литература

1. Смоленский Г.А. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. – Л.: Наука, 1971. – 476 с.

#### ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В НЕКОТОРЫХ СЛАБО УПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

Л. Н. Коротков<sup>1</sup>, М.А. Панкова<sup>2</sup>, F.D. Al' Jaafari<sup>3</sup>, С.В. Попов<sup>4</sup>, Л.С. Стекленева<sup>4</sup> <sup>1</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия <sup>2</sup>Воронежский институт МВД РФ, Воронеж, Россия <sup>3</sup>University of Wasit, Al Kut, Iraq <sup>4</sup>ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж, Россия

#### l\_korotkov@mail.ru

Представлены результаты исследований диэлектрических свойств некоторых классов неупорядоченных полярных диэлектриков, проведенные в широком интервале температур на частотах  $10^{-2}-10^6$  Гц. Рассмотрены процессы диэлектрической релаксации в этих материалах. Обсуждаются закономерности и особенности их протекания.

Ключевые слова: диэлектрическая релаксация, дипольное стекло, наноструктурированные и аморфно-кристаллические сегнетоэлектрики.

Слабо упорядоченные полярные диэлектрики уже давно привлекают внимание исследователей своими уникальным физическими свойствами. Интерес вызывают не только протекающие в них специфические физические процессы, но и широкие перспективы применения в изделиях электронной техники. Под слабо упорядоченными полярными диэлектриками принято понимать такие материалы, в которых электрические диполи, динамически разупорядоченные при высоких температурах, ниже некоторой температуры оказываются заморожены случайным образом. К таким материалам относят фазовым переходом, сегнетоэлектрики размытым сегнетоэлектрики с несоразмерными фазами, дипольные стекла, полярные гетерогенные полимеры, ультрадисперсные И аморфно-кристаллические системы на основе сегнетоэлектриков. Сюда же, по-видимому, можно отнести и высокоэнтропийные сегнетоэлектрики, кристаллическая называемые решетка которых искажена благодаря случайным сильно замещениям составляющих ее ионов.

В данных материалах нарушения химического и топологического порядка в расположении атомов способствуют возникновению замороженного беспорядка в ансамбле электрических диполей при низких температурах. В результате взаимодействия «замораживающихся» диполей наблюдаются специфические релаксационные процессы недебаевского типа.

Целью данной работы стало обсуждение процессов диэлектрической релаксации, наблюдаемой в различных типах неупорядоченных полярных диэлектриков.

В качестве объектов исследований взяты матричные нанокомпозиты на

основе канонических сегнетоэлектриков и сегнетоэлектриков с несоразмерной фазой, наноструктурированный титанат стронция, твердые растворы на основе цирконата-титаната свинца и дигидрофосфата калия-аммония.

Результаты исследования диэлектрических свойств данных материалов, проведенные на частотах  $10^{-2}-10^6$  Гц в широком интервале температур показали, что наряду со специфическими особенностями процесс диэлектрической релаксации в них характеризуется широким спектром времен релаксации, расширяющимся с понижением температуры. Температурная зависимость среднего времени релаксации в большинстве случаев может быть удовлетворительно описана законом Аррениуса с зависящей от температуры энергией активации U(T).

В случае сегнетоэлектриков с размытым фазовым переходом выявлена корреляция между величиной размытия перехода и скоростью изменения энергии активации U в области фазового перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 24-22-20054.

УДК 537.226.4: 538.91

#### КОНКУРЕНЦИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ И АКТИВАЦИИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВБЛИЗИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

#### Д.В. Кузенко

Заведующий отделом функциональных материалов, к.ф.-м.н, danil.kuzenko.84@yandex.ru ФГБНУ «Научно-исследовательский институт «Реактивэлектрон»

В работе представлены результаты исследования температурной зависимости диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрической керамики  $BaTiO_3$ . В окрестности фазового перехода методом активационного анализа определены энергии активационных процессов в сегнетоэлектрическом (2,07 eV) и параэлектрическом (0,48 eV) состояниях. Установлено снижение диэлектрической проницаемости в точке Кюри с ростом частоты электрического поля по логарифмическому закону, а также впервые определена энергия активации релаксационного процесса в параэлектрическом состоянии  $BaTiO_3$  (0,21 eV).

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, титанат бария, фазовый переход, энергия активации, диэлектрическая релаксация.

Сегнетоэлектрическая керамика титанат бария  $BaTiO_3$  синтезирована методом твердофазного синтеза при температуре 1400 К и спечена при температуре 1700 К. Действительная часть диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'$  рассчитана из значений модуля комплексного сопротивления Z и угла фазового сдвига комплексного сопротивления  $\varphi$ , измеренных на частотах 0,025, 1, 5, 10, 50, 100 kHz на широкополосном анализаторе иммитанса E7-28.

Известно, что образцы  $BaTiO_3$  обладают диэлектрической релаксацией выше температуры Кюри в области частот ниже 100 Hz, что приписывается ионизированным носителям пространственного заряда, таким как кислородные вакансии и дефекты с термической энергией активации 0,72 eV, а также интерфейсной поляризации [1]. Для  $BaTi_{0,8}Zr_{0,2}O_3$  в параэлектрической области также установлена релаксация, обусловленная переориентацией полярных наноструктур [2]. Поэтому для понимания механизмов диэлектрической релаксации в сегнетоэлектриках важно исследовать температурно-частотные зависимости диэлектрической проницаемости выше точки Кюри.

Ранее методом активационного анализа температурной зависимости диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'(T)$  вычислена энергия активации (2,07 eV) доменной структуры керамики BaTiO<sub>3</sub> вблизи фазового перехода [3].

Анализ зависимости  $\varepsilon'(T)$  (Рис. а) позволил установить снижение значения  $\varepsilon'_{\max}$  в точке Кюри с ростом частоты электрического поля f по логарифмическому закону (Рис. б). Такое поведение согласуется с известным фактом того, что повышение температуры диэлектрика приводит к снижению времени релаксации, а область снижения диэлектрической проницаемости смещается в сторону более высоких частот [4]. Научной новизной является установленный в работе факт наличия линейной зависимости  $\ln(\varepsilon'_{\min})(1/kT)$  (Рис. в), что позволило впервые определить энергию активации релаксационного процесса в

параэлектрическом состоянии  $BaTiO_3$  (0,21 eV). Также определена энергия активации процесса снижения диэлектрической проницаемости с ростом температуры выше точки Кюри (0,48 eV).

Суммируя результаты исследования, можно сделать вывод, что в окрестности фазового перехода в сегнетоэлектрике BaTiO<sub>3</sub> существуют активационные и релаксационные процессы, конкуренция между которыми и определяет наличие установленных закономерностей (Рис.). В качестве основного процесса активации в сегнетоэлектрической области можно выделить механизм электрон-фононного взаимодействия, особо значительный вблизи точки Кюри и который, вероятнее всего, обусловлен псевдо-эффектом Яна-Теллера [5] и эффектом ковалентности в результате гибридизации 2*p*-состояний кислорода с *d*-состояниями переходного металла. [6]. В параэлектрической области диэлектрическая релаксация, по-видимому, обусловлена ростом проводимости при повышении температуры в результате активации ионизированных носителей заряда (кислородных вакансий) [1].

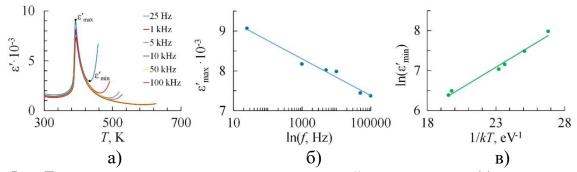


Рис. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости (а), частотная зависимость значения диэлектрической проницаемости в точке Кюри  $\varepsilon'_{max}$  (б) и температурная зависимость  $\varepsilon'_{min}(T)$  в координатах  $\ln(\varepsilon'_{min})-1/kT$  керамики BaTiO<sub>3</sub> (в)

Работа выполнена в рамках фундаментальной темы по госзаданию Минобрнауки РФ «Активационные механизмы фазовых переходов в сегнетоэлектрических материалах» (№ 123121500051-7).

- 1. Lee S.-J. Low-frequency dielectric relaxation of BaTiO<sub>3</sub> thin-film capacitors / S.-J. Lee, K.-Y. Kang, S.-K. Han // Applied Physics Letters. 1999. V. 75. No. 12. P. 1784-1786.
- 2. Aktas O. Phase transition behavior in ferroelectric BaTi<sub>0,8</sub>Zr<sub>0,2</sub>O<sub>3</sub>: Evidence of polar cluster reorientation above Curie temperature / O. Aktas, F.J. Romero, Z. He // Journal of Applied Physics. 2025. V. 137. Art. no. 204103.
- 3. Кузенко Д.В. Активационный анализ температурной зависимости диэлектрической проницаемости сегнетоэлектриков / Д.В. Кузенко // Известия РАН. Серия физическая. 2024. Т. 88.-N 5. С. 46-52.
- 4. Поплавко Ю.М. Физика активных диэлектриков / Ю.М. Поплавко, Л.П. Переверзева, И.П. Раевский. Ростов н/Д: Издательство ЮФУ, 2009. 480 с.
- 5. Bersuker I.B. Vibronic (pseudo Jahn-Teller) theory of ferroelectricity: Novel aspects and applications / I.B. Bersuker // Ferroelectrics. 2018. V. 536. No. 1. P. 1-59.
- 6. Bussmann A. Oxygen polarizability in ferroelectric phase transitions / A. Bussmann, H. Bilz, R. Roenspiess, K. Schwarz // Ferroelectrics. 1980. V. 25. No. 1. P. 343-346.

### SESSION 4 MISCELLANEOUS

# АНИЗОТРОПИЯ КВАЗИУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МАНДЕЛЬШТАМ-БРИЛЛЮЭНОВСКИХ СПЕКТРАХ КРИСТАЛЛОВ Na<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub>

Н.К. Дерец<sup>1</sup>, А.И. Федосеев<sup>2</sup>, С.Г. Лушников<sup>3</sup>, Ј.-Н. Ко<sup>4</sup>, S. Којіта<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Аспирант, deretsnk@mail.ioffe.ru

<sup>2</sup>Старший научный сотрудник, fedoseev@mail.ioffe.ru

<sup>3</sup>Главный научный сотрудник/зав. лаб. «Физики сегнетоэлектричества и магнетизма», sergey.lushnikov@mail.ioffe.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

<sup>4</sup>Профессор, hwangko1@gmail.com

Университет Халлим, Корея

<sup>5</sup>Профессор, којіта@ims.tsukuba.ac.jp

Институт материаловедения, Университет Цукубы, Япония

В работе представлены результаты исследования низкочастотной динамики решетки монокристаллов натрий-висмутового титаната  $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$  (NBT) методом мандельштам-бриллюэновского рассеяния света. Эксперименты проводились в интервале температур от 300 до 850 K в четырёх различных геометриях рассеяния с помощью (3+3)-проходного интерферометра Фабри-Перо. В спектрах рассеяния света наблюдалось много-компонентное квазиупругое рассеяние света (QELS) и акустические фононы. Зависимость температурной эволюции QELS от геометрии рассеяния света обсуждается в контексте нетривиальной динамики решётки NBT.

Ключевые слова: динамика решётки, бриллюэновское рассеяние света, натрийвисмутовый титанат,  $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$ , квазиупругое рассеяние света, акустические фононы.

Натрий-висмутовый титанат  $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$ (NBT), впервые синтезированный в лаборатории Г.А. Смоленского в 1956 году [1], представляет собой сложнокомпонентный перовскит с общей формулой АВО3, в котором кристаллографические позиции заняты атомами Na и Bi. Кристаллы NBT демонстрируют нетривиальную последовательность фазовых переходов, при которых возникают сегнетоэлектрические и сегнето-эластические свойства, в то большие значения диэлектрической проницаемости время пьезоэлектрических коэффициентов делают это соединение интересным для практических применений. Ранее было показано, что в спектрах мандельштамрассеяния соединении бриллюэновского света В ЭТОМ наблюдается сложнокомпонентное квазиупругое рассеяние света, различные вклады в которое позволяют исследовать процессы, связанные со структурными фазовыми переходами [2]. Представленная работа расширяет и углубляет предложенный ранее подход К исследованию динамики решётки сложнокомпонентных перовскитов и родственных им соединений.

Монокристаллы NBT были выращены методом Чохральского, а их пространственная ориентация контролировалась с помощью рентгеновского

дифрактометра. Эксперименты проводились в интервале температур от 300 до 850 K в 90А-градусной геометрии рассеяния с  $q_{\rm ph}$ ||[100], 180-градусной геометрии рассеяния с  $q_{\rm ph}$ ||[110] и 180-градусной геометрия рассеяния с  $q_{\rm ph}$ ||[110] с помощью (3+3)-проходного интерферометра Фабри-Перо (J. Sandercock tandem). Источником излучения служил твердотельный лазер "Coherent" с длиной волны  $\lambda = 532$  нм. Спектры снимались в режиме охлаждения образца, находящегося в температурной ячейке Linkam THMS600, обеспечивающей температурную стабилизацию  $\pm 0.1$  К. В ходе экспериментов использовалось несколько свободных спектральных диапазонов (от 12 до 800 ГГц).

В результате проведённых экспериментов в спектрах мандельштамбриллюэновского рассеяния света на монокристаллах NBT были обнаружены продольные и поперечные акустические фононы, а также выраженное многокомпонентное QELS, состав и температурное поведение которого существенно зависели от выбранной геометрии эксперимента. В частности показано, что максимумы интенсивности отдельных компонент QELS и аномалии их полной ширины на полувысоте различаются. Полученные данные позволяют более детально проследить температурную эволюцию низкочастотной динамики решётки и уточнить роль различных механизмов релаксации в NBT.

Работа выполнена в рамках госзадания.

- 1. Смоленский Г.А. Новые сегнетоэлектрики сложного состава / Г.А. Смоленский, В.А. Исупов, А.И. Аграновская, Н.Н. Крайник. // ФТТ. 1960. Т. 2. С. 2982.
- 2. Fedoseev A.I. Multicomponent Quasi-Elastic Light Scattering in Na<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub> as Studied by Broadband Brillouin Scattering / A.I. Fedoseev, E.A. Popova, P.P. Syrnikov, S. Kojima, S.G. Lushnikov. // JETP Letters. 2015.. JETP letters, 102, pp.789-795.

## VARIETY OF ORDERED MAGNETIC STATES IN HONEYCOMB-LAYERED COMPOSITIONALLY COMPLEX OXIDES Na<sub>3-x</sub>Li<sub>x</sub>M<sub>2</sub>SbO<sub>6</sub>

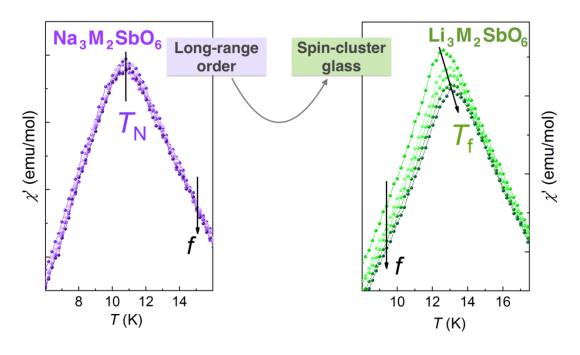
 $(M = Cu_{1/3}Ni_{1/3}Co_{1/3})$ 

T. M. Vasilchikova

Lomonosov Moscow State University t\_vasilchikova@yahoo.com

The concept of high-entropy oxides has triggered extensive research of this novel class of materials because their numerous functional properties are usually not mere linear combinations of those of the components. Here, we introduce the new series of compositionally complex honeycomb-layered magnets  $Na_{3-x}Li_xM_2SbO_6$  ( $M = Cu_{1/3}Ni_{1/3}Co_{1/3}$ ).

