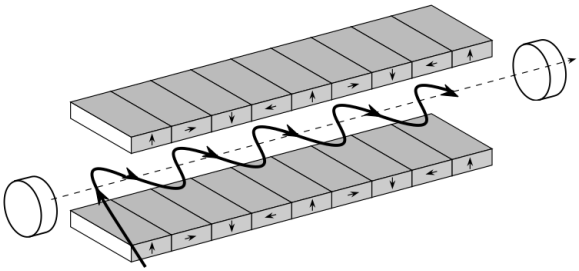
Воронежский государственный университет



ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ:

ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Сборник тезисов
II Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 12—17 сентября 2022 г.)

Под общей редакцией
доктора физико-математических наук,
доцента *С. Ю. Турищева*

Воронеж
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
2022

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431
В93

В93 **Высокоточная** диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования : сборник тезисов II Всероссийской молодежной конференции (г. Воронеж, 12—17 сентября 2022 г.) / под общ. ред. С. Ю. Турищева. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2022. — 126 с. — ISBN 978-5-4446-1713-7. — Текст : непосредственный.

Сборник содержит тезисы устных докладов второй всероссийской молодежной конференции «Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования» (г. Воронеж, 12—17 сентября 2022 года).

Конференция организована в рамках Проекта Воронежского государственного университета «Распределенная инфраструктура высокоточных методов диагностики в ультрамягкой рентгеновской области синхротронного излучения для функциональных материалов и наноразмерных структур, включая био-нано-гибридные, для перспективных технологий и технических систем: от образовательных технологий через фундаментальные научные исследования к практическому применению» Федеральной научно-техническое программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019—2027 годы.

Основную структуру конференции составили устные доклады молодых учёных по следующим направлениям, связанным с развитием синхротронной диагностики материалов и наноразмерных структур для перспективных технологий и технических систем, включая принципиально новую природоподобную компонентную базу.

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431

© ВГУ, 2022
© Изд. оформление.
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга», 2022

ISBN 978-5-4446-1713-7

СОДЕРЖАНИЕ

Солдатов А. В., Гуда А. А., Бугаев А. Л., Солдатов М. А., Чернов А. В. СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ: СЛАДКАЯ ПАРОЧКА 21 ВЕКА ИЛИ СИНЕРГИЯ ДВУХ ТЕХНОЛОГИЙ 13

Ivkov S. A., Seredin P. V., Goloshchapov D. L., Barkov K. A., Ryabtsev S. V., Sitnikov A. V., Ganshina E. A., Domashevskaya E. P. EFFECT OF VARIABLE ATOMIC COMPOSITION AND STRUCTURAL-PHASE STATE OF COX(MGF2)100-X NANOCOMPOSITES ON THEIR NONLINEAR TRANSPORT AND MAGNETIC PROPERTIES 14

Валеев Р. Г., Кривенцов В. В. СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПОКРЫТИЙ, ОСАЖДЕННЫХ НА ПОРИСТЫЙ АНОДНЫЙ ОКСИД АЛЮМИНИЯ 15

Яшина Л. В. ФОТОЭМИССИОННЫЙ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО И ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ. 17

Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Станкевич В. Г. МЯГКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ 17

Сивков В. Н. КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ИЗУЧЕНИЮ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ 19

Яловега Г. Э. ВОЗМОЖНОСТИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ СТРУКТУРНОЙ ДИАГНОСТИКИ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ 20

Турищев С. Ю., Чувенкова О. А., Курганский С. И., Манякин М. Д., Паринова Е. В., Рябцев С. В. АТОМНОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ ОЛОВО КИСЛОРОД. 22

Антипов С. С., Буркова Д. В., Анохова В. Д., Бабич О. О., Коробенко М. В., Нарикович А. С., Чупахин Е. Г. ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЛАГЕНОВЫХ КАРКАСОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УСТАНОВКИ «SYNCHROTRON-LIKE». 23

Середин П. В., Голощапов Д. Л. РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОГО БИОМИМЕТИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕЙСА ЭМАЛЬ — БИОКОМПОЗИТ И ИССЛЕДОВАНИЯ ЕГО МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНИКИ СИНХРОТРОННОЙ СУБМИКРОННОЙ ATR-FTIR МИКРОСПЕКТРОСКОПИИ И МУЛЬТИВАРИАТИВНОГО АНАЛИЗА. 25

Некипелов С. В., Жук Н. А., Петрова О. В., Сивков Д. В., Бакина К. А., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н. РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПИРОХЛОРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3D-МЕТАЛЛОВ 26

Овчинников О. В., Смирнов М. С. ФОТОНИКА ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР 27

Осминкина Л. А. БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ. 31

Чукавин А. И., Бельтюков А. Н. ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА С НАСТРАИВАЕМЫМ ПЛАЗМОННЫМ ОТКЛИКОМ В ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА 32

Хаметова Э. Ф., Бакиева О. Р. ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ TIO2 МЕТОДАМИ EXAFS И EXELFS С ПЕКТРОСКОПИИ 33

Осминкина Л. А., Карташова А. Д., Гюппенен О. Д., Божьев И. В., Гончар К. А., Самсонова Ж. В., Первушин Н. В., Евстратова Я. В., Кудрявцев А. А., Елисеев А. А. КОМПОЗИТНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ И ЧАСТИЦ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ БИОСЕНСОРИКИ МЕТОДОМ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ 35

Цурикова У. А., Осминкина Л. А., Гонгальский М. Б. МОНИТОРИНГ РАСТВОРЕНИЯ КРЕМНИЕВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ 36

Макаров В. К., Чумаков Р. Г. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО НАКЛОНА МОЛЕКУЛ C60F18 НА ПОДЛОЖКЕ ИЗ ЗОЛОТА МЕТОДОМ РФЭС НА СИ 38

Федотов И. А., Николичев Д. Е., Кудрин А. В., Широких Н. С. СОСТАВ ТОНКИХ СЛОЕВ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ (AIII, FE)BV. 40

Широких Н. С., Николичев Д. Е., Дорохин М. В., Федотов И. А. ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК SI: CO 41

Тарасов А. В., Вялых Д. В., Креллнер К., Усачев Д. Ю. РАЗВИТИЕ ФОТОЭМИССИОННЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ КВАЗИДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ 4F ЭЛЕМЕНТОВ. 43

Пелагина А. К., Паринова Е. В., Чувенкова О. А., Курганский С. И., Коюда Д. А., Sivakov V., Yermukhamed, Ming T., Турищев С. Ю. ИССЛЕДОВАНИЯ МОРФОЛОГИИ, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ 3D-РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МАССИВОВ НИТЕВИДНОГО КРЕМНИЯ 45

Бойков Н. И., Турищев С. Ю., Чувенкова О. А., Захаров Н. Д., Анисимов А. В., Паринова Е. В., Коюда Д. А., Манякин М. Д., Курганский С. И., Макарова А., Смирнов Д., Овсянников Р., Тонких А. А. ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ЭПИТАКСИАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ 5 МОНОСЛОЕВ ОЛОВА НА КРЕМНИИ МЕТОДАМИ XANES И XPS С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 47

Какулия Ю. С., Канюков Е. Ю., Паринова Е. В., Сиваков В., Канныкин С. В., Ляйтнер Т., Овсянников Р., Турищев С. Ю. СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАССИВОВ МЕДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ВЫРАЩЕННЫХ В ПОРАХ SIO2 НА SI 49

Бакина К. А., Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ГИБРИДНОГО НАНОКОМПОЗИТА CU/МУНТ 51

Скандаков Р. Н., Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Бакина К. А., Сивков В. Н. АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ФУЛЛЕРИТА C60, МОДИФИЦИРОВАННОГО БАРОТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКОЙ В АРГОНЕ 52

Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Виноградов А. С., Скандаков Р. Н., Бакина К. А., Исаенко С. И., Объедков А. М., Каверин Б. С., Вилков И. В., Сивков В. Н. КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГРУПП НА ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ XPS И NEXAFS 54

Пронина Е. В., Кременная М. А., Яловега Г. Э. ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ИОНОВ ЦИНКА В ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ЦЕНТРАХ СВЯЗЫВАНИЯ В ГЕМОГЛОБИНЕ 55

Недоедкова О. В., Лысенко В. Ю., Шматко В. А., Яловега Г. Э. ОСОБЕННОСТИ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАНИЛИНА И КОМПОЗИТОВ ПАНИ/ME (CU, ZR) 57

Лысенко В. Ю., Кременная М. А., Недоедкова О. В., Рогачев А. В., Яловега Г. Э. ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ИОНОВ ЦИНКА В ВОДНОЙ СУБФАЗЕ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МОНОСЛОЕМ АРАХИНОВОЙ КИСЛОТЫ 59

Ивков С. А., Козаков А. Т., Никольский А. В., Сегал Ю. Г., Домашевская Э. П. XPS И СПЕКТРЫ МЕССБАУЭРА ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ АТОМАМИ СПЛАВА И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ В НАНОКОМПОЗИТАХ (CO45FE45ZR10)X(MGF2)100-X. 63

Смирнов М. С., Чирков К. С., Звягин А. И., Чевычелова Т. А., Кондратенко Т. С., Хохлов В. Ю., Дерепко В. Н., Асланов С. В., Гревцева И. Г. РЕКОМБИНАЦИОННАЯ И ЭКСИТОННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PBS 64

Белых А. В., Буйлов Н. С., Домашевская Э. П., Ситников А. С. СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ (COFEB)X(NBLIO3)1-X 66

Скоробогатов М. С., Преображенская Е. В., Антипов С. С. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И СИНТЕЗА ИСКУССТВЕННЫХ Y-ПОДОБНЫХ ДНК КОНСТРУКЦИЙ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ МИШЕНИ ДЛЯ БАКТЕРИАЛЬНОГО БЕЛКА DPS. 69

Лиходзиевская М. В., Бородина М. М., Буркова Д. В., Антипов С. С. ОСОБЕННОСТИ ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА ДЕРМАЛЬНЫХ ПОКРОВОВ CLARIAS GARIEPINUS 71

Бородина М. М., Лиходзиевская М. В., Буркова Д. В., Антипов С. С. КОЛЛАГЕН CLARIAS GARIEPINUS КАК АКТУАЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ 72

Терехов В. А., Теруков Е. И., Ундалов Ю. К., Трапезникова И. Н., Барков К. А., Курило Н. А., Голощапов Д. Л., Середин П. В., Занин И. Е. ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК A-SIOX ПОСЛЕ ИМПУЛЬСНОГО ФОТОННОГО ОТЖИГА. 74

Терехов В. А., Нестеров Д. Н., Барков К. А., Величко К. Е., Ситников А. В., Керсновский Е. С., Занин И. Е. ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ПЛЕНКАХ AG-SI ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ 77

Терехов В. А., Нестеров Д. Н., Барков К. А., Керсновский Е. С., Ивков С. А., Хыдырова С., Михайлова И. В., Васильев Д. Д., Моисеев К. М. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК W-SI 79

Protsenko B. O., Usoltsev O. A., Skorynina A. A., Pnevskaya A. Yu., Bugaev A. L. DRIFTS AS QUANTITATIVE TOOL FOR STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF PD NANOPARTICLES 81

Дмитриев В. О., Богославская Е. С., Шматко В. А., Яловега Г. Э. ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ MEOX/МУНТ (ME = CU, NI) 82

Ерыженков А. В., Тарасов А. В., Рыбкина А. А., Рыбкин А. Г. ФЕРРИМАГНЕТИЗМ В КВАЗИСВОБОДНОМ ГРАФЕНЕ 83