Despite the statistical distribution of the 3d cations on the same M position in the structure of Na<sub>3-x</sub>Li<sub>x</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub>, the magnetic parameters remain well defined, and transitions into either spin-cluster or antiferromagnetic state remain sharp. Na<sub>3</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub> is an antiferromagnet with a Neél temperature of 10.2 K. This is between the transition temperatures of its constituent Na<sub>3</sub> $T_2$ SbO<sub>6</sub>: 4.4 K(T = Co) and 16.5 K (T = Ni). The formal analogue with M = Cu, however, is not considered as a honeycomb structure: due to the Jahn–Teller distortion, Cu–Cu distances are there significantly different (3.20 × 2 and 2.96 Å), resulting in formation of dimers and alternating frustrated spin chains. The difference in the behavior of Na<sub>3</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub>, on the one side, and Li<sub>0.8</sub>Na<sub>2.2</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub>, Li<sub>1.5</sub>Na<sub>1.5</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub>, and Li<sub>3</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub>, on the other side, can be ascribed to the Li<sup>+</sup>/Cu<sup>2+</sup> inversion, which results in the pronounced spin-cluster effect not seen in the sodium compound. Notably, the most disordered composition Li<sub>1.5</sub>Na<sub>1.5</sub> $M_2$ SbO<sub>6</sub> possesses the lowest "ordering" temperature.



## PECULIAR CRYSTAL STRUCTURE AND LONG-RANGE ORDER OF SPIN-1/2 LADDERS IN MoOBr<sub>3</sub>

O.S. Volkova

Professor, Lomonosov Moscow State University, volkova@lt.phys.msu.ru

Magnetic and crystal structures of MoOBr<sub>3</sub> are estimated in thermodynamic measurements and first principles calculations.

Keywords: antiferromagnetism, 4d metals, spin – ladders

Tetragonal crystal structure of molybdenum oxytribromide, MoOBr<sub>3</sub>, consists of non-planar Mo<sub>2</sub>Br<sub>6</sub> units joined by non-equidistant Mo-O-Mo bonds into infinite ladders, which are connected to each other by the van der Waals forces as is shown in left panel to Fig. 1. Within unit cell, the apical Mo atoms in any given ladder are shifted along the c axis either above (+z) or below (-z) the basal ab plane of the Br atoms. Magnetic susceptibility taken at various frequencies  $\chi_{ac}(T)$  and magnetic fields  $\chi_{dc}(T)$ shown in right panel of Fig. 1 as well as specific heat Cp(T) data evidence the formation of a long-range antiferromagnetic order at  $T_N = 34 \pm 1$  K with largely reduced effective magnetic moments  $\mu_{eff} = 1.3 \pm 0.1 \mu_{B}$ . ESR spectrum evidences the presence of Mo<sup>5+</sup>(4d<sup>1</sup>) ions in the structure. First principles GGA+U calculations point to the predominance of intra-ladder ferromagnetic exchange interaction on both rungs  $J_{rung}$  = - 10 meV and legs  $J_{\text{leg}} = -$  1 meV of the ladder, while much weaker inter-ladder antiferromagnetic exchange interaction  $J_{inter} = 0.2$  meV couples the ladders. The anisotropic part of the exchange K = 0.6 meV in combination with  $J_{inter}$  allows estimating the spin-flop transition field  $\mu_0 H_{\text{spin-flop}} \sim 6$  T in good correspondence with the magnetization M(H) data shown in the lower inset of right panel of Fig. 1 [1].

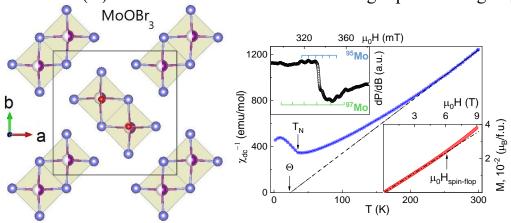


Fig. 1. Left: crystal structure of MoOBr<sub>3</sub>. Molybdenum atoms are shown by semifilled large spheres, bromine and oxygen are middle and small size spheres. Right: Temperature dpendence of magnetic susceptibilityy of MoOBr<sub>3</sub>. Upper and lower insets are ESR spectrum taken at 300 K and magnetization curve taken at 2 K.

1. Peculiar crystal structure and long-range order of spin-1/2 ladders in MoOBr<sub>3</sub> / A. A. Vorobyova, E. V. Komleva, M. Y. Geidorf et al. // *Journal of Alloys and Compounds*. — 2023. — P. 172072.

UDC 544.174

# INFLUENCE OF THE TIME OF TREATMENT OF MODIFIED WOOD WITH A PULSED MAGNETIC FIELD ON ITS MECHANICAL PROPERTIES

N.S. Kamalova<sup>1</sup>, N.Yu. Evsikova<sup>3</sup>, N.N. Matveev<sup>3</sup>, V.I. Lisitsyn<sup>4</sup>, S.V. Vnukova<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, rcamel@yandex.ru

<sup>2</sup>Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of Department, natalyaevsikova@mail.ru

<sup>3</sup>Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, nmtv@vglta.vrn.ru

<sup>4</sup>Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, viktor-lisicyn@yandex.ru

<sup>5</sup>Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, vnukovasv@vglta.vrn.ru

Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov", Voronezh, Russia

The report presents experimental data on the effect of pulsed magnetic field treatment time on the end grain hardness of modified compacted birch wood. Analysis of the results allows us to make an assumption about the thermodynamic nature of the mechanism of change in the lignocarbohydrate matrix of wood after exposure to a pulsed magnetic field.

Key words: pulsed magnetic field, end grain hardness of wood, lignocarbohydrate matrix, supramolecular structure of wood.

In order to change the mechanical properties of wood for the manufacture of friction bearings that are not subject to corrosion, various processing methods have been developed for a long time: compaction, impregnation, drying, irradiation and their various combinations [1, 2]. At present, preference is given to physical methods of exposure. Therefore, studies of the effect of such factors as a pulsed magnetic field (PMF) on the mechanical properties of wood are relevant.

Experiments have conducted to study the effect of the treatment time ( $\tau$ ) with a pulsed magnetic field (PMF) on the relative end hardness (H/H<sub>0</sub>) (where H<sub>0</sub> and H are the hardness before and after treatment) of samples made of modified wood of birch with a density of  $1.35\times10^3$  to  $1.45\times10^3$  kg/m³. The samples were treated with triangular pulses of different duration  $t_i$  at equal intervals with parallel arrangement of the field lines and wood fibers during exposure. Determination of static hardness was carried out according to Rockwell method in accordance with the standard (GOST 13338-86) for modified wood [1]. The results of the experiments conducted at the values of the IMF amplitude B<sub>0</sub> exceeding 0.3 T and the pulse duration of 10  $\mu$ s and 30  $\mu$ s are presented in Figures 1 and 2.

The studies have shown that the effect of the processing time  $\tau$  on the relative end-face density H/H<sub>0</sub> of samples of modified birch wood at B<sub>0</sub>  $\geq$  0.3 T depends on the pulse duration t<sub>i</sub>. For example, at the pulse duration t<sub>i</sub> = 10  $\mu$ s, the maximum increase in the relative end-face hardness was observed at  $\tau_{opt} \approx 60$  s, and at t<sub>i</sub> = 30  $\mu$ s, the  $\tau_{opt}$  value decreased almost 3 times. It should be noted that the change in the pulse duration did not affect the maximum value of the relative end-face hardness of the modified wood. This indicates that its lignocarbohydrate matrix is in a stable thermodynamic state after IMF processing. The presence of  $\tau_{opt}$  can be associated with the energy required to form this state. Consequently, it is advisable to model the mechanism of

change in the supramolecular structure of the matrix within the framework of classical thermodynamics.

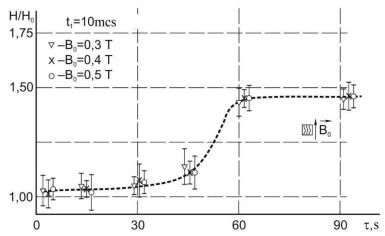


Fig. 1. Dependence of the relative end hardness  $H/H_0(\tau)$  samples of modified birch wood with magnetic pulse duration  $t_i = 10 \mu s$  [3]

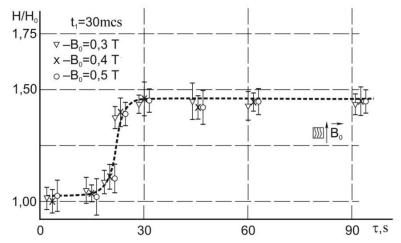


Fig. 2. Dependence of the relative end hardness  $H/H_0(\tau)$  samples of modified birch wood with magnetic pulse duration  $t_i = 30 \ \mu s \ [3]$ 

#### References

- [1] Kamalova, N.S. Physical foundations of wood modification: monograph / N.S. Kamalova, V.V. Postnikov. Voronezh: Voronezh State Forest Engineering University named after G.F. Morozov, 2019. 164 p.
- [2] Shamaev, V.A. Chemical-mechanical modification of wood: monograph / V.A. Shamaev. Voronezh: VSFEA, 2003.-260~p.
- [3] Kalchenko, S.V. Hardening of modified wood after exposure to ultrasound and pulsed magnetic field: author's abstract. dis. candidate of physical and mathematical sciences: 01.04.07 / Kalchenko Sergey Vladimirovich; VSU. Voronezh, 2011.-18 p.

## ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ АМОРФНО-НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ С УЛУЧШЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ

### И.Е. Пермякова

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физикохимии и механики металлических материалов, inga\_perm@mail.ru Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

Проведен комплекс исследований, направленный на детальное установление физических закономерностей деформационного поведения, эволюции структурных состояний, а также путей создания инновационных аморфно-нанокристаллических композитов с управляемым откликом свойств на внешние воздействия (лазерное излучение, интенсивная пластическая деформация, отжиг).

Ключевые слова: аморфный сплав, композит, структурно-фазовые превращения, свойства, лазерное облучение, отжиг, кручение под высоким давлением.

Аморфно-нанокристаллические сплавы — новый класс материалов, возникший на рубеже 20 и 21 веков в результате интенсивного развития перспективных технологий. Сосуществование в структуре двух различных фазовых составляющих — аморфной (лишь с ближним порядком в расположении атомов) и кристаллической (с регулярным расположением атомов) способно привести к необычным синергийным эффектам в материале, особенно если кристаллическая фаза имеет нанокристаллические масштабы [1, 2].

- В работе обсуждаются разработанные научные принципы создания многообразия аморфно-нанокристаллических композитов:
- при частичной кристаллизации аморфных сплавов (AC) в процессе отжига при подобранных температурно-временных режимах;
- при вариациях пространственно-распределённых зон лазерного воздействия по поверхности и по сечению лент AC, а также подбором параметров облучения ультрафиолетового эксимерного лазера;
- путём "пакетного" чередования слоёв аморфных лент разных по составу и свойствам и их последующего кручения под высоким давлением (КВД);
- осуществляя частичную аморфизацию кристаллических наноламинатов системы «медь-ниобий» при КВД в камере Бриджмена.

На основании установленных закономерностей отклика свойств и структурно-фазовых превращений предложена совокупность режимов альтернативных обработок для получения оптимального сочетания физикомеханических характеристик исследуемых материалов.

Определены перспективы практического использования результатов исследования поведения большого класса AC и аморфно-нанокристаллических композитов при экстремальных внешних воздействиях: при разработке составов,

производстве магнитомягких и резистивной лент с аморфной и нанокристаллической структурой, для прогнозирования их температурновременной стабильности, контроля процессов охрупчивания, поддержания высокого уровня коррозионной стойкости, прочностных, магнитных свойств с сохранением ненулевой пластичности.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00319-25-00.

- 1. Глезер, А.М. Нанокристаллы, закалённые из расплава / А.М. Глезер, И.Е. Пермякова М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. 360 с.
- 2. Глезер, А.М. Механическое поведение аморфных сплавов / А.М. Глезер, И.Е. Пермякова, В.Е. Громов, В.В. Коваленко Новокузнецк: Изд-во СибГИУ, 2006. 416 с.

### УЛЬТРАЗВУКОВОЕ СТИМУЛИРОВАНИЕ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ

И.Е. Пермякова<sup>1</sup>, Е.В. Дюжева-Мальцева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физикохимии и механики металлических материалов, inga\_perm@mail.ru 

<sup>2</sup>аспирант, elena.dujewa@yandex.ru

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

В работе рассматривается спектр возможностей ультразвуковой обработки применительно к аморфным сплавам. Обсуждается физическая природа взаимодействия высокочастотных колебаний с быстрозакалёнными сплавами, отклик их свойств и особенности структурных превращений под влиянием ультразвука. Кроме того, анализируются методики, режимы, параметры ультразвукового стимулирования данного материала, ограничения текущих исследований и перспективы на будущее.

Ключевые слова: аморфный сплав, ультразвук, структура, механическое поведение, нанокристаллизация, формование.

Аморфные сплавы (АС) обладают уникальными и востребованными свойствами за счёт необычного структурного состояния с преобладанием ближнего порядка в расположении атомов [1]. При внешних воздействиях степень структурной неупорядоченности АС снижается, и это ведёт к существенным изменениям эксплуатационных характеристик. Главными проблемами их широкого применения являются труднообрабатываемость, ограниченный интервал термической стабильности [2]. Более того, пластическая деформация в АС происходит за счёт образования полос сдвига при отсутствии деформационного упрочнения, что обуславливает катастрофический характер разрушения при растяжении. Повысить прочность и пластичность таких сплавов можно, трансформируя аморфную структуру в квазиаморфную или в частично нанокристаллическую. Сосуществование кристаллической аморфной составляющей приводит к ряду эффектов, отражающихся на физикомеханическом поведении материалов [3].

Модифицировать свойства и влиять на структуру АС возможно уже в процессе их получения. Кроме того, существуют альтернативные и порой трудоемкие виды обработок АС: отжиг, лазерное облучение, кручение под высоким давлением [3]. В последнее десятилетие появляются сообщения об эффективности применения ультразвуковых (УЗ) колебаний для трансформации структуры АС [4]. Однако такие исследования весьма разрознены и немногочисленны, особенно в России. Проведён их детальный аналитический анализ с обзором и обсуждением существующих методик, режимов, условий УЗ механоактивации АС. На его основании выделены три актуальные как с научной, так и прикладной точки зрения, направления исследований поведения быстрозакалённых АС после УЗ обработки (рис. 1), которые необходимо развивать и расширять знания:

- 1) омоложение под действием ультразвука АС с размягчением, улучшением термической стойкости при сохранении аморфности и возможностью формования,
- 2) частичная девитрификация АС под влиянием ультразвука с оптимальным сочетанием доли аморфной и нанокристаллической фаз, а также с компромиссным балансом прочности и пластичности,
- 3) УЗ пайка/сварка для быстрого соединение слоёв разных по химическому составу и свойствам АС, а также их консолидирования с другими материалами.

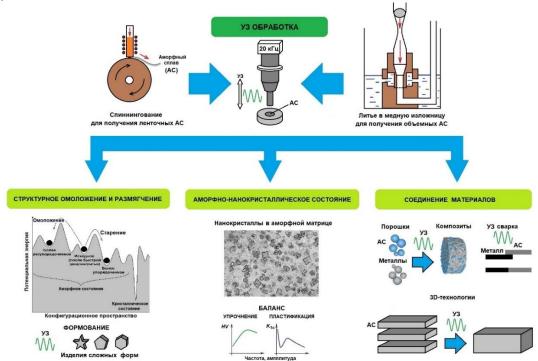


Рис. 1 Схема развития УЗ технологий применительно к аморфным сплавам

Обозначены критические вопросы по разработке подходов к ультразвуковой обработке и перспективы ее дальнейшего использования применительно к аморфным сплавам с целью расширения их практического внедрения в современных инженерных приложениях.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00319-25-00.

- 1. Amorphous and nanocrystalline materials: preparation, properties, and applications. / A. Inoue, K. Hashimoto (Eds.). Berlin, Heiderberg: Springer, 2001. 206 p.
- 2. Glezer, A.M. Thermal and time stability of amorphous alloys. / A.M. Glezer, A.I. Potekaev, A.O. Cheretaeva Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2017. 180 p.
- 3. Пермякова, И.Е. Аморфно-нанокристаллические композиты: получение, структура, свойства / И.Е. Пермякова, А.М. Глезер // В кн. "Перспективные материалы и технологии: монография: в 2 томах / Под ред. чл.-корр. В.В. Рубаника Витебск: УО "ВГТУ", 2019. Т. 1. Гл. 1 С. 5-21.
- 4. Пермякова, И.Е. Влияние ультразвуковой обработки на структурные превращения и механическое поведение аморфных сплавов (ОБЗОР) / И.Е. Пермякова, Е.В. Дюжева-Мальцева // Frontier Materials & Technologies. − 2025. − №2. − С. 53-71.

# ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ И РЕЛАКСАЦИЯ В КРИСТАЛЛАХ С МАГНИТОАКТИВНЫМИ ИОНАМИ

Е.И. Головенчиц $^1$ , В.А. Санина $^2$ , Б.Х. Ханнанов $^3$ , В.Г. Залесский $^4$ 

<sup>1</sup> Ведущий научный сотрудник, sanina@mail.ioffe.ru

<sup>2</sup> Главный научный сотрудник, sanina@mail.ioffe.ru

<sup>3</sup> Старший научный сотрудник, boris.khannanov@gmail.com

<sup>4</sup>Старший научный сотрудник, nsh@ mail.ioffe.ru

ФГБУН Физико-Технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, 194021, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия

Ключевые слова: магнитный резонанс, области фазового расслоения, доменные стенки

Области фазового расслоения наблюдались в различных кристаллах, релаксорных сегнетоэлектриках И мультиферроиках содержащих магнитоактивные ионы переменной валентности или в кристаллах с примесями, вызывающими изменение валентности магнитных ионов [1]. Двойной обмен играет ключевую роль в возникновении областей фазового расслоения, приводит к ферромагнитному упорядочению магнитных ионов. При этом внутри этих локальных областей наблюдается повышенная локальная проводимость, связанная с некоторой повышенной концентрацией свободных электронов по сравнению с остальным объемом кристалла. Поскольку объем таких областей мал, то в условиях квазистатических и низкочастотных измерений какие-либо свойств изменения магнитных И диэлектрических кристалла малозаметны. Более эффективными являются измерения на сверхвысоких частотах.

Как известно, кристаллы железоиттриевого граната  $YFe_5O_{12}$  (YIG) стехиометрического состава, обладает малыми диэлектрическими и магнитными потерями. Считалось, что в кристаллах YIG, которые содержат ионы  $Fe^{3+}$ , при отсутствии иновалентных примесей невозможно возникновение областей фазового расслоения. Однако работа по измерению циклотронного резонанса в 8 миллиметровом СВЧ диапазоне показала, что существование областей фазового расслоения возможно [1].

В [2] был предложен механизм, предполагающий, что в магнитных кристаллах со 180-градусными магнитными доменами на доменных границах неелевского типа возникают структурные искажения, нарушающие центральную симметрию. Это вызывает образование локального электрического поля, приводящее к формированию потенциальных барьеров (т.н. поляризационных барьеров) и накоплению электронов на доменных границах. Ферромагнитно поляризованные электроны способствуют процессу двойного обмена и

образованию областей фазового расслоения, содержащих свободные ферромагнитно поляризованные носители заряда [1].

Возможность существования циклотронного резонанса в YIG при комнатной температуре связано с тем, что рассеяние электронов как за счет электрон-электронных столкновений, так и за счет электрон-фононной и спинфононной релаксации является несущественным. Это обусловлено достаточно малой концентрацией делокализованных электронов в областях фазового расслоения (по нашим оценкам  $10^{-13} 10^{-14}$  см<sup>-3</sup>) [1,3] и эффективной экранировкой областей фазового расслоения от основной части кристалла за счет упомянутых барьеров. Как выяснилось, такие условия возникают не только в YIG, но в других мультиферроиках RMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [3], кристаллах, В (R-редкая земля) сегнетоэлектриках-релаксорах  $PbCo_{1/3}Nb_{2/3}O_3$  [4], в которых поляризационные барьеры областей фазового расслоения достаточно велики.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (тема FFUG-2024-0042).

- 1. Ханнанов Б.Х. Подобие механизмов формирования областей фазового расслоения в  $Y_3Fe_5O_{12}$ ,  $EuFeO_3$ ,  $YCrO_3$ ,  $Eu_2CuO_4$  и в мультиферроиках  $RMn_2O_5$  (Миниобзор) / Б.Х. Ханнанов, Е.И. Головенчиц, В.А. Санина. // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 115, No. 4. С. 262–269.
- 2. Барьяхтар В.Г. Теория неоднородного магнитоэлектрического эффекта/ В.Г. Барьяхтар, В.А. Львов, Д.А. Яблонский // Письма в ЖЭТФ -1984 . Т. 37, No. 12, С . 565-567.
- 3. Головенчиц Е.И. Циклотронный резонанс в монокристаллах  $YFe_5O_{12}$  / Е.И. Головенчиц, В.А. Санина, Б.Х. Ханнанов, М.П. Щеглов. // Физика твердого тела. 2024. Т. 66, Вып. 11. С.1888-1894.
- 4. Ханнанов Б.Х. Разделение фаз и зарядовые состояния в релаксорном сегнетоэлектрике  $PbCo_{1/3}Nb_{2/3}O_3$  / Б.Х. Ханнанов, В.Г. Залесский, Е.И. Головенчиц, В.А. Санина, Т.А. Смирнова, М.П. Щеглов, В.А. Боков, С.Г Лушников. // ЖЭТФ. 2020. Т. 157, No.3. С. 523–531.

# РЕЛАКСАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА ТЬ-Fe-Ti CO СТРУКТУРОЙ ThMn<sub>12</sub>

А.М. Гусева<sup>1</sup>, Т.Р. Мишурина<sup>2</sup>, А.И. Синкевич<sup>3</sup>, Е.М. Семенова<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Студентка, Guseva.AM@tversu.ru

<sup>2</sup>Студентка, mishurina\_01@mail.ru

<sup>3</sup>Аспирант, Sinkevich.AI@tversu.ru

<sup>4</sup>Доцент, Semenova.EM@tversu.ru

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

В работе представлены результаты наблюдений релаксации доменной структуры поверхности металлографических шлифов редкоземельных интерметаллидов Tb-Fe-Ti со структурой  $ThMn_{12}$ . Показано, что наблюдение трансформации доменной структуры поверхности позволяет визуализировать релаксацию напряжений, образовавшихся в процессе полировки. Конфигурация доменов сразу после процедуры полировки свидетельствует об изменении магнитной анизотропии поверхностного слоя. Неравновесное состояние изменяется под влиянием полей рассеяния основных доменов.

Ключевые слова: магнетик, доменная структура, поверхность, релаксация напряжений.

Соединения R-Fe-Ti со структурой ThMn<sub>12</sub> обладают тетрагональной структурой и характеризуются высокими кристаллической значениями намагниченности насыщения, температуры Кюри величины магнитокристаллической анизотропии. [1] При этом, они имеют широкую область гомогенности, что позволяет варьировать содержание Fe и Ti в широких пределах. Изменения состава в пределах области гомогенности приводит к смещению температуры спин-переориентационного фазового перехода. [2] В данной работе объектами исследования являются интерметаллиды TbFe<sub>11-x</sub>Ti, которые при комнатной температуре в зависимости от величины х характеризуются магнитокристаллической анизотропией (МКА) типа «легкая плоскость» или «легкая ось».

Исследования выполнены на поли- и монокристаллических образцах. Доменная структура (ДС) выявлялась методом полярного эффекта Керра, магнитного коллоида (Акулова-Биттера) и магнитно-силовой микроскопии. При подготовке образцов на усеченной поверхности металлического образца приготавливался шлиф с применением алмазных паст различной крупности для шлифовки и полировки.

На рис.1 в качестве примера представлены снимки ДС одного и того же участка шлифа поликристаллического образца TbFe<sub>9</sub>Ti, подвергнутого кратковременной механической полировке. Центральную часть снимка занимает зерно с ориентацией близкой к базисной, где в равновесном состоянии на поверхности должны выявляться домены типа «звездочки». Видно (рис.1а), что сразу после полировки на зерне с базисной ориентацией домены методом

полярного эффекта Керра не выявляются. При этом на соседнем зерне, отклоненном от базисной плоскости, видна ДС. Это связано с тем, что на поверхности зерен в процессе полировки возникает напряженный слой, в котором вектор намагниченности изменяет свое направление по сравнению с объемом зерна. При этом, напряженный слой в первую очередь формируется на поверхности зерен, ориентированных базисной плоскостью.

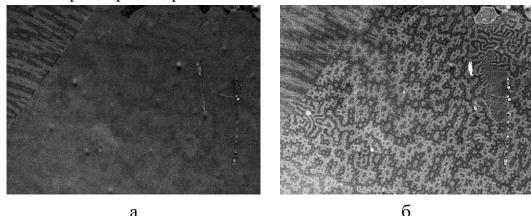


Рис.1. ДС на поверхности поликристалла TbFe<sub>9</sub>Ti, выявленная методом полярного эффекта Керра: а) сразу после полировки, б) через 48 часов.

На рис.16 представлена ДС того же образца, зафиксированная через 48 часов после механической полировки. Видно, что ДС полностью восстановилась. Скорость релаксации зависит от условий, в которых находится образец. Так, например, нагрев сокращает время релаксации магнитной доменной структуры поверхности до 1-2 минут, что указывает на термоактивационный механизм этого процесса. Аналогичные результаты получены и на монокристаллах.

Также важным обстоятельством, влияющим на время релаксации, являются условия полировки или шлифовки. Было установлено, что чем больше крупность абразива, с которого начинается процесс механического воздействия на поверхность, тем дольше длится релаксационный процесс. Таким образом, различие в скорости релаксации одного и того же образца при одинаковых внешних условиях можно связать с глубиной напряженного слоя, который сформировался при механическом воздействии абразивов различной крупности.

Исследования выполнены на оборудовании ЦКП ТвГУ при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

- 1. Buschow K. H. J. Structure and properties of some novel ternary Fe-rich rare-earth intermetallics / K. H. J. Buschow // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. Issue 8. P. 3130-3135.
- 2. Skokov K. Magnetic properties Gd<sub>3</sub>Fe<sub>x</sub>Ti<sub>3</sub> (34, 33, ... 24), TbFe<sub>11</sub>Ti and TbFe<sub>10</sub>Ti single crystals / K. Skokov, A. Grushichev, A. Khokholkov, Yu. Pastushenkov, N. Pankratov, T. Ivanova, S. Nikitin // J. Magn. Magn. Mater. 2004. V.272-276. P.374-375.

УДК 548.524

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ КРАЕВОГО УГЛА СМАЧИВАНИЯ В ПРОЦЕССЕ РОСТА НИТЕВИДНОГО НАНОКРИСТАЛЛА ПО МЕХАНИЗМУ ПАР-ЖИДКОСТЬ-КРИСТАЛЛ

В. А. Небольсин<sup>1</sup>, В.В. Корнеева<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Докт. техн. наук, профессор, nebolsin.va.2023@mail.ru

<sup>2</sup>Канд. техн. наук, доцент, vkorneeva@cchgeu.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В работе показано, что температурная релаксация краевого угла смачивания торцевой поверхности нитевидного нанокристалла (ННК) кремния жидкофазной каплей металла-катализатора в процессе роста ННК определяется растворением Si в жидкости и обусловлена большим временем релаксации процесса переноса массы через фазовую границу кристалл/жидкость.

Ключевые слова: краевой угол, температурная релаксация, нитевидный нанокристалл

Смачивание каплей жидкофазного металла (М) - катализатора торцевой сингулярной грани нитевидного нанокристалла (ННК) играет важную роль в пар-жидкость-кристалл (ПЖК). Количественной механизме роста характеристикой смачивания является краевой угол β=φ+90°, определяемый между касательной к поверхности капли в точке на периметре смачивания и поперечной сингулярной гранью ННК. Величина краевого угла определяет соотношение поперечных размеров ННК и капли катализатора, а значит, и форму растущего кристалла [1]. От величины угла β (или φ) зависят тип формируемой кристаллической фазы, пространственное направление кристаллографическая ориентация ННК, полярность граней, скорость роста и другие параметры [2]. Сами же измеряемые краевые углы зависят от различных факторов, важнейшим из которых является температура Т.

В работе исследована температурная релаксация краевого угла смачиваемости Si-поверхности различными М-катализаторами (Au, Ni и др.) в процессе роста ННК Si. Экспериментально установлено, что при повышении температуры роста ННК, величина краевого угла на вершине кристалла для систем Au-Si и Ni-Si уменьшается, а радиус ННК г увеличивается. Средние температурные коэффициенты краевых углов dф/dT составляют: для системы Au-Si –0,039 град/К, для Ni-Si –0,027 град/К. Релаксация краевого угла связана с изменением баланса сил, действующих на линии контакта трех фаз.

Наиболее вероятной причиной уменьшения контактных углов жидкофазного М-катализатора на вершине ННК с температурой является то, что система «кремний - жидкофазная каталитическая частица» не является полностью равновесной. Она находится в термическом и механическом равновесии, но не в химическом. Это значит, что температура и давление в каждой из фаз одинаковы, а химические потенциалы компонентов в твердой  $\mu_S$  и жидкой  $\mu_L$  фазах не равны ( $\mu_S \neq \mu_L$ ). В этом случае начинают происходить химические реакции между жидким расплавом и кристаллом, в частности, растворение Si, что значительно уменьшает межфазное натяжение на границе раздела кристалла с жидкостью и приводит к выравниванию химических

потенциалов компонентов в твердой и жидкой фазах. Система будет смещаться к состоянию равновесия. Время релаксации β (или φ), т.е. достижения равновесного угла смачивания, будет определяться переносом массы через фазовую границу (растворением Si), как наиболее медленным процессом релаксации, по сравнению с процессами переноса импульса и энергии.

Для роста ННК цилиндрической формы получено дифференциальное выражение температурной зависимости краевого угла

$$\frac{d(\sin\varphi)}{dT} = \frac{d(-\cos\beta)}{dT} \approx \frac{1}{\alpha_{LV}} \left(\frac{d\alpha_{SL}}{dT}\right),\tag{1}$$

где  $\alpha_{LV}$ ,  $\alpha_{SL}$  — удельная свободная поверхностная энергия границы жидкость/пар и кристалл/жидкость, соответственно.

В соответствии с (1), для того, чтобы с увеличением Т краевой угол фуменьшался, т.е. выполнялось условие  $d(\sin\phi)/dT < 0$ , необходимо, чтобы удельная поверхностная энергия  $\alpha_{SL}$  уменьшалась с температурой ( $d\alpha_{SL} < 0$ ), и, следовательно, выполнялось условие  $d\alpha_{SI}/dT < 0$ . Уменьшение  $\alpha_{SI}$  связано с растворимости кремния, поскольку повышением при переходе металлический расплав атомы полупроводника будут слабее взаимодействовать с атомами M, чем сами атомы металла друг с другом, так как  $E_{M-M} > E_{M-Si} > E_{Si-Si}$ (энергия химической связи E<sub>M-M</sub> для переходных металлов (Au, Cu, Ag, Pt, Ni, Pd) составляет 200-1000 кДж/моль, а для кремния  $E_{Si-Si} = 176$  кДж/моль). Поскольку  $E_{M-M}$  больше, чем  $E_{M-Si}$ , то перераспределение Si в капле должно снижать  $\alpha_{SL}$ . Это приводит к тому, что капля жидкости на вершине ННК при более высокой Т начинает растекаться, уменьшая угол β.