Перепелица А. С., Асланов С. В., Цыбенко Ф. А. ДЕКОРИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ TIO2 КОЛЛОИДНЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ PBS ДЛЯ СЕНСИБИЛИЗАЦИИ К ИЗЛУЧЕНИЮ ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА 85

Смирнов М. С., Кондратенко Т. С., Звягин А. И., Хохлов В. Ю., Чевычелова Т. А., Дерепко В. Н., Асланов С. В., Чирков К. С. ИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ AG2SE, ПОКРЫТЫХ МОЛЕКУЛАМИ 2-МЕРКАПТОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ 86

Емельянова А. А., Голощапов Д. Л., Середин П. В., Ипполитов Ю. А. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РОСТА И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ НА БИОГЕННЫХ ПОДЛОЖКАХ В УСЛОВИЯХ ЖИДКОФАЗНОГО СИНТЕЗА 88

Бреева А. В., Первушин Н. В., Цурикова У. А., Елисеев А. А., Гонгальский М. Б., Осминкина Л. А. КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА ДЛЯ МОНИТОРИНГА КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ, ЗАГРУЖЕННЫХ ЛЕКАРСТВОМ 89

Гончар К. А., Божьев И. В., Шалыгина О. А., Елисеев А. А., Осминкина Л. А. СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С УЧАСТИЕМ ЗОЛОТЫХ НАНОЧАСТИЦ 91

Шатская М. Г., Первушин Н. В., Самсонова Ж. В., Саушкин Н. Ю., Осминкина Л. А. КОМПОЗИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ В КАЧЕСТВЕ ЭФФЕКТИВНЫХ КОНТЕЙНЕРОВ ДЛЯ ЗАГРУЗКИ ПРОТИВОРАКОВОГО ПРЕПАРАТА SUNITINIB MALATE. 92

Макарова Т. П., Шикин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В. МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА MNBI2TE4 ПРИ ДОПИРОВАНИИ АТОМАМИ GE, SB И S 94

Гогина А. А., Тарасов А. В., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Филянина М., Климовских И. И. АДСОРБЦИЯ МОНОСЛОЯ NA НА ГРАФЕН/PT(111) 96

Титова С. С., Коюда Д. А. , Осминкина Л. А., Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Кудрявцев А. А., Какулия Ю. С., Паринова Е. В., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю. СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ СПОСОБА ВЫСУШИВАНИЯ НА СОСТАВ И СТРУКТУРУ ПОРОШКОВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ 98

Потуданский Г. П., Курганский С. И. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ДИСИЛИЦИДА КОБАЛЬТА 100

Гулей В. А., Леньшин А. С., Полковникова Ю. А. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ОСАЖДЕНИЯ ЦИННАРИЗИНА В ПОРИСТЫЙ КРЕМНИЙ. 103

Пешков Я. А., Леньшин А. С. ЗАВИСИМОСТЬ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ОТ ПОКАЗАТЕЛЯ ПОРИСТОСТИ 105

Москалец С. В., Шурыгин А. В., Короченцев В. В. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВ АДДУКТОВ YB(III). 106

Радина В. Р., Курганский С. И. МОДЕЛИРОВАНИЕ L3-КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ГЕМИОКСИДА МЕДИ. 108

Картапова Т. С., Гильмутдинов Ф. З., Еремина М. А. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТОНКИХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК НА ИЗОЛИРУЮЩИХ ПОДЛОЖКАХ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СКОРОСТИ НАБОРА ДОЗЫ ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ АРГОНА 109

Осьмушко И. С., Немтинов В. И. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ НА РАСЩЕПЛЕНИЕ 1S-УРОВНЯ ФТОРА 110

Макаров П. А., Сивков Д. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н. FDTD-МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА В КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУРАХ. 111

Путков А. Е., Тетерин Ю. А., Рыжков М. В., Маслаков К. И., Тетерин А. Ю., Иванов К. Е., Калмыков С. Н., Петров В. Г. ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ В ANO2 (AN = TH — CF) 112

Мальков Д. М. ОТРАЖЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО ОГРАНИЧЕННОГО СИНХРОТРОННОГО ПУЧКА ЭКСТРЕМАЛЬНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ МНОГОСЛОЙНОГО ЗЕРКАЛА 114

Петков А. А., Валеев Р. Г. ОТРАБОТКА МЕТОДИК СИНТЕЗА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ С ЦЕЛЬЮ УСТАНОВЛЕНИЯ СКОРОСТИ ОСАЖДЕНИЯ . . . 115

Добровольская А. В., Чапек С. В., Усольцев О. А., Наранов Е. Р., Горбунов Д. Н., Тригуб А. Л., Солдатов А. В., Бугаев А. Л. IN SITU РОСТ НАНОЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ ВНУТРИ МИКРОФЛЮИДНОГО ЧИПА ПОД КОНТРОЛЕМ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ. . . 117

Шурыгин А. В., Короченцев В. В., Вовна В. И. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АДДУКТОВ ТЕНОИЛТРИФТОРАЦЕТОНАТА ER И YB 119

Петрова О. В., Бакина К. А., Сивков Д. В., Некипелов С. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н. NEXAFS ИССЛЕДОВАНИЯ КОСТЕЙ РЫБ И МЛЕКОПИТАЮЩИХ. 120

Ершов И. В., Лаврентьев А. А. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 122

Беликов Е. А., Антипов С. С., Паринова Е. В., Коюда Д. А., Пелагина А. К., Чувенкова О. А., Требунских С. Ю., Сиваков В., Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Турищев С. Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ КЛЕТОЧНОЙ КУЛЬТУРЫ ESCHERICHIA COLI, КАК ИСТОЧНИКА ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР 124

СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ: СЛАДКАЯ ПАРОЧКА 21 ВЕКА ИЛИ СИНЕРГИЯ ДВУХ ТЕХНОЛОГИЙ

А. В. Солдатов, А. А. Гуда, А. Л. Бугаев, М. А. Солдатов, А. В. Чернов
«МИИИМ ЮФУ», Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: soldatov@sfedu.ru, тел.: +7 (863) 219-97-24

Благодарности: *исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 075-15-2021-1363).*

Основными векторами развития использования установок мега-сайенс в области применения синхротронного излучения является переход от исследования статических интегральных характеристик материалов к прецизионной диагностике динамики изменения локальных параметров материалов в ходе процессов, в том числе при реальных технологических условиях и с высоким временным разрешением. Это приводит, с одной стороны, к существенному усложнению проведения измерений, в частности, к необходимости управления сразу несколькими независимыми параметрами эксперимента. С другой стороны, в ходе эксперимента генерируется Большие Данные, для анализа которых зачастую требуется несколько месяцев интенсивной работы с привлечением суперкомпьютерных вычислений. Поэтому в большинстве случаев группа исследователей в настоящее время возвращается в свою лабораторию с синхротрона не с решением своей задачи, а с терабайтами экспериментальных данных, качество которых может и не позволит получить в ходе последующего анализа достоверный результат. Поэтому разрабатываемая в МИИИМ ЮФУ роботизированная система для диагностики материалов, включающая основанную на технологиях предварительно натренированного искусственного интеллекта методику анализа экспериментальных данных в режиме реального времени, несомненно, существенно повысит эффективность использования создаваемых в России синхротронных центров нового поколения.

Так как определяемые в ходе диагностики параметры атомной и электронной структур исследуемых образцов и определяют большинство практически важных характеристик материалов, то разработанную самоуправляемую систему можно использовать и для ускоренного подбора оп-

© Солдатов А. В., Гуда А. А., Бугаев А. Л., Солдатов М. А., Чернов А. В., 2022

тимальных параметров синтеза целого ряда функциональных материалов с требуемыми свойствами. Применение для синтеза технологий микрофлюидики позволит использовать малое количество исходных реактивов, практически мгновенно менять условия реакций и столь же быстро проводить диагностику как промежуточных фаз, так и полученных материалов.

EFFECT OF VARIABLE ATOMIC COMPOSITION AND STRUCTURAL-PHASE STATE OF $CO_X(MGF_2)_{100-X}$ NANOCOMPOSITES ON THEIR NONLINEAR TRANSPORT AND MAGNETIC PROPERTIES

S. A. Ivkov[1], P. V. Seredin[1], D. L. Goloshchapov[1], K. A. Barkov[1], S. V. Ryabtsev[1], A. V. Sitnikov, E. A. Ganshina, E. P. Domashevskaya[1]
[1]*Department of Solid State Physics and Nanostructures, Voronezh State University, Universitetskaya pl. 1, 394018 Voronezh, Russia*
e-mail: ivkov@phys.vsu.ru

Acknowledgements: *the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the state task for universities in the field of scientific activity for 2020—2022, project No. FZGU-2020-0036. The study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russia under agreement № 075-15-2021-1351 in part of the resistive percolation threshold and impedance investigations.*

Micrometer-thick nanocomposites layers $Co_x(MgF_2)_{100-x}$ on the glass substrates were obtained by ion-beam sputtering of a composite target in the argon atmosphere in a wide range of compositions x = 16—59 at.%. The XRD shows, that at x < 42 at.%, the metal phase is X-ray amorphous, and the MgF_2 dielectric matrix is nanocrystalline, while at x > 42 at.% metallic cobalt is formed in the form of hexagonal Co nanocrystals, and the dielectric matrix MgF_2 becomes X-ray amorphous. The average size of metal nanocrystals Co varies within 10—20 nm [1,2]. The value of the resistive percolation threshold xper = 37 at.%, determined from the concentration dependences of the electrical resistance of NCs, coincides with the beginning of nucleation of metallic nanocrystals in the MgF2 dielectric matrix. The absolute value of maximum negative magnetoresistive effect in the NCs is 5 % in a magnetic field of 5.5 kOe at Co concentration x = 27 at.%, up to percolation threshold. It has been established that the magnetic percolation threshold in $Co_x(MgF_2)_{100-x}$ system occurs at xfm = 32 at.% with the appearance of a hysteresis loop and a coercive force of Hc ≈ 18 Oe, i. e. earlier than the resistive percolation threshold xper = 37 at.%, as a result of the exchange interaction. The obtained concentration dependence of the coercive force Hc for nanocomposites showed that at low contents of metallic cobalt x < 27 at.% NCs are superparamagnetic (Hc = 0). With an increase in cobalt content, in the region of magnetic and resistive percolation thresholds of 27 < x < 42 at.%, NCs exhibit a magnetically soft ferromagnetic character (Hc < 50 Oe), and beyond the percolation threshold (x > 42 at.%) they become magnetically hard ferromagnetics with a coercive force of Hc ≈ 95Oe.

© Ivkov S. A., Seredin P. V., Goloshchapov D. L., Barkov K. A., Ryabtsev S. V., Sitnikov A. V., Ganshina E. A., Domashevskaya E. P., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. E. P. Domashevskaya, S. A. Ivkov, A. V. Sitnikov, O. V. Stogney, A. T. Kozakov, A. V. Nikolsky, Solid State Physics, 2019,61, 211—219

2. E. P. Domashevskaya., S. A. Ivkov, O. V. Stogney, A. V. Sitnikov // 8th International Conference on Nanotechnology and materials science, Netherlands, Amsterdam, April 24—26, 2019,81

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПОКРЫТИЙ, ОСАЖДЕННЫХ НА ПОРИСТЫЙ АНОДНЫЙ ОКСИД АЛЮМИНИЯ

Р. Г. Валеев[1], В. В. Кривенцов[2]
[1]*УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия*
[2]*Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
e-mail: rishatvaleev@mail.ru, тел.: +7 (3412) 4-301-63

Благодарности: *работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки (проект № 121030100002-0). XAFS исследования проводились с использованием оборудования ЦКП «Сибирский центр синхротронного излучения» FEL/VEPP-4-VEPP-2000 на базе ИЯФ СО РАН. Исследования РФЭС, СЭМ и АСМ проводились на ЦКП «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН.*

© Валеев Р. Г., Кривенцов В. В., 2022

Исследование также выполнено при поддержке Минобрнауки России по договору № 075-15-2021-1351 в части разработки методологии РФЭС.