Таким образом,  $\alpha_{SL}$  может уменьшаться при увеличении T, а смачивание улучшаться, по причине интенсификации растворения Si в жидкой фазе М-катализатора. Равновесные составы контактирующих фаз будут изменяться с температурой, меняется, очевидно, и степень смачиваемости в системе.

Особенностью явления температурной релаксации краевого угла в процессе ПЖК-роста вследствие растекания капли М-катализатора на вершине ННК является одновременное изменение поперечного размера кристалла

$$\frac{d(\sin \varphi)}{dT} = \frac{d((1 - (r/R)^2)^{1/2})}{dT},$$
(2)

где r - радиус HHK, R - радиус капли катализатора.

Зависимость  $\phi$ =f(T) при физическом смачивании каплей катализатора вершины ННК можно описать количественно, если известно r/R = f(T).

- 1. Shchetinin A.A. Mechanism for early stages of Si whisker growth /A.A. Shchetinin, B.M. Darinskii, O.D. Kozenkov, V.A. Nebol'sin //Inorganic Materials. 1990. V.26. N.7. –P.1353-1357
- 2. Nebol'sin V.A. A New Understanding of the Vapor-Liquid-Solid Mechanism of Nanowire Growth / V.A. Nebol'sin, A.Y. Vorob'ev, N. Swaikat // Inorganic Materials. 2020. V. 56. N. 4. P. 346-352.

УДК: 532.135

# ЗАВИСИМОСТЬ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ УГЛЕВОДОРОДАХ ОТ ДЛИТЕЛЬНОСТИ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Д.И. Макарьев<sup>1</sup>, А.Н. Резниченко<sup>2</sup>, Н.А. Швецова<sup>3</sup>
<sup>1</sup> Старший научный сотрудник, д.т.н., dmakarev@rambler.ru
<sup>2</sup>Научный сотрудник, reznichenkoan@yahoo.com
<sup>3</sup>Научный сотрудник, к.ф.-м.н., nashvecova@sfedu.ru
Южный федеральный университет, 344090, Ростов-на-Дону, Россия

Исследованы процессы релаксации реологических характеристик высокомолекулярных углеводородов после высокоинтенсивных воздействий ультразвука высокой интенсивности. Показаны изменения значений кинематической вязкости композиций высокомолекулярных углеводородов от ультразвукового воздействия различной длительности при постоянных частотах и мощностях. Приведены результаты зависимости реологических характеристик данных веществ от времени в результате релаксационных процессов.

Ключевые слова: кинематическая вязкость, релаксация, ультразвук, нефть.

В связи с истощением запасов легкой нефти в мире постоянно растет доля добычи нефти тяжелой. Однако повышенная вязкость тяжелых сортов нефти существенно затрудняет их добычу [1]. Одним из методов, способных снизить вязкость такой нефти без существенных энергетических затрат и экологического ущерба, является воздействие ультразвуковым (УЗ) излучением высокой интенсивности.

Целью данной работы было установление влияния длительности ультразвукового воздействия на кинематическую вязкость образцов высокомолекулярных углеводородов с учетом последующей релаксации.

В данном исследовании объектом был акустический фантом — аналог нефти-93, полностью соответствующий нефти-93 по своему химическому составу, а также кинематической вязкости и плотности. Воздействие проводилось на образцы объемом 200 мл. Частота и мощность УЗ воздействия были фиксированы и составляли соответственно 40 кГц и 20 Вт. Длительность ультразвукового воздействия была представлена следующим набором значений: 60, 120. 180, 300, 600 и 1200 с. Исходные значения кинематических вязкостей образцов находились в интервале от 1220 до 1270 мм²/с.

На рисунке приведен график зависимости кинематической вязкости образцов от времени в первые часы после воздействия. Из графика видно, что в данном случае эффект имел прямую зависимость от энергетики воздействия и выполнялось условие: «чем дольше воздействие, тем больше увеличение вязкости образцов». Характер данной зависимости не изменяется со временем в отличие от ранее изученных нефтепродуктов, таких как мазуты М-100 и М-40 [2].

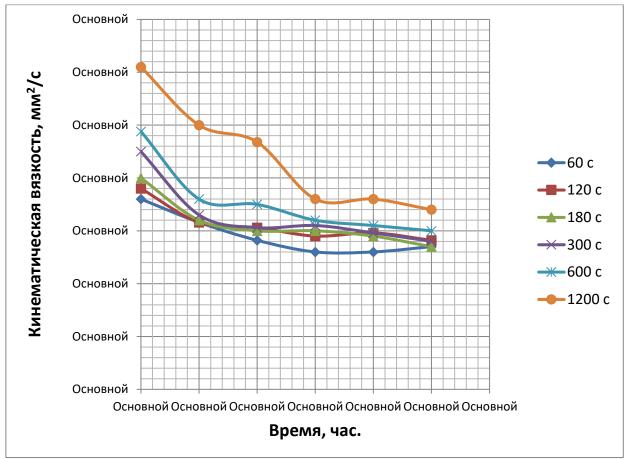


Рисунок. Общая зависимость от времени релаксационного процесса приведенной к 25 °C кинематической вязкости образцов акустического фантома тяжелой нефти плотностью 0.93 г/см<sup>3</sup> после высокоинтенсивной ультразвуковой обработки с частотой 40 к $\Gamma$ ц, мощностью 20Вт и указанными на графике временами УЗ воздействия. Первые часы после воздействия

Это означает, что выбор оптимального времени воздействия или периодичности воздействия следует делать исходя из конкретных условий применения, руководствуясь правилом минимально необходимого воздействия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности. Проект № FENW-2023-0010/Г30110/23-11-ИФ). Использовано оборудование Центра коллективного пользования НИИ физики Южного федерального университета «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел».

- [1]. Галиуллин Э.А. Новые технологии переработки тяжелых нефтей и природных битумов / Э.А. Галиуллин, Р.З. Фахрутдинов // Вестник Технологического университета. 2016. Т. 19. № 4. С. 47-51.
- [2]. Makarev D.I. Anomalous viscosity of high-molecular petroleum fractions in process of relaxation after high-intensity ultrasonic treatment / D.I. Makarev, A.N. Rybyanets, V.L. Sukhorukov // Indian Journal of Science and Technology. 2016. V. 9. I. 29. P. 334-340.

# ВЛИЯНИЕ ИЗБЫТОЧНОГО ОКИСЛЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO НА ИЗМЕНЕНИЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ ПРИ ОТЖИГАХ

Я.О.Елисеева<sup>1</sup>, Я.В.Майорова<sup>2</sup>, В.А.Фошин<sup>3</sup>, О.В.Стогней<sup>4</sup>

<sup>1</sup>студент, yanaelis2003@mail.ru

<sup>2</sup>студент, mauorova.yana2003@gmail.com

<sup>3</sup>аспирант, vadim.foshin@yandex.ru

<sup>4</sup>профессор кафедры ТТЭ, sto.sci.vrn@gmail.com

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

Исследовано влияние вакуумного отжига на величину магниторезистивного эффекта в многослойных наноструктурах (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO, содержащих различное количество кислорода, вводимого в образцы при их получении. Исследованы образцы с разной толщиной нанослоев ZnO и одинаковой толщиной композитных слоёв CoFeB-SiO<sub>2</sub>. Установлено, что увеличение количества кислорода в (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO приводит к повышению электросопротивления в несколько раз. Количество введённого кислорода влияет на характер изменения магниторезистивного эффекта наноструктур (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO после отжигов. При незначительном количестве дополнительного кислорода магнитосопротивление образцов увеличивается после отжигов в три раза, достигая 12 %. При избыточном окислении образцов магнитосопротивление становится нечувствительным к отжигам, сохраняя исходные значения  $4.5-5\,\%$ .

Ключевые слова: магниторезистивный эффект, термообработка, многослойная наноструктура

(MHC) CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO Многослойные наноструктуры реактивным напылением в смешанной среде (Ar+O2). Толщина композитных слоёв (CoFeB-SiO<sub>2</sub>) во всех образцах была одинаковой и составляла 1,1 нм, в то время как толщина слоев ZnO изменялась от 1.2 до 4 нм. Получено две партии образцов при разном парциальном давлении кислорода: 0,3·10<sup>-5</sup> Торр и 1,0·10<sup>-5</sup> Торр, соответственно. Количество избыточного кислорода в полученных пропорционально парциальному давлению кислорода. Многослойность образцов подтверждается данными малоугловой рентгеновской рефлектометрии И высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии поперечного среза.

Увеличение парциального давления кислорода в камере приводит к росту сопротивления образцов как минимум в несколько раз (рис. 1, а). При этом количество избыточного кислорода не влияет на величину магнитосопротивления (МС) образцов с одинаковой толщиной слоёв ZnO (рис. 1, б). Полученные зависимости практически совпадают (рис. 1, б). Это позволяет предполагать, что избыточный кислород в основном аккумулируется фазой ZnO.

Влияние вакуумных отжигов приводит к принципиально разным результатам в зависимости от количества избыточного кислорода в образце. В МНС содержащих незначительное количество избыточного кислорода  $(0,3\cdot10^{-5}$  Торр при получении) отжиги приводят к увеличению МС — чем выше

температура отжига, тем выше значение МС, измеренное после охлаждения образцов (рис. 2 а). Максимальные значения МС (до 12 %) наблюдаются после отжига при 400 °C. Увеличение количества избыточного кислорода в образцах (1·10<sup>-5</sup> Торр при получении) приводит к тому, что МС становится практически нечувствительным к отжигам. Отжиги, проведённые при температурах от 160 °C до 400 °C, практически не меняют величину МС образцов (рис. 2,б). Полученные результаты объясняются с точки зрения наличия магнитных поляронов в слоях ZnO и изменения их плотности при термическом воздействии.

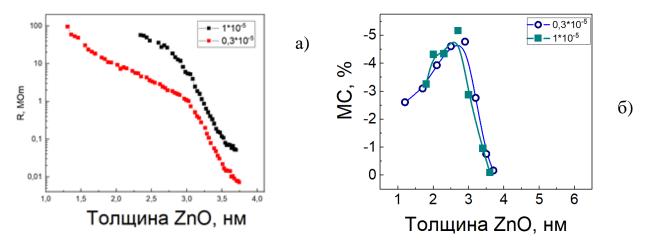


Рисунок 1. Зависимость электрического сопротивления (а) и магниторезистивного эффекта (б) MHC CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO от толщины слоёв ZnO в исходном состоянии. Приведены данные для образцов двух партий, полученных при разном парциальном давлении кислорода

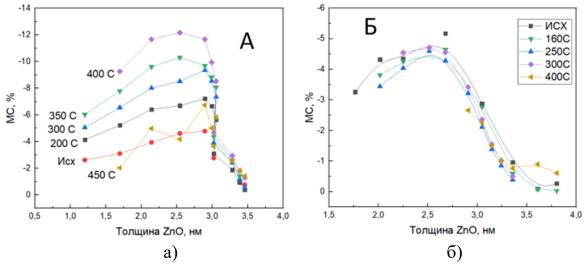


Рисунок 2. Влияние отжигов на магниторезистивный эффект MHC CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO, полученных при разном парциальном давлении кислорода:  $0.3\cdot10^{-5}$  Topp (a) и  $1.0\cdot10^{-5}$  Topp (б). Приведены значения для разных толщин слоёв ZnO

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта FZGM-2023-0006.

# ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO

Я.В.Майорова<sup>1</sup>, Я.О.Елисеева<sup>2</sup>, В.А.Фошин<sup>3</sup>, О.В.Стогней<sup>4</sup>

<sup>1</sup> студент, mauorova.yana2003@gmail.com

<sup>2</sup> студент, yanaelis2003@mail.ru

<sup>3</sup>аспирант, vadim.foshin@yandex.ru

<sup>4</sup>профессор кафедры ТТЭ, sto.sci.vrn@gmail.com

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

Исследовано влияние термического нагрева в вакууме на электросопротивление и магниторезистивный эффект многослойных наноструктур (CoFeB-SiO<sub>2</sub>)/ZnO с разной толщиной слоёв ZnO (от 1 до 5 нм). Показано, что по сравнению с чистым композитом CoFeB-SiO<sub>2</sub> введение в него нанослоёв ZnO приводит к увеличению магнитосопротивления в два раза. Установлено, что вакуумные отжиги многослойных образцов при температурах не превышающих  $450\,^{\circ}$ C приводят к росту магнитосопротивления более чем в 2 раза, с максимальным значением  $9,5\,\%$ .

Ключевые слова. Многослойная наноструктура, термообработка, магниторезистивный эффект.

Многослойные наноструктуры (MHC) CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO получены в среде чистого аргона методом послойного ионно-лучевого напыления двух материалов: наногранулированного композита CoFeB-SiO<sub>2</sub> и оксида цинка ZnO. Толщина композитных слоёв (CoFeB-SiO<sub>2</sub>) во всех образцах была одинаковой и составляла 1,1 нм, в то время как толщина слоев ZnO изменялась от 1 до 5 нм.

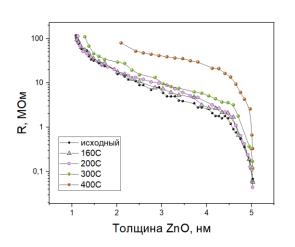


Рис. 1. Зависимость сопротивления МНС CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO от толщины слоя ZnO. Приведены данные для исходного состояния и для отожженных МНС

основе Ha исследования зависимости сопротивления МНС от толщины слоев ZnO установлено, что вплоть до толщины 4.5 нм слои ZnO являются дискретными и не образуют сплошную оксидную прослойку. При превышении порогового значения 4.5 нм слои ZnO становятся сплошными. При этом сопротивление многослойных наноструктур резко начинает уменьшаться поскольку (рис. 1) проводимость ZnO значительно выше проводимости композитных слоёв.

Исследованные МНС проявляют отрицательный туннельный магниторезистивный эффект, причём, наличие дискретных слоев ZnO в наноструктуре привело к увеличению

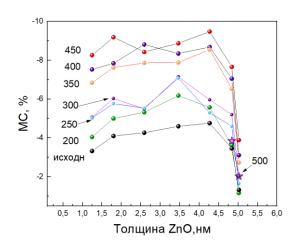


Рис. 2. Зависимость магнитосопротивления МНС CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZnO от толщины слоя ZnO. Приведены данные для исходного состояния и для отожжённых МНС

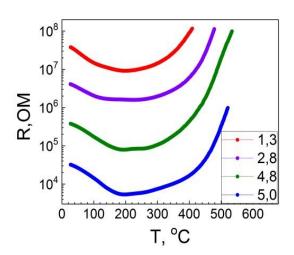


Рис. 3. Температурная зависимость электросопротивления МНС CoFeB-SiO $_2$ /ZnO, полученных в чистом Ar (толщина ZnO приведена на вставке в нм)

Толщина слоя ZnO не влияет на характер изменения электросопротивления **MHC** при нагреве: образцы с разной толщиной слоев ZnO абсолютно тоививодп одинаковую зависимость (рис. 3): монотонный рост сопротивления при температурах, превышающих 200 °C. Толщина ZnO определяет величину лишь абсолютного сопротивления образцов. Также отжиг приводит к увеличению значения остаточного сопротивления, измеряемого при 23 °C (рис. 1).

Отжиги приводят к увеличению магниторезистивного эффекта (рис. 2). Чем выше температура отжига, тем больше величина МС. Максимальные значения МС (9,5 %) наблюдаются после отжига при 450 °C (рис. 2).