Современные направления материаловедения, развивающие методы получения и исследования новых материалов различного назначения на основе наноструктурированных покрытий, как никогда актуальны. Например, контролируемое напыление различных материалов на поверхность пористых сред позволит получить новый класс 2D-материалов, обладающих уникальными оптическими, магнитными, каталитическими, сенсорными свойствами, свойствами фильтрации газов и жидкостей. Следует отметить, что большой вклад в эти свойства вносит развитая поверхность за счет формирования пленок с различной морфологией. На них также сильно влияет структурно-фазовое состояние, локальная атомная и электронная структура [1].

Синхротронные установки дают более точную и достоверную информацию о структуре и электронных свойствах материалов. Например, метод рентгеновской абсорбционной тонкой структуры (XAFS) является мощным методом получения структурной информации, рентгеноабсорбционная ближнекраевая структура (XANES), а рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) позволяет исследовать зарядовые состояния химических элементов и химический состав покрытий, в том числе в пределах определенной толщины. Для визуализации морфологии поверхности широко используются методы сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и различные методы атомно-силовой микроскопии (АСМ).

В данной работе представлен обзор проведенных исследований по темплатным подходам, основанным на формировании нанопокрытий полупроводников (Ge, ZnS, ZnSe, GaAs) и 3d-металлов (Fe, Co, Ni) на поверхности пленок пористого оксида алюминия с высокоупорядоченным и контролируемым диаметром отверстий. Темплаты из пористого оксида алюминия были получены в процессе анодирования алюминиевой фольги. Цель состояла в том, чтобы выявить влияние морфологии поверхности на химическую и локальную атомную структуру покрытий методами XAFS, РФЭС, СЭМ и АСМ исследований полупроводников и 3d металлических нанопокрытий для формирования основы их функциональных свойств.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Valeev, A. Beltiukov, et al. Mater. Res. Express 3, 015902 (2016). doi:10.1088/2053-1591/3/1/015902.

ФОТОЭМИССИОННЫЙ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО И ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л. В. Яшина
Московский государственный университет им М. В. Ломоносова

В докладе дан краткий обзор современных фотоэмиссионных методов исследования, включая спектроскопию (XPS, ARPES со спиновым и временным разрешением), дифракцию (XPD) и микроскопию (PEEM, SPEM). Особое внимание уделено in situ и operando исследованиям в газовых средах, а также методикам pump-probe. Приводятся наиболее яркие примеры использования и сравнение с альтернативными методами исследования.

МЯГКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Р. Г. Чумаков, А. М. Лебедев, В. Г. Станкевич
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: ratibor.chumakov@gmail.com, тел.: +7 (985) 914-36-42

Мягкое рентгеновское излучение широко используется для диагностики спектроскопическими методами различных функциональных материалов. Данный тип излучения обладает большим сечением захвата электронными оболочками исследуемых систем, что позволяет проводить анализ наноразмерных объектов, состояний на поверхности и границах раздела для широкого разнообразия функциональных материалов. Наиболее распространенными измерительными методиками с использованием мягкого рентгеновского излучения является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) и спектроскопия рентгеновского поглощения (XAS). Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия чрезвычайно чувствительна к химическому и валентному составу тонких поверхностных слоев толщиной до 5 нм, что делает ее незаменимой для анализа новых

© Яшина Л. В., 2022

© Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Станкевич В. Г., 2022

функциональных наносистем, поверхностей и элементов микроэлектроники. Спектроскопия рентгеновского поглощения исследует не только химический состав образцов и валентное состояние элементов, но и ориентацию химических связей в образце, что дает уникальную информацию об упорядоченных и слабоупорядоченных объектах, самоорганизованных монослоях.

В Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований специализированная экспериментальная синхротронная станция НаноФЭС [1] [2], использующая мягкое рентгеновское излучение для исследования различных материалов спектроскопическими методами. Станция работает в диапазоне энергий фотонов от 25 до 1500 эВ и предназначена для решения фундаментальных задач в области физики твердого тела, науки о поверхности и наносистем, а также для разработки технологических процессов в микро- и наноэлектронике. На станции реализованы методы фотоэлектронной спектроскопии (PES, UPS), в том числе с угловым разрешением (ARPES), рентгеновской абсорбционной спектроскопии (NEXAFS) и сканирующей зондовой микроскопии. Станция оснащена широким спектром дополнительного оборудования для пробоподготовки, очистки и модификации поверхности образцов.

В докладе представлены оптические схемы, технические характеристики, экспериментальные возможности синхротронной станции НаноФЭС, а также примеры наиболее интересных экспериментальных результатов по исследованию различных функциональных материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Chumakov, K. Menshikov, A. Lebedev, et al., Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv., **2017**, 73, 567.

2. А. М. Лебедев, К. А. Меньшиков, В. Г. Назин, В. Г. Станкевич, М. Б. Цетлин, Р. Г. Чумаков, Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования, **2021**, 10, 44.

КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ИЗУЧЕНИЮ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. Н. Сивков
«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия
e-mail: svn@ipm.komisc.ru, тел.: +7 (212) 39-14-51

В настоящее время, наноструктурированные материалы, к которым, в частности, относятся такие моно углеродные материалы, как углеродные нанотрубки и фуллериты, а также широкий спектр нанокомпозитов, приготовленных на их основе: (1) многостенные углеродные нанотрубки покрытые различными методами наноразмерными слоями и частицами соединений металлов; (2) фуллериты подвергнутые баротермической обработке в инертной среде при температурах выше термической устойчивости молекул фуллеренов. В последние годы большой интерес у научного сообщества вызывают материалы, получаемые методом высокотемпературной карбонизации в инертной среде биологических субстанций, которые воспроизводятся в больших масштабах естественным путем в природе. К таким веществам относится спонгин, фибриальный белок, входящий в состав морских губок. Исследования показали, что после термической обработки в аргоне и азоте, спонгин преобразуется в турбостатный графит с сохранением 3D структуры исходной губки и может быть использован в качестве основы для приготовления катализаторов после осаждения на его поверхность медного покрытия [1].

Для получения достоверной информации о пространственной структуре, атомном и химическом составе поверхности, интерфейса и покрывающих слоев необходимо реализовать комплексный подход с применением комплементарного набора физических методов для объемной (рентгеновская дифрактометрия, рамановская спектроскопия, электронная микроскопия, рентгенодисперсионный анализ) и поверхностной (NEXAFS и XPS с использованием рентгеновского и синхротронного излучения) характеризации изучаемого образца. В настоящем докладе будет продемонстрировано применение комплексного подхода для исследования нанокомпозитов на основе многостенных углеродных натрубок, фуллерита C60 после баротермической обработки и катализатора на основе карбонизированного спонгина морских губок.

© Сивков В. Н., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. Petrenko, I.; et al. Sci. Adv. 2019, 5, eaax2805. https://doi.org/10.1126/sciadv.aax2805.

ВОЗМОЖНОСТИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ СТРУКТУРНОЙ ДИАГНОСТИКИ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Г. Э. Яловега
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: galayalovega@gmail.com, тел.: +7 (928) 771-66-57

Благодарности: *результаты, представленные в докладе, получены в том числе при поддержке гранта РФФИ 19-29-12052 МК.*

Одной из основных задач структурной диагностики биологических систем является определение координационного окружения металла в активных центрах металлопротеинов и дополнительных центрах связывания. Дополнительные центры возникают в результате участия белков в различных физиологических процессах, под воздействием эндогенных факторов и при участии металлов в качестве связующих агентов между белковыми макромолекулами. Спектроскопия рентгеновского поглощения (X-ray absorption spectroscopy-XAS) с использованием синхротронного излучения (СИ) является эффективным методом исследования локальной атомной и электронной структуры веществ и открывает новые перспективы в изучении фундаментальных проблем биологии. Спектроскопия XAS хорошо адаптирована к исследованию таких сложных структурных объектов и может выступать в качестве метода, повышающего точность определения структуры металлических центров по сравнению с традиционными биологическими методами. Особенность метода XAS заключаются в том, что он «чувствует» специфику элементов в исследуемом составе, т. е. локальную структуру окружения металла или лиганда белка можно исследовать отдельно, несмотря на наличие других металлов в образце. Может применяться для изучения структур со сложным химическим составом и низкой концентрацией исследуемого элемента. Кроме того, метод

© Яловега Г. Э., 2022

применим для исследования биологических образцов в различных агрегатных состояниях — аморфном, кристалле или растворе, смеси различных фаз. Еще одним из преимуществ спектроскопии рентгеновского поглощения является то, что она может применяться ко всем металлам в их различных окислительных состояниях. Это особенно важно в случае исследования элементов, для которых другие методы менее доступны.

Биологические системы являются одними из самых сложных объектов для изучения их с помощью метода рентгеновской спектроскопии поглощения, так как они подвержены быстрому разрушению под воздействием рентгеновского излучения. Однако совершенствование базовых методик на основе спектроскопии рентгеновского поглощения и разработка новых современных методик на ее основе позволяют избежать повреждения белков и исследовать их in vitro, а также в процессе воздействия на них специально заданных условий и получать спектры высокого качества и информативности.

В последние десятилетия развитие метода рентгеновской спектроскопии поглощения, в основном, направлено на преодоление ограничений этого метода; поиск новых возможностей для исследования процессов, т. е. проведения in-situ экспериментов; разработку смешанных или модифицированных методов для получения комплексной информации; поиск возможностей для проведения исследований на биологических системах в состояниях как можно ближе приближенным к нативным и не вызывающих разрушение образца под пучком. Реализация всех этих направлений развития XAS невозможна без использования источников СИ нового поколения.

В докладе представлен обзор методик исследования биологических систем, в частности металлопротеинов, основанных на спектроскопии рентгеновского поглощения, которые могут использоваться в сочетании с кристаллографией для повышения точности данных. Будут рассмотрены возможности, преимущества, ограничения и перспективы развития метода рентгеновской спектроскопии поглощения для исследования биологических систем и повышения точности определения кристаллической структуры металлопротеинов.

ЛИТЕРАТУРА

1. (Reviews) G. E. Yalovega, M. A. Kremennaya Structural Diagnostics of Biological Systems Based on X-Ray Absorption Spectroscopy// ISSN 1063—7745, Crystallography Reports, 2020, Vol. 65, No. 6, pp. 813—820.

2. N. N. Novikova, M. V. Kovalchuk, E. A. Yurieva, O. V. Konovalov, N. D. Stepina, A. V. Rogachev, G. E. Yalovega, O. V. Kosmachevskaya, A. F. Topunov,

S. N. Yakunin The enhancement of metal-binding properties in hemoglobin: the role of mild damaging factors//Phys. Chem. B2019, 123, 8370—8377.

3. *Oleg V.* Konovalov, *Natalia N.* Novikova, *Mikhail V.* Kovalchuk, *Galina E.* Yalovega, *Alexey F.* Topunov, *Olga V.* Kosmachevskaya, *Eleonora A.* Yurieva, *Alexander V.* Rogachev, *Alexander L.* Trigub, *Maria A.* Kremennaya, *Valentin I.* Borshchevskiy, *Daniil D.* Vakhrameev, *Sergey N.* Yakunin XANES measurements for studies of adsorbed protein layers at liquid interfaces// Materials. 2020, V.13(20). P. 4635.

4. Galina Yalovega, Grigory Smolentsev, Alexander Soldatov, Jayna Chan, Martin Stillman Cd- metallothionein: analysis of local atomic and electronic structures, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 575 (2007) P. 168—171.

5. F. Boffi, I. Ascone, S. Della-Longa, M. Girosole, G. Yalovega, A. V. Soldatov, A. Varoli-Piazza, A. Congiu Castellano X-ray absorption near-edge spectroscopy of transferrins: a theoretical and experimental probe of the metal site local structure Eur. Biophys. J. —(2003). — N.32. — P. 329—341.

АТОМНОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ ОЛОВО КИСЛОРОД

С. Ю. Турищев, О. А. Чувенкова, С. И. Курганский, М. Д. Манякин, Е. В. Паринова, С. В. Рябцев
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: tsu@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 240-66-53

Благодарности: *исследования выполнены в рамках проекта РФФИ № 21-53-12042 ННИО_а. Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Оксиды олова разнообразных морфологических форм являются перспективными материалами для производства новых электронных устройств, например резистивных датчиков газов с расширенными характеристиками. Миниатюризация и низкое энергопотребление, высокая селективность и скорость срабатывания достигаются благодаря чрезвычайно развитым технологическим подходам, направленным на создание активных нанослоев малой толщины, гранулированных покрытий, нитевидных кристаллов и иных структур системы олово-кислород. Комплексные исследования морфологии, локального атомного и электронного строения современными методами электронной микроскопии, рентгеновской и синхротронной спектроскопии ближней тонкой структуры краев поглощения высокого разрешения (XANES), фотоэлектронной спектроскопии (XPS), фотоэмиссионной микроскопии (PEEM) и иными, в сочетании с расчетами и моделированием из первых принципов являются необходимыми для прогнозирования свойств получаемых объектов на основе системы олово-кислород в современной технике и технологиях.

В докладе обсуждается имеющийся задел, современное состояние и перспективы исследований функциональных материалов системы олово-кислород и различных структур на их основе как результат применения широкого ряда технологических подходов к их формированию. Будет приведен различный опыт проведения комплексных экспериментальных и теоретических исследований, выполненных научной группой Воронежского государственного университета включающий выполнение синхротронных исследований атомного и электронного строения.

© Турищев С. Ю., Чувенкова О. А., Курганский С. И., Манякин М. Д., Паринова Е. В., Рябцев С. В., 2022

ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЛАГЕНОВЫХ КАРКАСОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УСТАНОВКИ «SYNCHROTRON-LIKE»

С. С. Антипов[1], **Д. В. Буркова**[1], **В. Д. Анохова**[2], **О. О. Бабич**[2], **М. В. Коробенко**[2], **А. С. Нарикович**[2], **Е. Г. Чупахин**[2]
[1]*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1*
[2]*ФГБАУ ВО «БФУ им. И. Канта», Калининград*
236042 ул. Александра Невского 14
e-mail: ss.antipov@gmail.com, тел.: +7 (960) 11-56-70

Направленное формирование структуры культуры живых клеток — важнейшая задача тканевой инженерии. Новые материалы для трехмерных каркасов живых тканей имеют решающее значение для массового внедрения протоколов регенеративной медицины. В этой рукописи мы демонстрируем результаты исследования молекулярной структуры колла-

© Антипов С. С., Буркова Д. В., Анохова В. Д., Бабич О. О., Коробенко М. В., Нарикович А. С., Чупахин Е. Г., 2022

гена *Dosidicus gigas* и раскрываем возможность получения тонкого мембранного материала. Коллагеновая мембрана характеризуется высокой гибкостью и пластичностью, а также механической прочностью. В данной рукописи показаны технология получения коллагеновых матриксов, а также результаты исследований их механических свойств, морфологии поверхности и процесса пролиферации клеток. Исследование культуры выращенной живой ткани на поверхности коллагенового каркаса методом рентгеновской томографии на синхротронном источнике позволяет ремоделировать структуру внеклеточного матрикса. Установлено, что матриксы, полученные из коллагена кальмара, характеризуются высокой степенью упорядоченности фибрилл, высокой шероховатостью поверхности и обеспечивают эффективный направленный рост культуры клеток. Полученный материал обеспечивает формирование внеклеточного матрикса и характеризуется ограниченным временем сорбции живой тканью.

Коллаген, выделенный из мантии кальмара вида *Dosidicus gigas*, был использован для создания каркасов для культивирования живых клеток. Белковая фракция содержит коллагены типа I, II и III. Технология получения матриксов на основе коллагена позволяет получать этот материал в промышленных масштабах. В процессе формирования скаффолдов и тонких пленок на основе коллагена происходит самоструктурирование фибрилл при сохранении их третичной структуры. Топография поверхности коллагенового матрикса показала наличие развитой шероховатой поверхности, обеспечивающей высокую адгезию клеток. Механические свойства полученного материала позволяют использовать его в хирургической практике в качестве биорезорбируемого барьерного материала с заданным временем сорбции и контролируемой биодеградацией. Полученные каркасы не являются цитотоксичными и показали высокую биосовместимость. Прямая визуализация процесса пролиферации клеток на поверхности коллагенового каркаса методом синхротронного ретген-излучения позволила провести ремоделирование пространственной структуры внеклеточного матрикса, что в дальнейшем планируется использовать в технологии печать трехмерных каркасов для получения живой ткани с заданной морфологией и структурой. Образовавшиеся коллагеновые каркасы проявляют себя как естественный источник протеиногенных аминокислот и обеспечивают высокую скорость формирования внеклеточного матрикса.

РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОГО БИОМИМЕТИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕЙСА ЭМАЛЬ — БИОКОМПОЗИТ И ИССЛЕДОВАНИЯ ЕГО МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНИКИ СИНХРОТРОННОЙ СУБМИКРОННОЙ ATR-FTIR МИКРОСПЕКТРОСКОПИИ И МУЛЬТИВАРИАТИВНОГО АНАЛИЗА

П. В. Середин, Д. Л. Голощапов
«ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: paul@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 208363

Эмаль зуба человека является самой твердой тканью в организме, обладает великолепными механическими свойствами благодаря уникальной биокомпозитной структурной организации [1,2]. Для восстановления зубной эмали был разработан набор разнообразных материалов, однако с их помощью так и не удалось достичь устойчивой реставрации вследствие несовершенства комбинации между указанными материалами и природной эмалью. По данной причине основной стратегией современной терапевтической стоматологии является минимальное инвазивное лечение при максимальном сохранении естественной здоровой зубной ткани [3]. При этом качество и долговечность реставрации будет определяться устойчивостью связи эмаль/композит [4]. С использованием биомиметической стратегии и биоинспирированных материалов в нашей работе предложен новый технологический подход к созданию гибридного переходного слоя между эмалью и стоматологическим биокомпозитом. Для этого на этапе реставрации зубной эмали используются кондиционер с аминокислотным бустером на основе набора полярных аминокислот (лизин, аргинин, гиалуроновая кислота), кальциевая щелочь и модифицированный адгезив на основе BisGMA и нанокристаллического карбонатзамещенного гидроксиапатита НАр. Особенности сформированного с использованием предложенной стратегии гибридного интерфейса удалось понять с помощью методов многомерного статистического анализа спектральной информации, собранной с использованием техники синхротронной ИК-микроспектроскопии. Полученные результаты указывают на возможность формирования бондинга, имитирующего свойства природной ткани с контролируе-

© Середин П. В., Голощапов Д. Л., 2022

мыми молекулярными свойствами у гибридного слоя. Благодаря диффузии компонент кондиционера с аминокислотным бустером, кальциевой щелочи и модифицированного НАр адгезива в области гибридного интерфейса образуется структура, которая должна стабилизировать восстановленный кристаллический слой эмали. Разработанная технология может быть положена в основу индивидуального персонализированного подхода реставраций зубной эмали.

ЛИТЕРАТУРА

1. K.A. DeRocher. *Nature.,* **2020**, 583:66.
2. E. Beniash. *Nat. Commun*., **2019**, 10: 4383.
3. H. Desai. *Dent. J.*, **2021**, 9:147.
4. J. Perdigão. *Jpn. Dent. Sci. Rev*., **2020**, 56: 190.

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПИРОХЛОРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3D-МЕТАЛЛОВ

С. В. Некипелов[1], Н. А. Жук[2], О. В. Петрова[1], Д. В. Сивков[1], К. А. Бакина[1], Р. Н. Скандаков[1], В. Н. Сивков[1]
[1]*«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия*
[2]*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина*
e-mail: NekipelovSV@mail.ru, тел.: 8 (8212) 391451

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ (МК-3796.2021.1.2), РФФИ и Республики Коми в рамках научных проектов № 19-32-60018 и 20-42-110002 р-а и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части исследований NEXAFS-спектроскопии.*

Соединения со структурой пирохлора вызывают неиссякаемый интерес ученых в связи с проявлением широкого спектра практически полезных свойств, таких как фотокаталитические, диэлекрические, электрооптические и пьезоэлектрические свойства. При этом сложные висмутсодержащие пирохлоры отличаются своими превосходными диэлектрическими свойствами. Их отличает сравнительно невысокая температура синтеза и химическая инертность по отношению к Ag-электродам. Полезным обстоятельством является и тот факт, что сложным висмутсодержащим пирохлорам отвечают широкие области гомогенности благодаря структурной гибкости кристаллической решетки пирохлора. Находясь в пределах одного структурного типа и меняя качественный и количественный составы, в том числе допируя структуру малыми содержаниями атомов 3d-металлов, можно существенно варьировать свойства пирохлора, что позволяет изучать влияние химического состава на его физико-химические характеристики.

В представленной работе показаны результаты исследования методами NEXAFS- и XPS-спектроскопии электронного состояния и характера межатомных взаимодействий атомов 3d-металлов в титанатах ниобатах и танталатах висмута со структурой пирохлора. Все образцы были исследованы методами рентгеноабсорбционной (NEXAFS) спектроскопии с использование синхротронного излучения накопителя BESSY II (Берлин, Германия) и станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий (г. Москва, Россия) и рентгеноэлектронной (XPS) спектроскопии с использованием рентгеновского спектрометра Thermo Scientific ESCALAB250Xi в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка Санкт-Петербургского университета. На основании спектральных исследований было показано, что атомы марганца, кобальта, никеля и меди в данных твердых растворах висмутсодержащие пирохлоров присутствует в основном в степени окисления +2, а железа +3.

ФОТОНИКА ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР

О. В. Овчинников, М. С. Смирнов
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: Ovchinnikov_O_V@rambler.ru, тел.: +7 (473) 220-87-80

Благодарности: *исследования выполнены при поддержке грантами Госзадания Минобрнауки РФ (№ 3.6655.2017/8.9, ФЗГУ-2020-0035), Российского Научного Фонда (№ 19-12-00266, № 22-12-00232),*

© Некипелов С. В., Жук Н. А., Петрова О. В., Сивков Д. В., Бакина К. А., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н., 2022

© Овчинников О. В., Смирнов М. С., 2022

РФФИ (№ 15-02-04280-а, № 17-02-00748-а, № 17-52-12034 ННИО_а, № 18-52-00037-Бел_а, № 20-52-81005 ЕАПИ_т), а также грантом Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (проект НШ-2613.2020.2).