Наблюдаемые эффекты (увеличение МС при введении слоёв ZnO и увеличение MC после отжига) объясняются c точки зрения существования магнитных поляронов в фазе ZnO. Поляроны формируются в окрестности атомов ферромагнитных элементов, растворенных В ZnO. Наличие поляронов магнитных приводит К появлению дополнительной составляющей суммарной проводимости через МНС. Эта составляющая, несмотря «прыжковый» характер, является спин-зависимой И. следовательно, вносит вклад в магниторезистивный

эффект, увеличивая его. Влияние отжигов приводит к изменению соотношения между прыжковой проводимостью по обычным дефектам и проводимостью по магнитным поляронам, что сказывается на величине МС.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта FZGM-2023-0006.

# ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛА ТВЁРДОГО РАСТВОРА Zn<sub>0.75</sub>Mn<sub>2.25</sub>As<sub>2</sub>

В.С. Захвалинский<sup>1</sup>, А.О. Спицын<sup>2</sup>, Фержушия Мериям <sup>3</sup>, М.Н. Япрынцев<sup>4</sup>, А.В. Борисенко<sup>1,5</sup> <sup>1</sup>Ведущий научный сотрудник лаборатории «Перспективных материалов и технологий» НИУ «БелГУ», zakhvalinskii@bsuedu.ru

<sup>2</sup>Студент, alekseyspitsin@mail.ru <sup>3</sup> Студент, 1747669@bsuedu.ru

<sup>4</sup> Научный сотрудник ЦКП «Технологии и Материалы» НИУ «БелГУ» yaprintsev@bsuedu.ru <sup>5</sup>Преподаватель кафедры ИКТД ОВД, Белгородского юридического института МВД России имени И.Д. Путилина, borisenko02.94@mail.ru

В работе представлены результаты исследования температурных зависимостей электропроводности и магнетосопротивления монокристаллов твердого раствора  $Z_{0.75}M_{0.25}A_{s2}$ . Зависимость удельного сопротивления исследована в температурном диапазоне от 10 K до 320 K в нулевом магнитном поле и в поле B=1 Тл. Наблюдается отличие температурных зависимостей при охлаждении и нагревании образца, при охлаждении удельное сопротивление образца резко падает в интервале температуры  $15\div 8$  K, при понижении температуры до 15 K концентрация носителей заряда возрастает на порядок до  $n=14\bullet 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , а подвижность носителей заряда уменьшается при охлаждении с величины  $\mu=0.150 \text{ см}^2\bullet B^{-1}\bullet \text{ c}^{-1}$  до  $\mu=0.026 \text{ см}^2\bullet B^{-1}\bullet \text{ c}^{-1}$ .

Ключевые слова: магнитный полупроводник, монокристалл, удельное электросопротивление, магнетосопротивление, концентрация носителей заряда.

Впервые тройной магнитный полупроводник  $ZnMn_2As_2$ , упоминается в работе [1], а кристаллическая структура монокристалла описана в работе [2]. Расчет зонной структуры для кристаллической структуры  $ZnMn_2As_2$  был сделан в работе [3]. Применение нейтронографии позволило уточнить кристаллическую структуру и описать сложные магнитные свойства  $ZnMn_2As_2$  [4]. В работе [5] была построена диаграмма состояния квазибинарной системы  $Zn_3As_2-Mn_3As_2$  в которой была определена область существования твердых растворов вблизи  $ZnMn_2As_2$ . В настоящей работе мы сообщаем о проведенном впервые исследовании электропроводности и магнетосопротивления монокристалла твёрдого раствора  $Zn_{0.75}Mn_{2.25}As_2$ .

Монокристаллы  $Zn_{0.75}Mn_{2.25}As_2$  были получены модифицированным методом Бриджмена, методом порошкового рентгенофазового анализа установлено соответствие гексагональной пространственной группе P-3m1, с параметрами элементарной ячейки a=4.104033 Å, b=4.104033 Å, c=6.547290 Å,  $\alpha=\beta=90^\circ$ ,  $\gamma=120^\circ$ . Пространственная группа совпадает с пространственной группой 164: P-3m1 для  $ZnMn_2As_2$  (ICDD 01-077-0769 DB card number). Исследование гальваномагнитных свойств образцов проведены по шестизондовой схеме, большая грань параллелепипеда образца соответствовала плоскости скола монокристалла перпендикулярной оси c. Измерения удельного сопротивления,  $\rho$ , было проведено на установке на базе криостата замкнутого

цикла CRYOGENICS в интервале температур от 10К до 320 К в нулевом магнитном поле и в поле B=1Тл. монокристалла  $Zn_{0.75}Mn_{2.25}As_2$  от температуры в магнитном поле и в его отсутствие, при нагреве и охлаждении.

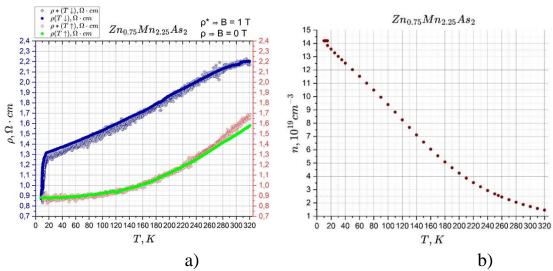


Рисунок. Зависимости удельного электросопротивления от температуры (a), где символы  $\rho^*(T\downarrow)$  и  $\rho^*(T\uparrow)$  обозначают температурную зависимость удельного электрического сопротивления  $Zn_{0.75}Mn_{2.25}As_2$  в магнитном поле B=1Tл при охлаждении и нагревании, соответственно, а символы  $\rho(T\downarrow)$  и  $\rho(T\uparrow)$  представляют собой те же зависимости, но уже без магнитного поля. На рис. (b) приведена, рассчитанная из эффекта Холла, температурная зависимость концентрации носителей заряда, n, полученная при охлаждении образца в нулевом магнитном поле.

Как видно из рисунка (а) монокристалл  $Zn_{0.75}Mn_{2.25}As_2$  демонстрирует при охлаждении металлический ход зависимости вплоть до температуры,  $T_0 \approx 15$  К. Вблизи температуры  $T_0$  наблюдается изменение хода кривой, заключающееся в резком уменьшении удельного электрического сопротивления. На рисунке (b) видно, что концентрация носителей заряда растет с понижением температуры до  $n=14 \cdot 10^{19} \text{см}^{-3}$  и после температуры  $T_0 \approx 15$  К наблюдается плато, а подвижность носителей заряда уменьшается с величины  $\mu=0.150$  см $^2 \cdot \text{B}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$  до  $\mu=0.026$  см $^2 \cdot \text{B}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ . Можно предположить, что  $T_0 \approx 15$  К является температурой начала сверхпроводящего фазового перехода второго рода.

- 1. Kasaya M. Magnetoconductance of ZnMn2As2. / Kasaya M. // Journal of the Physical Society of Japan. 1969.V. 27(2)-p.p. 507–507.
- 2. Dvorkin A.A. Synthesis and structure of ZnMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> / A.A. Dvorkin, I.A. Verin, V.S. Zakhvalinskii, A.N. Nateprov // Sov. Phys. Crystallogr. 1991.V. 36 P.785.
- 3. Zakhvalinskii V. S. Calculation of the band structure and density of localized states of materials of the quasi-binary system Zn<sub>3</sub>As<sub>2</sub>–Mn<sub>3</sub>As<sub>2</sub>. / Zakhvalinskii V. S., Nikulicheva T. B., Pilyuk E. A., Kubankin A. S., Ivanov O. N., & Morocho A. A. // Solid State Communications. 2021. V.328 –P. 114237.
- 4. Mirebeau I. Chemical and magnetic order in  $ZnMn_2As_2$  as studied by neutron diffraction / I. Mirebeau, E. Suard, M. Hennion, M.T. Fernandez-Diaz, A. Daoud-Aladine, A. Nateprov. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1997. V.175 –p.p.290-298.
- 5. Zakhvalinskii V. S. Dubble diagram of the system Zn<sub>3</sub>As<sub>2</sub>-Mn<sub>3</sub>As<sub>2</sub>. / V. S. Zakhvalinskii, R.Iu. Lialikova, A.N. Nateprov. // Izv. Acad. of Sci. Mold. Fys. and Tekhn. 1991V.1,4, p.p.87-89.

# РЕЛАКСАЦИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ ПУТЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ В УСЛОВИЯХ ОКРУЖАЮЩЕГО ВАКУУМА

А.Н. Олейник<sup>1</sup>, А.А. Подойницын<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Старший научный сотрудник, oleynik\_a@bsuedu.ru

<sup>2</sup>Аспирант, лаборант-исследователь, 1324990@bsuedu.ru

Лаборатория радиационной физики, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия

Электронная эмиссия в монокристаллах ниобата и танталата лития при их термическом возбуждении экспериментально исследована. Описаны эффекты моноэнергетичности и самофокусировки генерируемого электронного потока. Связь динамики электронного потока с динамикой распределения индуцируемого заряда на полярных поверхностях монокристаллов ниобата и танталата лития обсуждается.

Ключевые слова: пироэлектрический эффект, электронная эмиссия, ниобат лития, танталат лития.

Внешне, пироэлектрический эффект проявляется в электризации граней пироэлектриков, которые не параллельны вектору спонтанной поляризации образца. В условиях окружающей атмосферы, индуцируемый заряд интенсивно экранируется свободными зарядами из воздуха, что может вызывать микроразряды на поверхности пироэлектрика, ионизацию молекул и т.д. Однако, в условиях окружающего вакуума открывается другой путь для релаксации возбуждения эмиссия электронов полученного поверхности пироэлектрических кристаллов. Эмитирующий электронный поток имеет относительно небольшую величину (около 1 нА), но при этом энергия электронов может достигать единиц и десятков кэВ, что позволяет использовать пироэлектрический эффект для генерации и ускорения электронов (т.н. пироэлектрический ускоритель), а также рентгеновского излучения, ионов и нейтронов.

В нашей работе был экспериментально исследован эффект электронной эмиссии с полярных поверхностей монодоменных монокристаллов ниобата и танталата лития (производство – Кольский центр РАН). Были исследованы ток и энергия генерируемого электронного потока, получена его вольтамперная характеристика (ВАХ), которая схожа с ВАХ Таунсендовского разряда. Однако, более внимательный анализ экспериментальных данных показывает, что при электронной эмиссии с поверхности пироэлектрических кристаллов наблюдается лавинный разряд, природа которого отличается от Таунсендовского разряда и связана со вторичной электронной эмиссией [1].

Также были исследованы пространственно-временные характеристики распространения потока электронов с поверхности пироэлектрических

кристаллов. Подтверждено наличие самофокусировки электронного потока [2] и узкий разброс электронов по энергии [3]. Экспериментальное исследование структуры фокального пятна и компьютерное моделирование показывает наличие зависимости энергии электронов от фокусного расстояния, и тем самым, наличия продольной структуры в фокальной области [4]. Эксперименты по визуализации электронного потока показывают наличие помимо фокального пятна электронов еще нескольких спутников-пятен, т.е. периферийных электронных потоков, которые расположены симметрично относительно центрального потока.

Динамика эмитирующего электронного потока должна определяться конфигурацией электрического поля, генерируемого индуцируемым зарядом на поверхности пироэлектрических кристалла. Следовательно, распределение электрического заряда на полярной поверхности при изменении температуры образца, релаксация заряда и эволюция распределения определяют экспериментально наблюдаемую динамику электронного потока. Подход к решению задачи определения заряда на поверхности пироэлектрического кристалла был предложен около 10 лет назад [5]. Полученное радиальное распределение заряда позволило объяснить эффект самофокусировки и удовлетворительно описать положение фокусного пятна, однако наблюдаемые нами дополнительные потоки электронов, оно объяснить не может. Нами предложен другой подход к определению распределения заряда (точнее в нашем подходе, электрического потенциала) на полярной поверхности монокристаллов ниобата лития с учетом возможного азимутального характера распределения. Ожидается, что прямое измерение распределения электрического потенциала объяснить поведение электронного потока, эмитирующего позволит поверхности монокристаллов ниобата и танталата лития, а также даст новую информацию об взаимосвязи тепловых и электрических свойств в исследуемых монокристаллах.

- 1. Oleinik A.N. I-V curve of the electron flow generated during a pyroelectric effect in lithium tantalate single crystal in vacuum conditions / A.N. Oleinik, M.E. Gilts, P. Karataev, et.al. // Europhysics Letters. 2023. T. 142. C. 34001.
- 2. Brownridge J.D. Self-Focused Electron Beams Produced by Pyroelectric Crystals on Heating or Cooling in Dilute Gases / J.D. Brownridge, S. M. Shafroth. // Applied Physics Letters. 2001. T. 79. C. 3364.
- 3. Brownridge J.D. Observation of multiple nearly monoenergetic electron production by heated pyroelectric crystals in ambient gas/ J.D. Brownridge, S. M. Shafroth. // Applied Physics Letters. 2001.-T.78.-C.1158.
- 4. Oleinik A.N. Regulation of particle generation processes in a pyroelectric accelerator using geometry / A.N. Oleinik, M.E. Gilts, P.V. Karataev, A.S. Kubankin, P.G. Shapovalov, V.S. Sotnikova // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2024. T.1065. C.169537.
- 5. Ghaderi R. Determination of surface electric charge profile in pyroelectric crystals / R. Ghaderi, F.A. Davani // Applied Physics Letters. 2014. T. 105. C. 232906.

# ВЛИЯНИЕ ПРОСЛОЕК a-Si И $Ta_2O_5$ НА СТЕПЕНЬ НЕЛЕНЕЙНОСТИ ВАХ В МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУРАХ КОНДЕНСАТОРНОГО ТИПА $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_{x}(SiO_{2})_{100-x}/LiNbO_{3}/Cr/Cu/Cr$

А. В.Ситников<sup>1</sup>, Ю. Е.Калинин<sup>2</sup>, И. В.Бабкина<sup>3</sup>, А. Е.Никонов<sup>4</sup>, А. Р.Шакуров<sup>5</sup>, М.Н. Копытин<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Профессор, sitnikov04@mail.ru

<sup>2</sup>Профессор, kalinin48@mail.ru

<sup>3</sup>Доцент, ivbabkina@mail.ru

<sup>4</sup>Инженер-исследователь, nikonov.sasha1994@gmail.com

<sup>5</sup>Аспирант, aleks.shakurov@mail.ru

<sup>6</sup>Доцент, michaelkopitin@mail.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В работе представлены результаты изучения влияния прослоек а-Si и Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> на процессы переключения резистивных состояний (РС), нелинейности ВАХ в низкоомном индуцированном РС (LRS) и механизмы проводимости в зависимости от тока протекания  $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}/LiNbO_3/Cr/Cu/Cr/ситалл,$ исследуемые структуры  $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}/LiNbO_3/a-Si/Cr/Cu/Cr/ситалл$ И  $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100}$ <sub>x</sub>/LiNbO<sub>3</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Cr/Cu/Cr/ситалл. Показано, что во всех структурах наблюдается биполярное резистивное переключение. Нелинейность BAX исследуемых структур в LRS состоянии связана с отсутствием сплошных проводящих каналов между металлическими электродами в низкоомном резистивном состоянии за счет режима многофиламентного резистивного переключения, реализуемого из-за использования нанокомпозита металл-диэлектрик в качестве контактного слоя. Выявлены лимитирующие механизмы электропереноса в исследуемых структурах и причины их реализации.

Ключевые слова: Резистивное переключение, нанокомпозит, мемристорный эффект, ниобат лития

Методом ионно-лучевого распыления были получены конденсаторные структуры M/HK/Д1/M и M/HK/Д1/Д2/M, где в качестве HK выступали пленки  $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_X(SiO_2)_{100-X}$ , а в качестве Д1 -  $LiNbO_3$  и Д2 – a-Si или  $Ta_2O_5$ . Трехслойные проводники Cr-Cu-Cr использовались в качестве нижнего электрода, верхний электрод был сформирован из пленки Cu.