Рассматриваются актуальные вопросы фотоники гибридных наноструктур, построенных на основе полупроводниковых коллоидных квантовых точек различных составов. Наибольшее внимание уделено взаимосвязи принципов их построения, а также физико-химических и структурных свойств компонентов с люминесцентными и нелинейно-оптическими свойствами, наблюдаемыми при взаимодействии компонентов. Рассматриваются преимущественно ассоциаты, состоящие из квантовых точек и органических молекул (J-агрегатов) красителей, а также из квантовых точек и плазмонных наночастиц. Обсуждается участие локализованных состояний квантовых точек в процессах передачи электронных возбуждений между компонентами ассоциатов.

Квантово-размерный эффект определяет возможности управления не только максимумом экситонного поглощения, но и параметрами люминесценции полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ). Дополнительная функционализация интерфейсов КТ молекулами органических красителей, их H- и J-агрегатами, фрагментами ДНК, а также сопряжение КТ с плазмонными наночастицами (ПНЧ) и пр. обеспечивают дополнительные возможности для управления параметрами люминесценции (интенсивность, форма и полуширина полосы, время жизни люминесценции), а также нелинейно-оптического отклика, имеющего накопительный характер (нелинейное поглощение и рефракция лазерных импульсов, возникающие при переходах с участием уровней реальных состояний КТ, локальных уровней дефектов, а также состояний компонентов гибридных ассоциатов).

Перечисленные процессы принципиально важны для применения в различных устройствах фотоники, таких как электролюминесцентные и лазерные излучатели; люминесцентные сенсоры; люминесцентные индикаторы температуры, показателя pH; системы управления интенсивностью, фазой излучения, эффективные фотосенсибилизаторы синглетного кислорода для фотодинамической терапии; фотобактерицидные покрытия; фотокатализаторы; солнечные элементы; высококонтрастные системы люминесцентного мониторинга биообъектов *in vivo*, *in vitro*.

Гибридная ассоциация КТ с различными органическими молекулами реализуется чаще всего за счет ковалентного взаимодействия, водородных

связей, диполь-дипольного взаимодействия, а также вторичной функционализации. Подобные взаимодействия открывают возможности для возникновения новых, нехарактерных отдельным компонентам «гибридных» люминесцентных свойств, определяющихся процессами безызлучательного переноса энергии и носителей заряда между компонентами ассоциатов при их фотовозбуждении.

Наряду с указанными выше процессами экситон-экситонного взаимодействия большой интерес представляют системы с плазмон-экситонной связью, собранные из плазмонных наночастиц и полупроводниковых КТ. Важной общей особенностью большинства используемых образцов КТ — узкие экситонные пики люминесценции, имеющие значительную степень перекрытия с пиками экстинкции плазмонных НЧ. В таком случае интерпретация наблюдаемых эффектов может быть в значительной степени затруднена. Эффективное тушение люминесценции может возникать как в результате безызлучательного переноса энергии от КТ к плазмонной НЧ, так и вследствие фотопереноса электронов в подобных системах. Одним из наименее изученных вопросов в данной области является зависимость эффектов плазмон-экситонного взаимодействия от механизмов люминесценции КТ. В случае ловушечной люминесценции особенности влияния на ее параметры присутствия нанорезонаторов остаются малоизученными.

Таким образом, рассматриваемые в докладе закономерности люминесценции коллоидных КТ и их ассоциатов с органическими молекулами красителей, а также плазмонными наночастицами, с участием уровней структурно-примесных дефектов в КТ имеют важное значение для глубокого понимания физической природы стоксова сдвига и механизмов возникновения люминесценции в КТ, закономерностей фемто-, пико- и наносекундной динамики формирования и распада экситонов и вклада в нее процессов с участием уровней дефектов, решение проблемы спектральной настройки оптических резонансов компонентов гибридных наноструктур, детализации механизмов обмена электронными возбуждениями в случае гибридных ассоциатов КТ с молекулами красителей.

Основные обсуждаемые вопросы:

— механизмы переходов с участием уровней дефектов в КТ, обеспечивающих полосы рекомбинационной люминесценции, а также возможности применения принятых в люминесценции полупроводников моделей излучательной рекомбинации;

— роль мелких и глубоких уровней дефектов коллоидных КТ в формировании их люминесцентных и нелинейно-оптических свойств;

— роль локализованных состояний в формировании динамики распада экситонов в КТ, включая сложную кинетику их люминесценции;

— механизмы участия уровней дефектов в процессах безызлучательного переноса энергии и фотопереноса носителей заряда в гибридных ассоциатах на основе КТ и молекул красителей

— сравнительный анализ трансформации параметров экситонной и ловушечной люминесценции в присутствии нанорезонаторов;

— проявления гибридной ассоциации в нелинейном поглощении и рефракции лазерных импульсов.

Осуждается комплексный подход к исследованию механизмов и стадий фотофизических процессов, определяющих люминесцентные свойства гибридных ассоциатов на основе коллоидных квантовых точек сульфидов металлов, обладающих заметной концентрацией структурных дефектов и молекул красителей, основанный на использовании методик стационарной и время-разрешенной спектроскопии, включая фото- и темостимулированную люминесценцию.

Обосновывается резонансный безызлучательный перенос энергии возбуждения в гибридных ассоциатах красителей и коллоидных квантовых точек с непосредственным участием уровней центров рекомбинационной люминесценции в КТ.

Устанавливается взаимосвязь свойств размерно-зависимой люминесценции и участвующих в них уровней дефектов КТ сульфида серебра и их гибридных ассоциатов с красителями с нелинейным поглощением и рефракцией наносекундных импульсов второй гармоники YAG: Nd лазера.

Обсуждается специфическое влияние плазмон-экситонного взаимодействия на параметры рекомбинационной люминесценции, свойства мелких локализованных состояний и процессы обмена электронными возбуждениями в гибридных ассоциатах различного строения, формируемых при декорировании интерфейсов core/shell квантовых точек малыми наночастицами золота, а также при декорировании плазмонных наночастиц полупроводниковыми квантовыми точками.

БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Л. А. Осминкина
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Физический факультет, кафедра медицинской физики, Москва, Россия
e-mail: osminkina@physics.msu.ru

Разработка новых интеллектуальных систем доставки лекарств для преодоления нежелательных побочных эффектов и максимизации терапевтической эффективности химиотерапии раковых заболеваний является одной из основных задачей современной медицины. Для этих целей ведутся активные исследования различных носителей лекарств нанометровых размеров (наноконтейнеров).

Использование наночастиц пористого кремния в качестве основы наноконтейнеров обусловлено наличием у этих твердотельных наноматериалов уникальных свойств высокой биосовместимости и полной биодеградируемости в нетоксичную кремниевую кислоту. Пористая структура наночастиц (значение пористости может достигать до 80 % их объема) обеспечивает большую емкость загрузки для эффективной доставки лекарственных препаратов. Простота методов модификации поверхности наночастиц обеспечивает достижимость специфической адресной доставки различных препаратов (гидрофобных и гидрофильных лекарств, радиофармацевтических препаратов, белков, пептидов, ДНК и проч.) в клетки. Наличие у пористых наночастиц кремния эффективной люминесценции дает возможность их использования в качестве контрастных агентов для биовизуализации клеток и тканей. Свойства пористых наночастиц кремния выступать в роли фотосенсибилизаторов, сенсибилизаторов высокочастотного электромагнитного поля и терапевтического ультразвука обеспечивают их терапевтические функции и возможности стимулированного выхода лекарств из пор наноконтейнеров.

© Осминкина Л. А., 2022

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА С НАСТРАИВАЕМЫМ ПЛАЗМОННЫМ ОТКЛИКОМ В ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

А. И. Чукавин, А. Н. Бельтюков
«УдмФИЦ УрО РАН», Ижевск, Россия
e-mail: chukavin@udman.ru, тел.: +7 (3412) 43-18-94

В настоящее время, композитные мембраны, декорированные плазмонными наночастицами активно изучаются благодаря множеству различных функциональных применений, от сенсоров нового поколения до систем разделения смесей жидкостей или газов [1]. Поскольку частота плазмонного резонанса определяется материалом, формой и размерами наночастиц, соответствующим подбором последних можно достигать необходимых характеристик устройств. На сегодняшний день в силу минимальных омических потерь, стойкости к окислению на атмосфере и благодаря отклику в видимой области спектра основными материалами экспериментальной наноплазмоники являются золото и серебро. В настоящей работе исследовались особенности формирования наночастиц золота при вакуумном термическом напылении на поверхность мембраны анодного оксида алюминия (АОА) в зависимости от параметров его пористой структуры (диаметры пор, расстояние между порами), количества осаждаемого материала и режимов отжига, а также влияние морфологии полученных образцов на их оптические свойства.

Установлены закономерности формирования наночастиц золота при вакуумном термическом напылении пленок золота толщиной 10, 15 и 20 нм на поверхность мембраны АОА. Независимо от диаметра пор и расстояния между ними пленки золота имеют мелкокристаллическую зеренную структуру и один широкий минимум в спектрах пропускания. В результате отжига при 400 °С происходит формирование наночастиц золота, проходящее через стадии разрыва пленки на нитеобразные червячные структуры. Отжиг может быть остановлен на одной из стадий, вследствие чего, в зависимости от морфологии структур золота, на спектрах возможно возникновение дополнительных плазмонных пиков. Таким образом, частота плазмонного отклика в видимой и блИК области спектра может контролироваться путем подбора соответствующих толщин покрытий золота и условий термического отжига.

© Чукавин А. И., Бельтюков А. Н., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. Liu Y and *Ma Y. Front. Phys*., **2020**, 8:312.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ TiO_2 МЕТОДАМИ EXAFS И EXELFS СПЕКТРОСКОПИИ

Э. Ф. Хаметова[1, 2], **О. Р. Бакиева**[2]
[1]*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*
[2]*Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН, Ижевск, Россия*
e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com, тел.: +7 (965) 585-25-92

Благодарности: *работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ № 121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.*

В настоящее время огромное внимание научных групп направлено на создание и исследование новых наноразмерных материалов. Часто высокие функциональные свойства достигаются за счет строго определенной локализации атомов. Поэтому для понимания поведения и свойств материалов в различных условиях необходима информация о локальной атомной структуре и ее изменениях.

В спектроскопии существует несколько методов исследования локальной атомной структуры: EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), где регистрируется процесс поглощения материалом рентгеновского излучения, и EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure), где происходит регистрация потери энергии электронов на локальном окружении возбуждаемого атома. EXELFS спектры являются EXAFS-подобными

© Хаметова Э. Ф., Бакиева О. Р., 2022

и формируются в результате когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном атомном окружении возбуждаемого атома. Спектры, полученные как при рентгеновском, так и при электронном возбуждении внутреннего уровня атома вещества, несут в себе информацию о параметрах локальной атомной структуры — парциальных координационных числах, длинах химических связей, параметрах термического рассеяния атомов.

В настоящей работе объектами исследования являлись оксиды титана TiO2 со структурами анатаза, брукита, рутила и с рентгеноаморфной структурой. Благодаря своим высоким технологическим свойствам различные модификации оксида титана используются в разных областях, таких как хранение энергии, фотокатализ, мембраны и т. д. Объекты исследования имеют одинаковую химическую формулу, однако их атомная структура существенно отличается. При этом различия можно наблюдать на исходных экспериментальных спектрах. Фаза рутила является термодинамически стабильной при комнатной температуре и атмосферном давлении. Брукит и анатаз метастабильны при нормальных условиях, но трансформируются в рутил только при нагревании выше 400 °C. Все образцы были предварительно аттестованы методами рентгеновской и электронной дифракции. Анатаз и рутил имеют тетрагональную форму элементарной ячейки, пространственная группа — I41/amd и P42/mnm соответственно. Форма элементарной ячейки брукита — орторомбическая, а пространственная группа — Pbca. Аморфная модификация диоксида титана имеет кубическую форму элементарной ячейки, пространственная группа — Fm3m.

Параметры локального окружения атомов в диоксидах титана были определены с помощью анализа EXAFS спектров титана и EXELFS спектров кислорода. EXAFS спектры K края Ti (4965 эВ) были получены на EXAFS канале Курчатовского центра синхротронного излучения. EXELFS спектры за K краем возбуждения кислорода (532 эВ) были получены в режиме «на просвет» в лаборатории МГУ с использованием монохроматического микроскопа Carl Zeiss Libra 200 MC, при энергии падающих электронов 200 кэВ. Спектры EXAFS и EXELFS были обработаны с помощью пакета программ IFeffit. Параметры рассеяния (амплитуда и фаза обратного рассеяния, парциальные фазовые сдвиги) рассчитывались по программе Feff-8. Проведен сравнительный анализ полученных результатов локальной атомной структуры.

КОМПОЗИТНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ И ЧАСТИЦ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ БИОСЕНСОРИКИ МЕТОДОМ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Л. А. Осминкина, А. Д. Карташова, О. Д. Гюппенен, И. В. Божьев, К. А. Гончар, Ж. В. Самсонова, Н. В. Первушин, Я. В. Евстратова, А. А. Кудрявцев, А. А. Елисеев
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: osminkina@physics.msu.ru

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00297).*

Разработка высокочувствительных нано-биосенсоров для качественного и количественного экспресс-анализа вирусов и микроорганизмов, а также маркеров социально-значимых заболеваний является в настоящее время крайне востребованной задачей. Действительно, быстрое обнаружение и идентификация вирусов и бактерий остается серьезной проблемой. Как показала текущая пандемия, стремительное распространение новых штаммов вирусов, отсутствие специфических противовирусных лекарств и времязатратность получения новых эффективных вакцин приводит как к заражению и смерти миллионов людей, так и к значительному социально-экономическому ущербу. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в борьбе с некоторыми бактериальными инфекционными заболеваниями, существует ряд инфекций, диагностика которых до сих пор затруднена. Поскольку современные методы обнаружения вирусов и бактерий основаны на длительных лабораторных методах, существует острая необходимость в разработке биосенсоров, которые позволят быстро обнаруживать их в местах скопления людей, в медицинских учреждениях, школах, на предприятиях. В представленной работе разработаны и изучены физико-химических свойства различных ГКР (гигантское комбинационное рассеяние света)-активных композитных сенсорных наноматериалов на основе наноструктур кремния с внедренными частицами

© Осминкина Л. А., Карташова А. Д., Гюппенен О. Д., Божьев И. В., Гончар К. А., Самсонова Ж. В., Первушин Н. В., Евстратова Я. В., Кудрявцев А. А., Елисеев А. А., 2022

плазмонных металлов (серебро или/и золото) для комплексного безметочного определения метаболитов патогенных бактерий, диагностики вирусов и бактерий в образцах биологических жидкостей — разработка систем «лаборатория на чипе», изучения внутриклеточных процессов, а также определения онкомаркеров.

МОНИТОРИНГ РАСТВОРЕНИЯ КРЕМНИЕВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

У. А. Цурикова, Л. А. Осминкина, М. Б. Гонгальский
Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Физический Факультет, Москва, Российская Федерация
e-mail: ua.natashina.phys.msu.ru, тел.: +7 (963) 756-17-10

В работе изучена динамика растворения наночастиц пористого кремния (НЧ ПК) в модельной жидкости на примере натрий-фосфатного буфера (наночастицы находились в диализном мешке), и в живых клетках с помощью таких оптических методов, как микро-спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС), и люминесцентная микроскопия. Водные суспензии НЧ ПК получены ультразвуковой диспергацией пористых нанонитей кремния, которые были синтезированы методом металл-стимулированного химического травления пластин кристаллического кремния.

Микрофотография просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) НЧ ПК представлена на Рис. 1a. НЧ ПК имеют размеры 100—200 нм в диаметре. Наличие ярких колец в дифракционной картине (см вставку Рис. 1a) указывает на то, что наночастицы представляют собой агломераты мелких нанокристаллов кремния — квантовых точек (КТ).

Методом спектроскопии КРС показано, что при инкубации НЧ ПК в натрий-фосфатном буфере при температуре 37 °C происходит их полное растворение, на что указывает низкочастотный сдвиг максимума и падение интенсивности сигнала после 6 часов, а затем и полное его исчезновение после 24 часов инкубации (см. рис. 1b). Размер КТ кремния рассчитывался из положения максимума в спектре КРС формуле [1]:

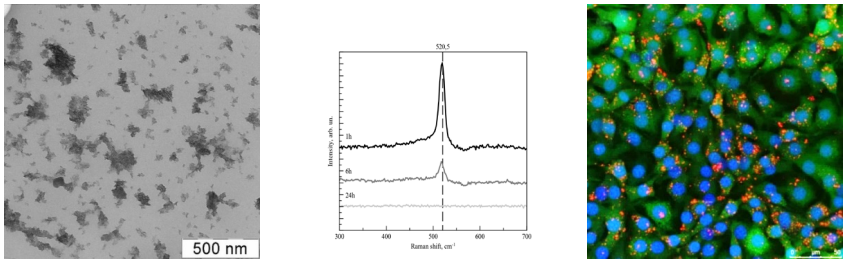
$$D = 0.543\left(\frac{52.3}{\Delta\omega}\right)^{0.63}, \qquad (1)$$

© Цурикова У. А., Осминкина Л. А., Гонгальский М. Б., 2022

где $\Delta\omega$ — сдвиг максимума спектра КРС КТ относительно 520,5 см$^{-1}$ (максимум сигнала КРС кристаллического кремния). Рассчитанный по формуле (1) размер КТ кремния после одного часа инкубации составлял 4.6 нм, а после 6 часов — 3,6 нм.

Изучены цитотоксические свойства НЧ ПК по отношению к клеткам 3T3 NIH. Показано отсутствие их токсичности вплоть до концентраций 0.2 мг/мл при длительных (до 10 дней) временах инкубации с клетками.

Исследовалось растворение НЧ ПК in vitro в клетках 3T3 NIH с использованием методов КРС и конфокальной люминесцентной микроскопии. Показано тушение фотолюминесценции наночастиц и падение интенсивности их сигнала КРС при длительных временах инкубации, что указывает на полное растворение НЧ ПК в клетках.



a *b* *c*

Рис. 1 a) микрофотография НЧ ПК, полученная с помощью ПЭМ, в левом верхнем углу — дифракционная картина электронов от НЧ ПК; **b)** спектры КРС НЧ ПК после инкубации в натрий-фосфатном буфере при температуре 37 °C в течение 1, 6, 24 часов; **c)** конфокальная микроскопия клеток 3T3 NIH после инкубации 24 часа с НЧ ПК (наночастицы видны как яркие светлые точки).

ЛИТЕРАТУРА

1. I. H. Campbell and P. M. Fauchet, Solid State Commun., 1986, 58(10), P739–P741.

2. V. Paillard, P. Puech, M. A. Laguna, R. Carles, B. Kohn and F. Huisken, J. Appl. Phys., 1999, 86, P1921–P1924.

3. M. B. Gongalsky, U. A. Tsurikova, C. J. Storey, Y. V. Evstratova, A. A. Kudryavtsev, L. T. Canham, L. A. Osminkina, Faraday Discussions, 2019.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО НАКЛОНА МОЛЕКУЛ $C_{60}F_{18}$ НА ПОДЛОЖКЕ ИЗ ЗОЛОТА МЕТОДОМ РФЭС НА СИ

В. К. Макаров, Р. Г. Чумаков
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
doc.makarov.mag@gmail.com тел.: +7 (925) 334-45-56

Одним из достоинств рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) является его способность к приповерхностному анализу, помимо наиболее известных возможностей, как определения химического состава образца, а также определения валентности исследуемых объектов. Под поверхностным анализом подразумевается изменение средней длины вылета электронов с поверхности при изменении энергии источника излучения. Средняя длина вылета электрона характеризуется его неупругой длиной свободного пробега, чья зависимость от кинетической энергии вылетевших электронов хорошо изучена и выражена в так называемую универсальную кривую неупругой длины свободного пробега (*inelastic mean free path — IMFP*) [1]. Возможность изменения глубины анализа в методе РФЭС очень ограничена для традиционных рентгеновских источников излучения, однако использование синхротронного излучения (СИ), которое охватывает широкий диапазон энергий фотонов, сильно расширяет возможности метода и позволяет изучать приповерхностные слои вплоть до 1—2 атомарных слоев. Поэтому развитие РФЭС с использованием СИ является первоочередной задачей любой лаборатории, имеющей доступ к такому мощному средству для исследований в областях передовой науки.

В настоящей работе в качестве объекта исследования были выбраны молекулы фторида фуллерена $C_{60}F_{18}$, адсорбированные в качестве монослоя на подложке из золота $C_{60}F_{18}$/Au (111). Ставилась задача в установлении коллективного угла наклона монослоя таких молекул методом РФЭС с использованием СИ. В работе были объединены теория фотоэлектронной дифракции с экспериментальными данными РФЭС для анализа таких систем (рис. 1). Разработан алгоритм для обработки экспериментальных данных, а также сравнения их с моделированными данными из дифракционных методов. Найдена коллективная ориентация монослоя таких молекул в 42 градуса относительно нормали к поверхности. Были высказаны предположения о двойной ориентации, где молекулы близко к перпендикулярному положению также могут сосуществовать с основным направлением наклона электрического дипольного момента молекулы.

© Макаров В. К., Чумаков Р. Г., 2022

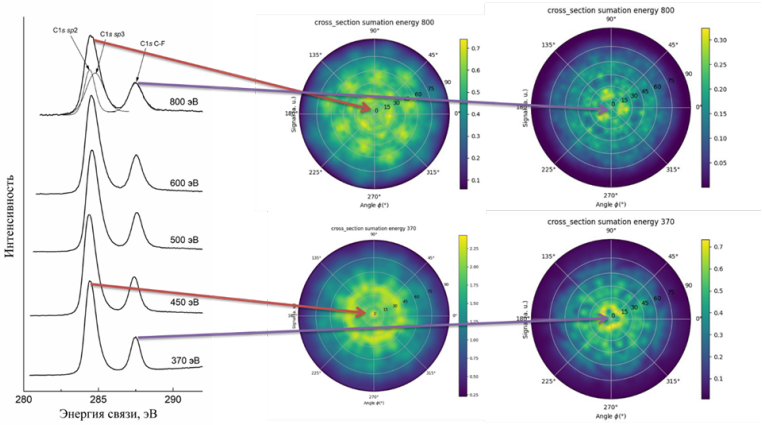


Рис. 1. Соответствие экспериментальных пиков РФЭ спектра с рассчитанными картинами дифракции для атомов углерода с разными химическими связями

ЛИТЕРАТУРА

1. *Seah M. P.*, *Dench W. A.* Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids // Surface and Interface Analysis. 1979. Vol. 1, № 1. P. 2—11.