Анализ ВАХ трех исследуемых структур показал наличие в них обратимых биполярных резистивных переключений в широком интервале концентрации металлической фазы НК. Еще одной характерной особенностью представленных зависимостей является их значительная нелинейность в области малых значений напряжений, подаваемых на образец, что сказывается на практически значимых параметрах мемристивных элементов таких как отношение I(U)/I(U/2) (Рис.).

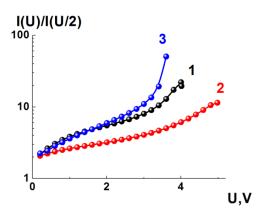


Рисунок. Зависимости отношения I(U)/I(U/2) от напряжения для мемристивных структур:

- 1 Cu/(CoFeB)<sub>33.4</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66.6</sub>/LiNbO<sub>3</sub>/Cr/Cu/Cr/ситалл,
- 2 Cu/(CoFeB)<sub>33.4</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66.6</sub>/LiNbO<sub>3</sub>/Si/Cr/Cu/Cr/ситалл,
- 3 Cu/(CoFeB)<sub>33.4</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66.6</sub>/LiNbO<sub>3</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Cr/Cu/Cr/ситалл

Изучение влияния прослоек a-Si и  $Ta_2O_5$  на степень нелинейности BAX исследуемых мемристивных структур показало, что прослойка оксида тантала увеличивает значения отношения I(U)/I(U/2) в LRS состоянии, тогда как a-Si, напротив, способствует понижению этого параметра относительно структуры, не имеющей прослоек. В общем случае нелинейность BAX в исследуемых структурах связана с отсутствием сплошных проводящих каналов между металлическими электродами в низкоомном резистивном состоянии за счет режима многофиламентного резистивного переключения, реализуемого из-за использования нанокомпозита металл-диэлектрик в качестве контактного слоя. Однако выявлено, что лимитирующие механизмы электропереноса в исследуемых структурах достаточно сильно различаются.

Так для структуры без дополнительных прослоек в LRS состоянии при низких токах протекания реализуется эмиссия Шоттки, а при высоких значениях тока проводимость осуществляется в соответствии с механизмом Пула – Френкеля. В структуре с прослойкой аморфного кремния вследствие формирования прослойки  $SiO_2$  между слоями  $LiNbO_3$  и Si, определяющим механизмом электропереноса является механизм термически облегченного туннелирования через диэлектрический барьер практически во всем диапазоне напряжений вплоть до напряжения переключения структуры в высокоомное состояние. Наличие прослойки  $Ta_2O_5$  в структуре, с одной стороны, приводит к доминированию эмиссии Шоттки из металлической фазы НК контакта при низких значениях тока по причине высоких токов утечки через дефекты прослойки  $Ta_2O_5$ , а, с другой стороны, при высоких значениях тока наличие туннельного барьера и насыщение токов утечки приводит к смене механизма электропереноса через данную структуру на механизм термически облегченного туннелирования через прослойку оксида тантала.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации (проект № FZGM-2023-0006).

# ВЛИЯНИЕ БОРА НА ЦИКЛИЧЕСКУЮ ВЫНОСЛИВОСТЬ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР НАНОКОМПОЗИТ CoFeB-SiO<sub>2</sub>/ZrO<sub>2</sub>(Y)

И.В. Бабкина<sup>1</sup>, А.Р. Шакуров<sup>2</sup>, А.Е. Никонов<sup>3</sup>, А.В. Ампилогов<sup>4</sup>, А.В. Ситников<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Доцент, ivbabkina@mail.ru

<sup>2</sup>Аспирант, aleks.shakurov@mail.ru

<sup>3</sup>Инженер-исследователь, nikonov.sasha1994@gmail.com

<sup>4</sup>Аспирант, artyom.ampilogov@gmail.com

<sup>5</sup>Профессор, sitnikov04@mail.ru

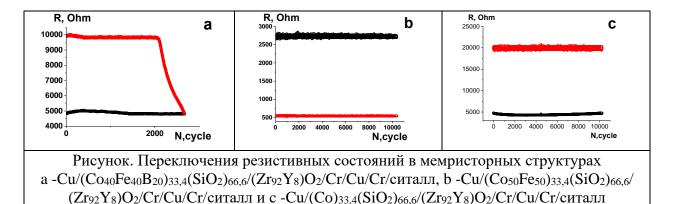
ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В работе представлены результаты исследования влияния бора в нанокомпозите  $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}$  на циклическую устойчивость переключения резистивных состояний в мемристивной структуре  $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}/(Zr_{92}Y_8)O_2/Cr/Cu/Cr$  /ситалл. Установлено что взаимодействие бора с диэлектрической прослойкой  $(Zr_{92}Y_8)O_2$  стабилизирует кислородные вакансии в каналах проводимости функционального слоя.

Ключевые слова: мемристор, резистивное переключение, нанокомпозит, тонкие пленки, циклическая выносливость.

Мемристоры - это элементы, которые способны обратимо менять свое состояние зависимости OT величины направления В И электрического поля высокой напряженности приложенного к образцу. Это свойство дает возможность рассматривать их как новую элементную базу электроники для использования в многоуровневых энергонезависимых запоминающих устройствах, а также в бурно развивающихся в настоящее время нейроморфных приложениях, таких как распознавание образов, речи и т.п. Для реализации многофиламентного резистивного переключения функционального слоя нами было предложено использовать нанокомпозит (НК) металлдиэлектрик в качестве одного из электродов в мемристивной структуре.

Методом ионно-лучевого распыления с использованием теневых масок исследованы структуры  $Cu/(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}/$ И  $(Zr_{92}Y_8)O_2/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co_{50}Fe_{50})_x(SiO_2)_{100-x}/(Zr_{92}Y_8)O_2/Cr/Cu/Cr/$  ситалл и  $Cu/(Co)_x(SiO_2)_{100-x}/(Zr_{92}Y_8)O_2/Cr/Cu/Cr/ситалл.$  Исследования мемристивных свойств данных образцов показали наличие в них биполярного резистивного переключения в широком интервале концентраций металлической фазы НК до порога перколяции; высокую временную стабильность индуцированных резистивных состояний; возможность индуцировать любые резистивные состояния в интервале от наибольшего (Roff) до наименьшего (Ron) значений для данных структур (пластичность). Величина отношения Roff/Ron составляла более 10 единиц, однако было обнаружено существенное различие в циклической выносливости переключения резистивных состояний (см. рис.) Видно, что в структуре, где в состав композита входит бор (рис. а), количество обратимых резистивных переключений ограниченно количеством 2000 циклов. После этого мемристор необратимо деградирует в низкоомное резистивное состояние. В структурах, где бор отсутствует, такого эффекта не наблюдается.



Основным механизмом резистивного переключения в данных структурах является образование и разрушение каналов проводимости в тонкой, порядка 15 нм, диэлектрической прослойке оксида циркония стабилизированного иттрием. Данные каналы состоят из областей с повышенной концентрацией кислородных вакансий. Электромиграция кислородных вакансий действием электрического поля высокой напряженности (более 10^5 В/см) является физической причиной мемристивных свойств исследуемых структур. Если мы рассмотрим структуру НК  $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})_x(SiO_2)_{100-x}$ , то должны согласиться, что в процессе самоорганизации при совместном распылении составной мишени из металлического сплава Со<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub> и навесок из кварца при высокой скорости охлаждения пленки на подложке, до 10<sup>8</sup> град/с, трудно ожидать формирование термодинамически равновесной гетерогенной структуры. Атомы бора и атомы металла достаточно высокой концентрации внедрены в диэлектрическую матрицу НК. Через интерфейс НК-диэлектрик атомы диффундировать в пленку  $(Zr_{92}Y_8)O_2$ . Также следует учитывать, что в процессе перезаписи резистивного состояния на структуру воздействует не только электрическое поле высокой напряженности, но и протекает достаточно большой ток. При этом весьма ограниченные области (несколько нм в диаметре) существенно проводящих филаментов могут нагреваться, способствует ускорению диффузионных процессов. По всей видимости, взаимодействие атомов бора с оксидом циркония стабилизированного иттрием стабилизации кислородных вакансий, что препятствует их приводит к и переключению мемристивной структуры в высокоомное состояние. При отсутствии бора в составе НК такого эффекта не наблюдалось.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-29-00215.

# СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ НАНОГРАНУЛИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ СИСТЕМ (CoFe)<sub>x</sub>(MgF<sub>2</sub>)<sub>100-x</sub> И (CoFeZr)<sub>x</sub>(MgF<sub>2</sub>)<sub>100-x</sub> ДОПЕРКОЛЯЦИОННОГО СОСТАВА

Т.В. Трегубова<sup>1</sup>, А.В. Костюченко<sup>2</sup>, О.В. Стогней<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Научный сотрудник, ttv1507@ya.ru

<sup>2</sup>Доцент, av-kostuchenko@mail.ru

<sup>3</sup>Профессор, sto.sci.vrn@gmail.com

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В работе представлены результаты исследования методами рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии фазового состава пленочных наногранулированных композитов CoFe-MgF $_2$  и CoFeZr-MgF $_2$  с доперколяционным составом (содержание металлической фазы 20-25%).

Пленки наногранулированных композитов были получены ионно-лучевым распылением составных мишеней CoFe-MgF $_2$  и CoFeZr-MgF $_2$ . Установлено, что в зависимости от условий взаимного расположения компенсатора и подложки в процессе ионно-лучевого распыления образуются композиты с аморфной или нанокристаллической матрицей. В исходных пленках CoFe-MgF $_2$  нанокристаллическая матрица представлена преимущественно тетрагональной  $\alpha$ -MgF $_2$  ( $\alpha$  = 9,93 Å,  $\alpha$  = 6,17 Å), а металлическая фаза — кристаллическим CoFe. В то же время, в пленках CoFeZr-MgF $_2$  нанокристаллическая матрица представлена тетрагональным  $\beta$ -MgF $_2$  ( $\alpha$  = 4,62 Å,  $\alpha$  = 3,05 Å), а вместо CoFeZr наблюдаются интерметаллиды типа Co $_2$ 3Zr $_6$ 5, Fe $_2$ 3Zr $_6$ 6, Zr $_3$ Fe.

В обеих системах в результате ТО (220-300°C) в вакууме происходит формирование или укрупнение кристаллической фазы с кубической решеткой СоFe (a = 7,01 Å). При более высоких температурах ТО ( $\geq$ 350°C) наблюдается окисление металлической фазы с образованием Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> и CoO, что, вероятно, связано с кислородом, адсорбированным на поверхности или остаточным в Фаза β-MgF<sub>2</sub> в Zr-содержащих системах проявляет большую термическую стабильность по сравнению с α-MgF<sub>2</sub>. При ТО при 500°С в обеих системах происходит исчезновение β-MgF<sub>2</sub>, что вероятно связано с образованием изоморфного оксида FeMgO4 за счет диффузии Mg в Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Кроме того, в диапазоне 350°C) бесциркониевых системах TO (B ДΟ приводит рекристаллизации фазы MgF<sub>2</sub>, в Zr-содержащих системах морфологическая эволюция фазы MgF<sub>2</sub> не наблюдалась. Таким образом, присутствие Zr в композитах CoFeZr-MgF<sub>2</sub> замедляет окисление металлической стабилизирует структуру и субструктуру матрицы MgF<sub>2</sub> (в частности, фазу β- $MgF_2$ ).

Исследованные системы демонстрируют отрицательный магниторезистивный эффект, максимальные значения которого наблюдаются

вблизи порога перколяции. Величина максимального MC сильно зависит от наличия Zr и структурного состояния матрицы:

- при кристаллической матрице  $MgF_2$  MC в  $(CoFe)_x(MgF_2)_{100-x}$  достигает ~8%, а в  $(CoFeZr)_x(MgF_2)_{100-x}$  только ~3-4%;
- при аморфной (или нанокристаллической с высокой плотностью дефектов) матрице  $MgF_2$  максимальное MC в системах  $(CoFe)_x(MgF_2)_{100-x}$  и  $(CoFeZr)_x(MgF_2)_{100-x}$  практически одинаково и составляет  $\sim 4\%$ .

Оценка плотности состояний g(E<sub>F</sub>) в композитах доперколяционного состава, проведенная в рамках модели Мотта, показала, что в случае аморфной матрицы значения g(E<sub>F</sub>) для систем CoFe-MgF<sub>2</sub> и CoFeZr-MgF<sub>2</sub> практически совпадают. Предполагается, что высокая плотность дефектов в аморфной матрице доминирует в прыжковой проводимости, снижая долю спин-зависимого туннелирования и, соответственно, MC, независимо от присутствия Zr. В кристаллической матрицей значение  $g(E_F)$ композитах c  $(CoFeZr)_x(MgF_2)_{100-x}$  на порядок выше, чем в  $(CoFe)_x(MgF_2)_{100-x}$ . Это объясняет более низкое MC (~4%) в системе с Zr по сравнению с системой без Zr (~8%). Высокое значение  $g(E_F)$  указывает на большую долю прыжковой проводимости по дефектам, "шунтирующей" спин-зависимое туннелирование.

Наблюдаемые структурно-фазовые особенности и различие в  $g(E_F)$  и в MC в системах с кристаллической матрицей можно объяснить растворением атомов Предполагается, что растворенный Zr создает матрице  $MgF_2$ . дополнительные структурные дефекты (локализованные состояния) в MgF<sub>2</sub>, увеличивая  $g(E_F)$  и долю прыжковой проводимости. Также присутствие примесей Zr В  $MgF_2$ может являться причиной стабилизации высокотемпературной фазы  $\beta$ -MgF<sub>2</sub>.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект № FZGM-2023-0006)

УДК: 529.23

## ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛЕНОК СИСТЕМЫ Li-Nb-O НА ПОВЕРХНОСТИ PdO В РЕЗУЛЬТАТЕ ВАКУУМНОГО ОТЖИГА

А.В. Костюченко<sup>1</sup>, Е.К. Белоногов<sup>2</sup>, С.С. Копытин<sup>3</sup>, Д.С. Лисанов<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Доцент, av-kostuchenko@mail.ru

<sup>2</sup>Профессор, ekbelonogov@mail.ru

<sup>3</sup>Аспирант, kopytin-stanislav@rambler.ru

<sup>4</sup>Студент, lisanovbtf211@gmail.com

<sup>1,2,4</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

<sup>3</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»

В работе представлены результаты исследования влияния термической обработки на эволюцию фазового состава и структуры пленок системы Li-Nb-O на поверхности эпитаксиального оксида палладия. Использование оксида палладия для системы Li-Nb-O в качестве подложки-окислителя впервые позволило путем вакуумного отжига синтезировать пленки из стехиометрического LiNbO<sub>3</sub> на поверхности палладия.

Ключевые слова: Эпитаксиальные пленки, палладий, оксид палладия, ниобат лития, термический отжиг, фазовый состав, субструктура.

Актуальность применения пленок ниобата лития (LiNbO<sub>3</sub>) в акусто- и оптоэлектронных устройствах обусловлена их способностью воспроизводить нелинейные физические свойства, характерные для монокристаллических аналогов. Для кристаллизации исходных аморфных плёнок Li-Nb-O с металлическими контактными слоями необходима кислород-дефицитная среда, предотвращающая окисление металлических слоев. Однако термическая обработка в вакууме провоцирует химическую деградацию пленок системы Li-Nb-O из-за испарения лития и кислорода, что приводит к образованию многофазной структуры. Перспективным решением этой проблемы выступает использование оксида палладия (PdO) в качестве подложки-окислителя.