СОСТАВ ТОНКИХ СЛОЕВ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ (A^{III}, FE)B^{V}

И. А. Федотов, **Д. Е. Николичев, А. В. Кудрин, Н. С. Широких**
ННГУ им. Н. И. Лобачевского, просп. Гагарина, 23, Нижний Новгород, 603950
e-mail: fedotov.ilya.alekseevich@gmail.com, тел.: 8 (930) 713 44 16

Активные исследования структур, в которых носители заряда преимущественно поляризованы по спину, обусловлены развитием спинтроники. Интерес к разбавленным магнитным полупроводникам на основе соединений $A^{III}B^{V}$, сильно легированных атомами Fe, обозначен потенциальной возможностью использования одновременно ферромагнитных и полупроводниковых свойств в приборах, и успехи по получению таких структур с температурой Кюри близкой к комнатной отражены в [1]. Важным является изучение химических процессов, при их формировании. Очевидно, что изменение соотношения концентраций магнитных компонентов является первопричиной вариации свойств таких систем.

Разбавленный магнитный полупроводник GaAs: Fe толщиной ~40 нм был выращен на подложке GaAs методом импульсного лазерного осаждения в вакууме. Исследования состава проводились методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на сверхвысоковакуумном комплексе Omicron Multipobe RM. Эмиссия электронов происходила под воздействием немонохроматизированного характеристического рентгеновского излучения Al K_{α} с энергией 1486,7 эВ.

Послойное удаление материала в вакуумных условиях производилось с помощью источника ионов Ar^{+}, при этом ускоряющее напряжение составляло 1 кВ, диаметр пучка ~20 мм, угол наклона оси источника к нормали образца составлял 45°, ток ионов — 4 мкА. Идентификация химических элементов, присутствующих в анализируемой структуре, производилась по положению фотоэлектронных пиков: Ga 3*d*, As 3*d*, Fe $2p_{3/2}$, C1*s* и O 1*s* на спектре с использованием атласов эталонных спектров [2]. Для расчета концентрации элементов применялся уточненный метод факторов относительной чувствительности согласно специально разработанной методике [3].

© Федотов И. А., Николичев Д. Е., Кудрин А. В., Широких Н. С., 2022

Для слоя GaAs: Fe проведен элементный и химический анализ. Результатом являются профили распределения по глубине структуры концентрации элементов и их химических состояний. Показано, что содержание атомов Ga и As примерно равны по всей глубине анализа. На поверхности образца присутствует оксидные соединения и углерод. Важно, что в выращенном слое есть область ~ 25 нм, в которой концентрация Fe не изменяется, и в среднем составляет 17,7 %.

Из полученных профилей следует, что атомы железа диффундируют из слоя ферромагнитного полупроводника в сторону подложки, при этом, концентрация Fe на участке толщиной ~ 15 нм спадает до нуля. В ходе химического анализа не было обнаружено связей Fe-Fe, что свидетельствует об отсутствии фазы металлического железа. Применяемый метод анализа является эффективным для оценки качества получаемых полупроводниковых спинтронных систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. V. Kudrin et al., *Semicond. Sci. Technol.*, **35** 125032 (2020).
2. B. V. Crist, XPS International Inc., V. 1—2, Ames, Iowa (1999).
3. A. V. Boryakov et al., J. of Elect.Spectr. and Related Phen., **50**, 1443 (2018)

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК SI: CO

Н. С. Широких, Д. Е. Николичев, М. В. Дорохин, И. А. Федотов
ННГУ им. Н. И. Лобачевского, просп. Гагарина, 23,
Нижний Новгород, 603950
e-mail: shirokikhnikita1@yandex.ru, тел.: +7 (912) 334-17-46

Термоэлектрические преобразователи считаются перспективным альтернативным источником энергии. Основной задачей технологии создания полупроводниковых термоэлектриков является разработка материалов, для которых КПД преобразования достаточно высок для конкуренции с другими источниками энергии [1].

В работе проведено исследование элементного и химического состава образца Si: Co до и после высокотемпературного термического отжи-

© Широких Н. С., Николичев Д. Е., Дорохин М. В., Федотов И. А., 2022

га в атмосфере аргона. Исследуемый образец представлял собой пластину кремния (100) марки КЭФ-3000, которая была подвергнута имплантации кобальта с дозой $5 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$ и энергией ускорителя 80 кэВ, а затем — термическому отжигу при температуре 1000 °C и длительности 15 сек. Исследование проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии совместно с профилированием ионами аргона в системе Omicron Multiprobe RM, способной обеспечивать вакуум до 10^{-10} Торр в процессе записи спектра. Энергия ионов Ar^+, используемая для послойного анализа, составляла 1 кэВ при угле относительно плоскости образца 45 градусов. Определение положения и идентификация спектральных линий производилась с помощью атласов и литературных данных для выбранных фотоэлектронных-линий. Анализировались фотоэлектронные линии Si 2*s*, Co $2p^{3/2}$, O 1*s* и C1*s*. Количественный анализ проводился с помощью метода факторов относительной чувствительности с метрологическим уточнением их значений [2].

Профиль распределения концентрации элементов и концентрации химических состояний показывает, что в результате ионной имплантации кобальт внедряется в кремний на глубину около 100—150 нм в максимуме распределения. Его максимальная концентрация составила около 30 ат.%. Постростовой отжиг при температуре 1000 °C длительностью 15 секунд, «размывает» профиль имплантированного кобальта и уменьшает в ~2 раза концентрацию химической связи Co-Si относительно концентрации связи Co-Co. Термический отжиг приводит к уменьшению количества структурных дефектов и сокращению количества эффективно встроившихся атомов Co. Общее количество кобальта остается постоянным без и при отжиге, что говорит только о перераспределении примеси в имплантированном слое.

ЛИТЕРАТУРА

1. Термоэлектрические источники альтернативного электропитания. / П. Шостаковский // Новые технологии. Компоненты и технологии № 12. — 2010. — С. 131—138

2. A. V. Boryakov et al., J. of electron spectroscopy and related phenomena, V.229, — 2018. — P. 132—140.

РАЗВИТИЕ ФОТОЭМИССИОННЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ КВАЗИДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ 4F ЭЛЕМЕНТОВ

А. В. Тарасов[1], **Д. В. Вялых**[2, 3], **К. Креллнер**[4], **Д. Ю. Усачев**[1]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Международный физический центр в Доностии, Сан-Себастьян, Испания*
[3]*Ikerbasque, Баскский фонд науки, Бильбао, Испания*
[4]*Франкфуртский университет Гете, Франкфурт-на-Майне, Германия*
e-mail: artem.tarasov@spbu.ru, тел.: +7 (960) 278-99-96

Благодарности: *мы благодарим за поддержку Министерства науки и высшего образования Российской Федерации [грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)].*

Несмотря на существование многих хорошо зарекомендовавших себя экспериментальных методов изучения магнитных свойств твердых тел, среди них особенно выделяется фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС), которая способна обеспечивать беспрецедентную поверхностную чувствительность (порядка нескольких первых атомных слоев материала), необходимую для послойного анализа магнетизма поверхности и границ раздела в многослойных наноструктурах.

Данная работа посвящена развитию методик анализа фотоэмиссии квазидвумерных структур на примере двух систем: EuIr2Si2 [1] и TbRh2Si2 [2]. Данные материалы относятся к семейству типа RET2Si2, в котором соседние RE плоскости разделены силицидными блоками Si–T–Si. Более слабое взаимодействие между слоем RE и Si–T–Si блоком в сравнении со связями внутри Si–T–Si блока приводит к двум возможным поверхностям: Si-терминации и RE-терминации, оканчивающимися соответственно Re- и Si-атомами. Возможность формирования терминаций с различными структурными блоками на поверхности кристалла может приводить к возникновению новых поверхностных электронных состояний (которые будут локализованы внутри соответствующих поверхностных структурных блоков), а также изменению валентности слоев РЗЭ и отличному от

© Тарасов А. В., Вялых Д. В., Креллнер К., Усачев Д. Ю., 2022

объема поведению магнитных 4f-моментов в поверхностных слоях кристалла. Основными задачами, поставленными нами при изучении этих систем, был ответ на вопрос о том, насколько их поверхностные магнитные свойства могут отличаться от объемных, а также детальный анализ причин такого различия.

В результате проведенной работы, были разработаны новые методики использования ФЭ, позволяющие анализировать свойства слоистых 4f-материалов с акцентом на магнетизм и валентность редкоземельных ионов при отсутствии или наличии воздействия кристаллического поля на основное состояние 4f оболочки. Так проведенный анализ формы 4f-мультиплета Tb для TbRh2Si2 позволил сделать вывод о том, что несмотря на наличие АФМ порядка объема кристалла, направленного вдоль оси c, 4f магнитные моменты первого слоя Tb-терминации должны лежать в плоскости поверхности вследствие значительного изменение кристаллического поля вблизи нее. Кроме того, анализ данных фотоэлектронной дифракции для системы EuIr2Si2 [3] с флуктуирующей валентностью Eu позволил нам определить значения валентности Eu в каждом из поверхностных слоев по-отдельности и зафиксировать ферромагнитное упорядочение ионов Eu2+ в четвертом слое Si-терминации при учете отсутствия магнетизма в самом объеме кристалла.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Schulz, I. A. Nechaev, M. Güttler, et al., npj Quantum Mater., **2019**, 4, 26.

2. D. Yu. Usachov, I. A. Nechaev, G. Poelchen, et al., Phys. Rev. Lett., **2020**, 124, 237202.

3. D. Yu. Usachov, A. V. Tarasov, S. Schulz, et al., Phys. Rev. B., 2020, 102, 205102.

ИССЛЕДОВАНИЯ МОРФОЛОГИИ, АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ 3D-РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МАССИВОВ НИТЕВИДНОГО КРЕМНИЯ

А. К. Пелагина[1], **Е. В. Паринова**[1], **О. А. Чувенкова**[1], **С. И. Курганский**[1], **Д. А. Коюда**[1], **V. Sivakov**[2], **Yermukhamed**[3], **T. Ming**[2], **С. Ю. Турищев**[1]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж*

[2]*Лейбниц Институт Фотонных Технологий, Йена, Германия*

[3]*Аль-Фараби Казахстанский Национальный Университет, Алматы, Казахстан*

pisliaruk@phys.vsu.ru

Благодарности: *исследования выполнены в рамках проекта РФФИ № 21-53-12042 ННИО_а. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части проработки синхротронных исследований, в рамках государственного задания вузам в сфере научной деятельности на 2020—2022 годы, проект № FZGU-2020-0036 в части методики обработки поверхности.*

Массивы нанонитевидного кремния (НК), сформированные методом металл-ассистированного жидкофазного химического травления (MAWCE), являются перспективным наноструктурированным объектом. Эти объекты обладают такими физико-химическими свойствами. Перспективными являются и структуры, в которых массивы НК используются для функционализации их чрезвычайно развитой поверхности, которая достигается путем осаждения или покрытия перспективными материалами матрицы нитевидного кремния.

Актуальными вопросами являются исследования атомного и электронного строения экспериментальными рентгеноспектральными методами, дающими прямую информацию о специфике локального атомного окружения и физико-химическом состоянии. Такими методами являются — метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES — X-ray absorption near edge structure) и метод рент-

© Пелагина А. К., Паринова Е. В., Чувенкова О. А., Курганский С. И., Коюда Д. А., Sivakov V., Yermukhamed, Ming T., Турищев С. Ю., 2022

геновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS — X-ray Photoelectron Spectroscopy) Использование высокоинтенсивного синхротронного излучения установок класса «мегасайенс» является необходимым условием регистрации спектров высокого разрешения. С другой стороны, исследования наноструктур, таких как НК, требуют понимания специфики атомного и электронного строения в глубине массива нанообъектов, там, где они имеют развитую поверхность, недоступную в целом для диагностических возможностей метода XANES и XPS и иных методик, обладающих поверхностной чувствительностью (фото- и Оже- электронная спектроскопия, др.).