В работе методами просвечивающей электронной микроскопии проведено сравнительное исследование фазового состава тонких (около 50 нм) исходно аморфных пленок системы Li-Nb-O, полученных в процессе высокочастотного магнетронного распыления мишени LiNbO<sub>3</sub> на поверхности NaCl и на поверхности гетероструктуры фторфлогопит ( $\Phi\Phi$ ) - пленка окисленного на воздухе Pd (толщина 50 нм), в результате термического отжига (TO, 650°C, 5 мин.) в вакууме ( $1\cdot10^{-3}$  Па).

Установлено, что окисление эпитаксиальных монокристальных пленок Pd на ФФ (450-700°C, воздух) формирует двухосную текстуру поликристаллических пленок PdO, а их восстановление приводит к образованию эпитаксиальных поликристаллических пленок Pd, ориентированных в соответствии с соотношением (100) [010], [002] PdO II (111),(112) [110] Pd II (001) ФФ (рис. 1).

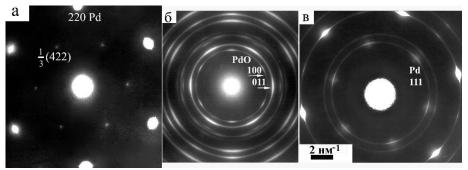


Рисунок 1. Электронограммы пленочной гетероструктуры Pd-PdO, синтезированной нанесением палладия на подогреваемую поверхность (001)  $\Phi\Phi$ : а — после нанесения при  $T_n$ =600 $^0$ C; б — после отжига на воздухе при  $T_0$ =550 $^0$ C; в — после восстановления палладия отжигом в вакууме (10 $^{-4}$  Па) при T=750 $^\circ$ C

В результате ТО в вакууме свободных от подложки (NaCl) аморфных пленок состава LiNbO<sub>3</sub> происходит их кристаллизация с образованием помимо кристаллической фазы решеткой LiNbO<sub>3</sub>, кристаллических c фаз гексагональной решеткой LiNbO<sub>2</sub>, моноклинной решеткой  $Nb_2O_5$ И тетрагональной решеткой NbO<sub>2</sub>.

ТО гетероструктуры  $\Phi\Phi$ -PdO-аморфная пленка состава LiNbO<sub>3</sub> приводит к восстановлению PdO с образованием эпитаксиальной поликристаллическиой пленки Pd, а также кристаллизации аморфного слоя с образованием однофазной пленки LiNbO<sub>3</sub> (рис. 2a). Таким образом, кислород, высвобождающийся в результате восстановления пленки PdO, способен компенсировать его потери в соразмерной по толщине пленке состава LiNbO<sub>3</sub>.

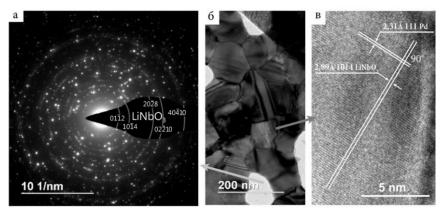


Рисунок 2. Картина общей электронной дифракции (а), ПЭМ-изображение (б) и ПЭМ изображение высокого разрешения пленки системы Li-Nb-O после отжига в вакууме на поверхности пленки PdO

Оценка кристаллографической ориентации пленок LiNbO<sub>3</sub> и Pd (ПЭМ-изображение на рис.2в) показала, что плоскости ( $10\overline{1}4$ ) LiNbO<sub>3</sub> параллельны ( $2\overline{2}0$ ) Pd. Параметр несоответствия удвоенной ( $2\overline{2}0$ ) Pd и ( $10\overline{1}4$ ) LN составил 0,004, что соответствует критерию эпитаксиального роста.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 24-22-20046.

# СИСТЕМА МОНИТОРИРОВАНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ С УДАЛЕННОЙ СЧИТЫВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОНИКОЙ ДЛЯ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УСТАНОВОК

В.В. Тарнавич<sup>1</sup>, Д.С. Ильин<sup>1</sup>, К.Ю. Терентьев<sup>1</sup>, А.Г. Колесников<sup>2,3</sup>
<sup>1</sup>Заместитель заведующего отдела, к.ф.-м.н., <u>tarnavich\_vv@pnpi.nrcki.ru</u>
Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н., digatchi@list.ru
Научный сотрудник, terentiev\_ky@pnpi.nrcki.ru
<sup>2</sup>Заведующий лабораторией, <u>torgcentr2004@mail.ru</u>
<sup>3</sup>Ведущий инженер, torgcentr2004@mail.ru

Для решения задач контроля интенсивности пучка вдоль рабочего тракта исследовательских нейтронных установок был реализован монитор тепловых нейтронов с удаленным сбором сигналов, основанным на интерфейсной плате с применением программируемых логических матриц (FPGA). Монитор был разработан для нейтронного спин-эхо спектрометра SEM, доступного в приборном комплексе нейтронного источника PIK в Гатчине., Россия. С помощью компактного источника нейтронов <sup>252</sup>Cf была продемонстрирована работоспособность устройства.

Ключевые слова: регистрация нейтронов, монитор пучка, считывающая электроника

Колебания интенсивности нейтронного излучения требуют постоянного контроля интенсивности нейтронного пучка, чтобы нормализовать данные о рассеянии для приборов, обеспечивая при этом адекватное соотношение излучения, сигнал/шум. Мониторы нейтронного обладая эффективностью регистрации нейтронов (10-3-10-6), могут контролировать интенсивность нейтронного излучения на различных расстояниях вдоль траектории пучка. При этом в них поглощается или рассеивается только небольшая часть падающего пучка. В результате измерение нейтронного потока перед исследуемым образцом позволяет непосредственно правильно интерпретировать данные о рассеянии, собранные на другом приборе-детекторе, расположенном после образца.

Монитор представляет собой многопроволочную пропорциональную камеру (MWPC) с тонкими герметичными окнами, являющимися катодами. Анод, расположенный между катодами, представляет собой рамку с сеткой из проволок. Один из катодов покрыт слоем конвертера нейтронов толщиной  $\sim 0.3$  мкм, который служит в качестве преобразователя нейтронов. Через камеру монитора непрерывно продувается газовая смесь, обеспечивающая стабильность работы камеры. Плата предусилителя расположена внутри корпуса монитора.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, РНФ

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Государственный университет «Дубна», Дубна, РФ

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>ОИЯИ, Лаборатория физики нейтронов, Дубна РФ

Считывающая электроника монитора представляет собой законченное устройство, которое может быть легко интегрировано в систему управления и сбора данных (SCADA), основанную на платформе Tango-controls и отвечающую требованиям унификации современных центров нейтронных исследований. Считывающая электроника может быть удалена от камеры на существенное расстояние для уменьшения воздействия вторичного излучения и удобства настройки и обслуживания. Система мониторирования тепловых нейтронов изображена на рисунке 1.

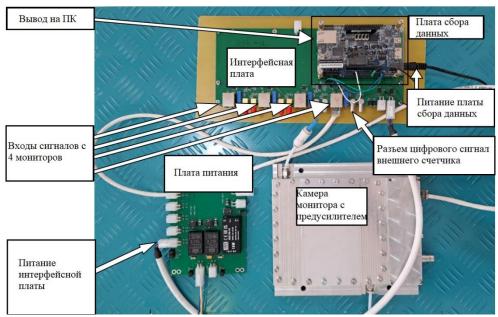


Рисунок 1 - Общий вид системы мониторирования тепловых нейтронов с удаленной считывающей электроникой

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-79-10063 "Разработка и создание систем регистрации нейтронов и компактной нейтронной защиты для данных систем, предназначенных для работы в условиях высоких пучковых загрузок и повышенного радиационного фона", рук. В.В. Тарнавич).

# ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ГАЗОВОЙ СРЕДЫ ПРИ РЕАКТИВНОМ ИОННО-ЛУЧЕВОМ НАПЫЛЕНИИ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ZnO, ЛЕГИРОВАННЫХ АЗОТОМ

В.А. Макагонов<sup>1</sup>, К.С. Габриельс<sup>2</sup>, Ю.Е. Калинин<sup>3</sup>, Лопатин А.Ю.<sup>4</sup> <sup>1</sup>Старший научный сотрудник, к.ф.-м. н., vlad\_makagonov@mail.ru <sup>2</sup>Научный сотрудник, к.ф.-м. н., gabriels\_k@mail.ru <sup>3</sup>Профессор, д.ф.-м. н., kalinin48@mail.ru <sup>4</sup>Аспирант, lopatin-ayu@mail.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Россия, Воронеж

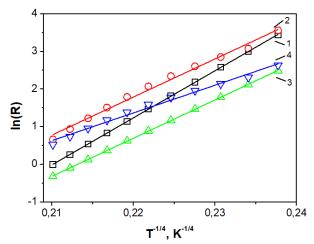
Исследовано влияние состава газовой среды при реактивном ионно-лучевом напылении на электрические свойства пленок ZnO, легированных азотом. Установлено, что в исследованных пленках в области температур  $300\text{-}500~\mathrm{K}$  электроперенос осуществляется прыжками переменной длины по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми. Проведены оценки параметров ZnO согласно модели Мотта. Установлено, что без добавления дополнительного кислорода в камеру при напылении, плотность локализованных состояний на уровне Ферми  $g(E_{\mathrm{F}})$  снижается с увеличением парциального давления азота, в то время как при использовании смеси  $\mathrm{O}_2/\mathrm{N}_2$  — увеличивается.

Ключевые слова: оксид цинка, тонкие пленки, легирование, ионно-лучевое напыление, прыжковая проводимость, плотность состояний.

Тонкие пленки оксида цинка (ZnO) представляют значительный интерес для функциональной электроники. Одним из способов управления электрофизическими свойствами ZnO, в частности электропроводностью, является введение в распылительную камеру реактивных газов. Азот рассматривается как потенциальная легирующая примесь р-типа для ZnO [1], однако наличие собственных дефектов ZnO, в частности вакансий кислорода, являющихся источниками электронов, снижает эффективность легирования ZnO азотом из-за эффекта компенсации. В данной работе исследовано влияние состава газовой среды при напылении, представляющей из себя смесь азота и кислорода, на электрические свойства тонких пленок ZnO.

Тонкие пленки ZnO для исследования электрофизических свойств были получены на ситалловые подложки методом ионно — лучевого распыления по методике, описанной в работе [2]. Температура подложек в процессе напыления поддерживалась на уровне 400 °C.

Температурные зависимости сопротивления всех образцов демонстрируют линейную зависимость в координатах Мотта  $(\ln(R) \propto f(T^{1/4}))$ , что свидетельствует о преобладании прыжкового механизма проводимости по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми (см. рис.)



Зависимости  $\ln(R) \propto f(T^{\cdot 1/4})$  для пленок ZnO, полученных методом ионно-лучевого распыления в газовых средах различного состава:  $1-P_{O2}=5\cdot 10^{-5},\, P_{N2}=2,2\cdot 10^{-5},\, 2-P_{O2}=5\cdot 10^{-5},\, P_{N2}=8,0\cdot 10^{-5},\, 3-P_{O2}=0,\, P_{N2}=8,2\cdot 10^{-5},\, 4-P_{O2}=0,\, P_{N2}=2,2\cdot 10^{-4})$ 

По экспериментальным данным были определены значения плотности локализованных состояний на уровне Ферми. Установлено, что при напылении пленок без дополнительного добавления кислорода в камеру плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми  $g(E_{\rm F})$  снижается, в то время как для пленок, напыленных в смеси кислород-азот, — увеличивается.

Таким образом, видно, что состав газовой смеси  $(O_2/N_2)$  при ионнолучевом напылении существенно влияет на параметры прыжковой проводимости тонких плёнок ZnO. Эти результаты демонстрируют возможность управления электрофизическими свойствами плёнок ZnO через регулирование атмосферы осаждения.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 24-29-20099).

- 1. Kim H., Gilmore C. M., Pique A., Horwitz J. S., Mattoussi H., Murata H., Kafafi Z. H., Chrisey D. B. Fabrication of Zr–N codoped p-type ZnO thin films by pulsed laser deposition // Applied Physics Letters. 2007. Vol. 90. Art. no. 203508. DOI: 10.1063/1.2739369.
- 2. Гриднев С. А., Калинин Ю. Е., Ситников А. В., Стогней О. В. Нелинейные явления в нано- и микрогетерогенных системах. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. 352 с.

# ВЛИЯНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ОСВЕЩЕНИЯ НА СПЕКТР ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ С ПРИМЕСЬЮ ЖЕЛЕЗА

Р.М. Магомадов <sup>1</sup>, М.Е. Зобов <sup>2</sup>, С.П. Крамынин<sup>3</sup>, С.Н.Цебаев <sup>4</sup> <sup>1</sup>доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Общая физика» ФБГОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А.Кадырова», г. Грозный, e-mail; Rukman20031@yandex,ru

<sup>2</sup>старший научный сотрудник Института физики им.Х.И.Амерханова ДФИЦ РАН, г. Maxaчкала, , e-mail; marat\_zobov@mail.ru

<sup>3</sup>младший научный сотрудник Института физики им.Х.И.Амерханова ДФИЦ РАН, г. Maxaчкала, e-mail; kraminin@mail.ru

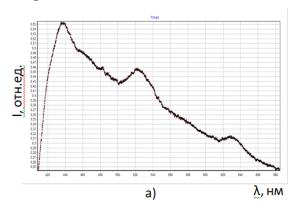
<sup>4</sup>старший преподаватель кафедры «Общая физика» ФБГОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А.Кадырова», г. Грозный, e-mail; ceb-salakh@yandex.ru

#### Аннотация

В данной работе представлены результаты исследования длительности освещения на спектр фотолюминесценции в кристаллах ниобата лития с примесью железа. Обнаружено изменение интенсивности фотолюминесценции и появление новых центров рекомбинации фотовозбужденных электронов. Изменение интенсивности фотолюминесценции связано с тем, что примеси создают в запрещенной зоне кристалла уровни энергии время жизни электронов, на которых достаточно велико. Появление новых центров рекомбинации фотовозбужденных электронов обусловлено возникновением микродеформаций в кристалле вследствие ионизации атомов примеси.

**Ключевые слова:** крисаталл ниобата лития, примесь железа, спектр фотолюминесценции, длительность освещения, уровни энергии, скорость рекомбинации электронов.

Исследуемые кристаллы ниобата лития были выращены гидротермальным методом. На рисунке № 1а приведен график фотолюминесценции в кристалле ниобата лития легированного атомами железа(0.03 масс.%) при освещении лазером с длиной волны  $\lambda = 360$  нм и мощностью 60 мВт.



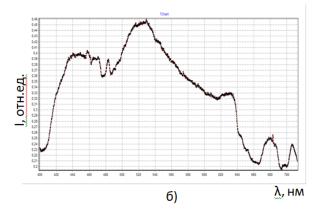


Рис. 1. Фотолюминесценция в кристалле LiNbO $_3$ :Fe(0.03%) при длительном освещении лазером с длиной волны  $\lambda_{\text{осв}} = 360$  нм и мощностью 60 мВт: а)- t=23 минуты; б)- 46минут

Как видно из графика, приведенного на рисунке №1а, фотолюминесценция в кристаллах ниобата лития наблюдается в диапазоне от 400нм до700нм, это указывает на то, что в исследуемых кристаллах ниобата лития есть большая концентрация рекомбинационных примесных центров или дефектов, создающих различные уровни энергии в запрещенной зоне кристалла. Рентгефлуоресцентный анализ показал, что в кристаллах ниобата лития, кроме легированной примеси железа присутствуют неконтролируемые примеси[1], которые попали в кристалл при росте или при шлифовке кристалла.

Разложение графика фотолюминесценции в виде суперпозиции составляющих с профилем Гаусса показывает, что исследуемом кристалле существует множество уровней энергии, среди которых максимумам на графике фотолюминесценции (Рис.1а) соответствуют уровни энергии:  $E_1$ =2.82э $B(\lambda$ =439.1HM);  $E_2$ =2.39 э $B(\lambda$ =519.9HM);  $E_3$ =1.94 э $B(\lambda$ =632.6HM).

Как видно из рисунка № 16 график фотолюминесценции при длительном освещении излучением лазера изменился, сильно упала интенсивность фотолюминесценции связанная с рекомбинацией электронов на уровень Е<sub>1</sub>. В относительных единицах интенсивность фотолюминесценции, связанная с этим уровнем уменьшилась с 0.55 до 0.4. Это уменьшение интенсивности фотолюминесценции связано с тем, что время жизни электронов на этом уровне большое и заполнение уровня энергии электронами при длительном освещении приводит к уменьшению скорости рекомбинации и соответственно к уменьшению интенсивности фотолюминесценции связанной с этим уровнем. Интенсивность фотолюминесценции связанная с уровнями энергии Е2 и Е3 практически не изменилась. Надо отметить что появились два дополнительных уровня рекомбинации  $E_4 = 1.81$  эВ ( $\lambda = 680$ нм) и  $E_5 = 1.68$  ( $\lambda = 725$ нм). Появление рекомбинации общее И изменение формы люминесценции обусловлено тем, что кристалл ниобата лития обладает электрооптическим эффектом и при освещении кристалла в нем возникают микродеформации вследствие ионизации атомов примеси [2], которые создают дополнительные центры рекомбинации фотофозбужденных электронов.

- 1. Магомадов Р.М. Рентгенофлуоресцентный анализ неконтролируемых примесей в кристаллах ниобата лития легированных железом. / Р.М.Магомадов, С.Н. Цебаев //Физика бесвинцовых пъезоактивных и родственных материалов. Моделирование экосистем. (Анализ современного состояния и перспективы). Труды тринадцатого Международного междисциплинарного симпозиума. Ростов-на-Дону, 28-30 октября 2024 года- Том 2- с. 43-47.
- 2. Мануковская Д. В. Применение фрактального анализа для исследования картин фотоиндуцированного рассеяния света в кристаллах ниобата лития /Д. В. Мануковская , Н. В. Сидоров, М. Н. Палатников, А. В. Сюй// Прикладная физика-2015- № 1-С.14-17.

# АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ СИЛОВОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

С.В. Долженков<sup>1</sup>, В.А. Перов <sup>2</sup>, А.В. Звягинцева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Магистр, dcv-2000@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

<sup>2</sup>Магистр, ziper.ru@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

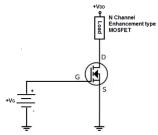
<sup>3</sup>Доцент, кандидат технических наук, zvygincevaav@mail.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В статье проведено исследование особенности технологии силового полевого N- МОПтранзистора. В ходе работы были исследованы электрические характеристики силового полевого транзистора.

Ключевые слова: МОП-транзистор, диоксид кремния, затвор, пороговое напряжение, сопротивление

МОП-транзисторы доступны как в п-канальной, так и в р-канальной конфигурации [1, 2]. При достаточном положительном напряжении VDD и отсутствии напряжения (0 В), подаваемого на базу, N-канальный МОП-транзистор работает на максимальной мощности и имеет наибольший ток. При увеличении отрицательного напряжения, ток уменьшается до тех пор, пока напряжение не станет настолько высоким (отрицательным), что весь ток прекратится.



Принцип работы N-канального МОП-транзистора с разрядкой

МОП-транзистора проверки N-канального были проведены следующие исследования: 1. Подключение истока к положительному контакту мультиметра, а сток – к отрицательному контакту мультиметра. В этом состоянии МОП-транзистор находится в состоянии прямого смещения. Теперь показания мультиметра будут составлять от 0,4 до 0,9 В. Если это значение не получено или полученное значение равно нулю или отсутствует, значит, наш МОП-транзистор неисправен. 2. Теперь, когда мы поменяем местами щупы мультиметра быть мультиметра, показания должны нулевыми. Распространенные неисправности МОП-транзисторов и способы их выявления:

1. Перегрев может привести к выходу из строя МОП-транзистора, что можно определить по запаху гари, изменению цвета или видимым

повреждениям, а также по измерению температуры с помощью термометра или тепловизионной камеры.

- 2. Выход из строя затворов из-за оксида азота может привести к утечке тока из МОП-транзистора, что может привести к перегреву и, в конечном итоге, к выходу из строя. Для этого необходимо измерить сопротивление затвор-исток мультиметром, которое должно быть очень высоким, когда МОП-транзистор выключен.
- 3. Недостаточное напряжение на затворе может привести к неполному включению МОП-транзистора, что приведет к более высокому, чем ожидалось, сопротивлению сток-исток. Это можно определить, измерив, пороговое напряжение с помощью мультиметра и сравнив его со спецификациями, указанными в техническом описании.
- 4. Неправильная распиновка может привести к неправильной работе МОП-транзистора или даже к его повреждению. Это можно определить, обратившись к техническому описанию для получения правильной распиновки и проверив соединения мультиметром.

Тестирование МОП-транзисторов в режиме включения/выключения. В зависимости от конкретного применения пользователи могут тестировать МОП-транзисторы различными способами. Если подключение к печатной плате ограничено, для выявления возможных неисправностей необходимо провести внутрисхемное тестирование, что позволит получить информацию о производительности устройства [3].

Удалив МОП-транзистор с печатной платы и протестировав его независимо, можно добиться более надежных результатов с помощью тестирования вне цепи. Тестирование вне цепи позволяет получить более надежные результаты, поскольку исключает риск влияния других компонентов, подключенных к МОП-транзистору, на результаты измерений.

Проверка на отсутствие замыкания может проводиться с помощью тестера MOSFET и может включать в себя такие тесты, как измерение порогового напряжения, сопротивления сток-исток и тока утечки на затворе.

Выбор метода тестирования зависит от конкретного применения и характера неисправности.

- 1. Fiel A. MOSFET failure modes in the zero-voltage-switched fullbridge Switching Mode Power Supply Applications / A. Fiel, T. Wu // Proc. APEC 2001. Текст: непосредственный.
- 2. Schoiswohl J. «Linear mode operation and safe operating diagram of power-MOSFETs» / J. Schoiswohl // Application Note AP99007. Infineon Technologies. May 2017. Текст: непосредственный.
- 3. Долженков С.В. Совершенствование системы разварки контактов в случае изготовления интегральных микросхем / С.В. Долженков, А.В. Звягинцева, Т.Г. Меньшикова //Вестник Воронежского государственного технического университета. 2024. Т. 20. № 4. С. 154-164.

# ПРИМЕНЕНИЕ КЕРАМИКИ AIN В КАЧЕСТВЕ ДЕРЖАТЕЛЯ КРИСТАЛЛА ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ МОЩНЫХ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ

В.А.Перов<sup>1</sup>, С.В. Долженков <sup>2</sup>, А.В. Звягинцева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Магистр, ziper.ru@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

<sup>2</sup>Магистр, dcv-2000@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

<sup>3</sup>Доцент, кандидат технических наук, zvygincevaavv@mail.ru

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

Определена возможность применения в качестве кристаллодержателя керамики AlN при производстве мощных СВЧ-транзисторов и в разработке научно обоснованных конструктивно-технологических решений изготовления теплоотводов из новых материалов для мощных СВЧ транзисторов, входящих в состав твердотельной полупроводниковой аппаратуры и силовой электроники.

Ключевые слова: теплопроводность, термическое сопротивление, керамика, СВЧтранзистор

В последние десятилетия отечественные и зарубежные САПР для разработки ЭКБ (электронная компонентная база) и РЭА (радиоэлектронная аппаратура) усиленно развиваются [1-4].

Важнейший элемент практически любого транзистора – его корпус. Он должен удовлетворять требованиям, предъявляемым к конструкции прибора, его назначению, стойкости к воздействию внешних факторов, в том числе и специальных, и иным требованиям надежности. Кроме того, корпус должен быть устойчив к технологическим режимам сборки транзистора. Как правило, корпус мощного СВЧ-транзистора содержит металлический теплоотводящий фланец, на котором размещены изолятор из многослойной алюмооксидной керамики с присоединенными к нему плоскими внешними выводами и теплоотвод из диэлектрического материала с высокой теплопроводностью. Разработчики и предприятия-изготовители мощных СВЧ-транзисторов на протяжении десятков лет ищут экологически чистые материалы с требуемыми диэлектрическими свойствами и теплопроводностью, альтернативные ВеО-керамике. Сейчас наиболее перспективными представляются высокотеплопроводные поликристаллический алмаз (полиалмаз) и керамика на основе нитрида алюминия (AIN). Проведен комплекс работ по исследованию возможности использования AIN-керамики в корпусах полупроводниковых приборов. По коэффициенту теплового расширения этот материал хорошо согласуется с кремнием (таблица), что особенно важно для приборов, выполненных на кристаллах больших размеров. К тому же, в отличие от ВеО-керамики теплопроводность AlN-керамики не уменьшается при нагреве транзистора. Полученные результаты исследований подтвердили возможность использования AIN-керамики в корпусах приборов.

Свойства различных диэлектрических материалов теплоотвода корпусов СВЧ-транзисторов

Свойства материалов	ВеО-керамика	AlN-керамика
ε	6,6	7,5 – 8,0
tg φ	2.10 – 4	5.10 – 4
λ при 300К, Вт/м·К	215	140– 180
Коэффициент теплового расширения, ×10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> (при температуре, °C)	5,5 (25 – 100)	2,65 (20 – 100)
	8,0 (25 – 300)	3,80 (20 – 300)
	9,6 (25 – 600)	4,19 (20 – 400)
	10,8 (25 – 800)	4,47 (20 – 500)

Теоретические и экспериментальные исследования показали возможность металлизации AlN-керамики пастами на основе тугоплавких металлов, а также вакуумным осаждением металлов и активной пайкой металлической фольги. При вакуумном осаждении металлов наиболее предпочтительна система металлизации, химически взаимодействующая с материалом подложки. Чтобы между напыляемым металлом и материалом диэлектрика протекала химическая реакция, необходимо обеспечить ее возможность с точки зрения термодинамики [3, 4].

Проведенные расчеты теплового сопротивления корпусов показали, что AlN-керамика способны обеспечить энергетические параметры мощных транзисторов. Следует также иметь в виду, что при нагреве транзистора в процессе работы тепловое сопротивление корпуса с BeO-керамикой значительно увеличивается, а для корпуса с AlN-керамикой практически не изменяется.

- 4. Ральченко В. Г. Двухслойные теплоотводящие диэлектрические подложки алмаз-нитрид алюминия / В. Г. Ральченко, А. В. Савельев и др. // Микроэлектроника. 2006. Т. 35. № 4. С. 243-247.
- 5. Малахов Р. Ю. Мощные транзисторы для передатчиков бортовых радиолокационных систем / Р. Ю. Малахов, Е. М. Добычина //Научный вестник МГТУ ГА. 2012. № 186. С. 184-190.
- 6. Долженков С.В. Совершенствование системы разварки контактов в случае изготовления интегральных микросхем / С.В. Долженков, А.В. Звягинцева, Т.Г. Меньшикова //Вестник Воронежского государственного технического университета. 2024. Т. 20. № 4. С. 154-164.
- 7. Звягинцева А.В. Оптимизация процесса разварки контактов при производстве ИМС методом клин-клин / А.В. Звягинцева, С.В. Долженков // В сборнике: Машиностроение и техносфера XXI века. Сборник трудов XXXI Международной научнотехнической конференции,. Донецк, 2024. С. 104-118.

### РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ

#### А.В. Звягинцева

Доцент, кандидат технических наук, zvygincevaavv@mail.ru ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

В работе рассмотрены условия возникновения релаксационных процессов в системе: металл - никель, синтезированный электрохимическим методом, и компонент внедрения III А группы (бор, индий). Релаксационные явления, происходящие в электрохимических системах на основе металлов и сплавов, в работе никеля, связаны с изменением структуры, свойств или поведения компонентов в неравновесных условиях — без отжига.

В электрохимических системах основными причинами, обуславливающих возникновение релаксационных процессов являются:

- 1. Неравновесность условий реализации синтеза (протекание параллельных процессов на катоде и аноде);
- 2. Специфичность взаимодействия компонентов в составе металлов и сплавов [1, 2], особенно специфическим влиянием внедренных атомов водорода и неметалла бора.

Одним из компонентов нашей электрохимической системы является бор, то в целом система рассматривается как 3-х компонентная Nix-By-Hz. Влияние бора теоретически можно оценить, используя температурную зависимость внутреннего трения для чистого бора, приведенного в работе [3].

Исследование температурной зависимости внутреннего трения для бора в интервале температур от комнатной до  $850\,^{\circ}$ С показало, что при  $\sim 250\,^{\circ}$ С возникает ярко выраженный пик внутреннего трения большой высоты. Энергия активации, рассчитанная по температурному смещению пика, равна  $83.8\pm 8.38\,$  кДж/моль. Сопоставляя характер температурной зависимости внутреннего трения для бора и экспериментальной температурной зависимости экстракции водорода из электрохимического композита Nix-By-Hz можно объяснить причину наблюдаемого явления свободного течения водорода из данной системы при комнатной температуре [2].

Удаление водорода при относительно низких температурах из образца связано с проявлением ярко выраженных релаксационных процессов в электрохимической системе Nix-By-Hz в условиях комнатных температур, обусловленных структурной перестройкой [1, 2].

Экспериментально установлено методами ТДС и вакуумной экстракции, что процесс диффузии водорода возникает уже при отрицательных температурах образца. Интервал температур экстракции водорода, будет зависеть от концентрации бора в исследуемом композите Nix-By-Hz [2].

При легировании никелевых покрытий бором до 1 вес. % (5 ат. %) образуется твёрдый раствор бора и водорода в никеле, кристаллизующемся с

ГЦК решёткой, характерной для никеля. При относительно малой концентрации до 2-3 ат. процентов бора, бор, внедряясь в ГЦК решетку никеля, концентрируется по границам кристаллитов и дефектам решетки никеля, блокирует их, что тормозит включение водорода. При дальнейшем увеличении концентрации бора более 4 ат. процентов наблюдается переход от кристаллической структуры к аморфной, возникают дополнительные дефекты в ГЦК решетке никеля, которые являются основой для включения водорода.

Увеличение содержания водорода в композите Nix-By-Hz связано с захватом водорода в окружение бора и их большим взаимодействием, чем с никелем с последующим образованием комплексов. Это возможно, согласно проведенным исследованиям, что бор является примесной ловушкой для атомов водорода [1, 2]. Кроме того, можно высказать предположение об увеличении потенциала взаимодействия дефектов структуры композита Nix-By-Hz и водорода с увеличением концентрации бора.

Таким образом, на релаксационные процессы влияние может оказывать влияние образование структур в процессе взаимодействия на электроде компонентов  $Ni^{2+}$ ,  $H^+$  и анионов  $B_{10}H_{10}^{2-}$  на катоде при электрохимическом формировании композита Nix-By-Hz.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1. Zvyagintseva A.V. Mathematical modeling of hydrogen diffusion in a medium with impurity and structural traps in the conditions of the formation and decomposition of hydrogen-containing complexes /International Journal of Hydrogen Energy. 2025. T. 10. C. 112-119.
- 2. Zvyagintseva A.V., Shalimov Yu.N. Increase of solubility of hydrogen of in electrolytic alloys Ni-B / Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems. Springer. 2011. P. 519 528.
- 3. Тавадзе Ф.Н., Цагарейшвили Г.В. Исследование внутреннего трения в кристаллическом боре / Релаксационные явления в твердых телах (обзоры). М.: «Металлургия», 1968. 695 с.

### Научное издание

# ХХVІ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО РЕЛАКСАЦИОННЫМ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Материалы XXV международной конференции (г. Воронеж, 15-19 сентября 2022 г.)

Издается в авторской редакции

Подписано к изданию 16.06.2025. Объем данных 8,87 Мб.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет» 394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84