В работе нами предложен метод, позволяющий получить информацию о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении глубоких слоев. Морфология образцов НК, была изучена методом сканирующей электронной микроскопии. Далее для достижения внутренней («внутри-объемной») части формируемого массива НК поверхностно-чувствительными методами XANES и XPS половина площади поверхности каждого образца механически удалялась путем однократного проведения специально подготовленным лезвием в перчаточном шкафу (glove-box) в инертной атмосфере аргона. Далее механически модифицированные образцы через шлюзовую камеру устанавливались в объем многокамерной системы спектрометра Российско-германского канала синхротронного накопительного кольца BESSY II (Helmotz-Zentrum-Berlin) без контакта с атмосферой.

Были получены Si L2,3 и OK спектры XANES, XPS спектры остовных уровней Si 2p высокого разрешения с нетронутой и механически модифицированной частей подготовленных проб. Полученные рентгеноспектральные данные показали различные характеристики локального окружения атомов кремния и кислорода в поверхностной и «объемной» части массива НК, наблюдаемые в силу различия в режимах и особенностях процессов, протекающих при формировании массивов. Продемонстрирована применимость предлагаемого способа изучения атомного и электронного строения объемной части наноструктур поверхностно-чувствительными методами.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ЭПИТАКСИАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ 5 МОНОСЛОЕВ ОЛОВА НА КРЕМНИИ МЕТОДАМИ XANES И XPS С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Н. И. Бойков[1], **С. Ю. Турищев**[1], **О. А. Чувенкова**[1], **Н. Д. Захаров**[2], **А. В. Анисимов**[1], **Е. В. Паринова**[1], **Д. А. Коюда**[1], **М. Д. Манякин**[1], **С. И. Курганский**[1], **А. Макарова**[3], **Д. Смирнов**[3], **Р. Овсянников**[3], **А. А. Тонких**[2]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*Max Planck Institute of Microstructure Physics, Weinberg 2, 06120 Halle, Germany*

[3]*Helmholtz Zentrum Berlin, Berlin, Germany*

e-mail: boykov-hfmm@bk.ru, тел. +7 (920) 436-22-60

Благодарности: *исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 21-53-12042 ННИО_а.*

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части методики проведения синхротронных исследований.

Ограничивающим фактором создания и производства электронных устройств на основе кремния может считаться генерация тепла. Значительное снижение термической проводимости может быть достигнуто посредством формирования периодических многослойных структур Sn/Si. Таким образом, нарушения в движении фононов более заметны из-за более высокого соотношения масс Sn/Si. В то же время, исследования атомного и электронного строения, физико-химического состояния таких структур, являются крайне важными с точки зрения вопросов технологии их формирования и последующего применения. Целью данной работы было исследование атомного и электронного строения эпитаксиальных наноструктур на основе кремний-олово.

© Бойков Н. И., Турищев С. Ю., Чувенкова О. А., Захаров Н. Д., Анисимов А. В., Паринова Е. В., Коюда Д. А., Манякин М. Д., Курганский С. И., Макарова А., Смирнов Д., Овсянников Р., Тонких А. А., 2022

Исследованные образцы были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке Si(100) с буферным слоем Si толщиной 50 нм. На предварительно очищенных и высушенных кремниевых подложках в сверхвысоковакуумной камере осаждались ~ 5 монослоев олова. Для возможной модификации состава и структуры полученные образцы отжигались in-situ в сверхвысоком вакууме 10^{-9} Торр при 800 °C в течение 10 мин. Исследования атомного и электронного строения проводились методами спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES — X-ray absorption near edge structure) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS — X-ray photoelectron spectroscopy). Использовалось синхротронное излучение накопительного кольца BESSY II Гельмгольц Центра Берлин (Берлин, Германия).

Путем сопоставления спектров эталонных фаз металлического олова, SnO_2 и SnO с экспериментальными проведена оценка особенностей электронного спектра и состава эпитаксиальных нанослоев олова до и после отжига. Далее, при помощи спектров XANES, рассчитанных из первых принципов с использованием программного пакета Wien2K для таких материалов, как Sn, SnO, а также орторомбический и тетрагональный SnO_2 была произведена полуколичественная оценка состава эпитаксиального нанослоя до и после отжига методом линейной комбинации LCF (Linear Combination Fitting). Полученные результаты показали присутствие всех трех оксидов в исходной эпитаксиальной пленке. После отжига эпитаксиальная пленка представляла собой металлическое олово. Полученные результаты полностью коррелируют с данными метода XPS.

Показано, что рост нанослоя олова на поверхности буферного слоя кремния не приводит к заметному межатомному взаимодействию на их гетерогранице, в результате чего не происходит заметных искажений электронно-энергетического спектра. Сформированный нанослой имеет сложный композитный состав из различных оксидов олова. Однако высокотемпературный сверхвысоковакуумный отжиг приводит к перестройке фазового состава поверхностных слоев такой структуры, что сопровождается миграцией атомов кислорода от атомов олова вглубь структуры к кремнию. Это приводит к полному окислению поверхности буферного слоя монокристаллического кремния и восстановлению 5 монослоев исходного оксида олова до металлического состояния.

СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАССИВОВ МЕДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ВЫРАЩЕННЫХ В ПОРАХ SIO_2 НА SI

Ю. С. Какулия[1], **Е. Ю. Канюков**[2], **Е. В. Паринова**[1], **В. Сиваков**[3], **С. В. Канныкин**[1], **Т. Ляйтнер**[4], **Р. Овсянников**[4], **С. Ю. Турищев**[1]
[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*
[2]*Московский институт стали и сплавов, Москва, Россия*
[3]*Институт фотонных технологий им. Лейбница, Йена, Германия*
[4]*Гельмгольц Центр Берлин, Берлин, Германия*
e-mail: kakuliia@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 240-66-53

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Наночастицы меди, выращенные в пористой матрице диоксида кремния, являются перспективными структурами для использования в сенсорах, основанных на эффекте поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света. Данное явление позволяет проводить диагностику химических и биологических молекул в таких областях как биомедицина и экология. При этом, для эффективного использования таких структур в сенсорах, необходимо понимание физико-химических и структурных свойств, в том числе с точки зрения развитой поверхности и границ раздела. Поэтому необходимо детальное изучение морфологии, состава, структуры наряду с атомным и электронным строением материалов, образующихся при формировании наночастиц меди в матрицах пористого SiO_2 на Si.

Образцы представляют собой медные структуры, сформированные в порах диоксида кремния на кремниевой подложке. Пористый слой SiO_2 формировали облучением структур быстрыми тяжелыми ионами с последующим жидкофазным химическим травлением. Массивы медных наноструктур производили химическим жидкофазным ростом из неорганических солей меди с использованием набора режимов, позволяющих варьировать степень заполнения пор SiO_2. Таким образом было получено две серии образцов с различной степенью заполнения пор наночастицами, отличающихся средним размерами. В обоих случаях степень заполнения

© Какулия Ю. С., Канюков Е. Ю., Паринова Е. В., Сиваков В., Канныкин С. В., Ляйтнер Т., Овсянников Р., Турищев С. Ю., 2022

пор была: неполное покрытие дна поры, частичное заполнение поры, полное заполнение поры, переполнение объема поры с образованием глобул. Также были изучены образцы с планарным покрытием наночастицами меди, и с глобулами образованными на планарном покрытии.

Рентгеновскую дифракцию проводили на приборе ARL X'TRA в геометрии Брэгга-Брентанно. Съемку производили в режиме Θ-Θ, образцы помещали на кремниевые подложки с «нулевым фоном». Атомное и электронное строение было исследовано синхротронным методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES — X-ray absorption near edge structure) на канале вывода синхротронного излучения UE52_PGM CoESCA накопительного кольца BESSY II Гельмгольц Центра Берлин. Морфология поверхности изучалась методом сканирующей электронной микроскопии (SEM — Scanning Electron Microscopy) с помощью электронного микроскопа Carl Zeiss ULTRA 55 в Институте фотонных технологий в городе Йена, Германия. Также, в программном пакете ImageJ, проводилась статистическая оценка размеров частиц формирующих структуру.

Согласно данным растровой электронной микроскопии средний (преимущественный) размер наночастиц в первой группе от ~30 до ~65 нм соответственно заполнению пор, а во второй от ~50 до ~100 нм, соответственно заполнению пор.

Анализ Cu $L_{2,3}$-спектров XANES для описанных выше образцов позволил отметить, что для всех сформированных структур наблюдается изменение степени окисления, вплоть до формирования оксида, близкого к естественному, для случая второй серии образцов и полного заполнения поры или переполнения объема поры. Полученные результаты можно объяснить различием в размерах кристаллов двух серий образцов, поверхность которых взаимодействует с кислородом.

По результатам исследований структуры были получены области когерентного рассеяния (размеров кристаллитов), которые показывают хорошее соответствие с результатом статистической обработки электронно-микроскопических данных с точки зрения объема массивов нанокристаллов.

Таким образом, полученные результаты позволяют говорить о том, что используемый подход в формировании структур с наночастицами меди позволяет эффективно получать компактные и размерно-селективные массивы металлических медных наночастиц с внутренним атомным упорядочением — нанокристаллов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ГИБРИДНОГО НАНОКОМПОЗИТА CU/МУНТ

К. А. Бакина, Д. В. Сивков, О. В. Петрова,
С. В. Некипелов, Р. Н. Скандаков, В. Н. Сивков
«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия
e-mail: tylxen@gmail.com, тел.: 8 (8212) 391451

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ (МК-3796.2021.1.2), РФФИ и Республики Коми в рамках научных проектов № 19-32-60018 и 20-42-110002 р-а и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части исследований NEXAFS-спектроскопии.*

Покрытие поверхности многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) металлами придает им уникальные физические и химические свойства и приводит к созданию новых гетерогенных материалов, которые будут иметь хорошую адгезию металлических наночастиц к графеновой матрице. Такие материалы могут быть использованы в качестве наноструктурированных гетерогенных катализаторов различных химических процессов, сенсоров, химических источников энергии, элементов различных электронных устройств и других активных элементов во многих научных и технических приложениях. Поэтому разработка методов синтеза и исследования наноструктурированных композиционных материалов на основе МУНТ является актуальной задачей. Однако химическая инертность поверхности МУНТ и вследствие этого низкое сродство к другим материалам не всегда приводит к планируемым результатам. В связи с этим представляет большой интерес изучение взаимодействия покрывающего слоя и внешней поверхности МУНТ в начальной стадии формирования покрытия.

Для нанокомпозита на основе МУНТ, декорированного наночастицами CuO/Cu_2O/Cu, нанесенными путем пиролиза формиата меди, методами NEXAFS- и XPS-спектроскопии показано существование хорошей адгезии между покрытием из наночастиц меди и поверхностью МУНТ за счет образования кислородных мостиков между углеродом внешнего графенового слоя МУНТ и кислородом оксидов CuO и Cu_2O.

© Бакина К. А., Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н., 2022

Исследования методом NEXAFS-спектроскопии осуществлялись с использованием синхротронного излучения Русско-немецкого канала выхода и монохроматизации излучения синхротронного центра BESSY-II (г. Берлин, Германия) и станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий (г. Москва, Россия), а XPS-спектры были получены в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» научного парка СПбГУ с помощью спектрометра Thermo Scientific ESCALAB250Xi.

АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ФУЛЛЕРИТА С60, МОДИФИЦИРОВАННОГО БАРОТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКОЙ В АРГОНЕ

Р. Н. Скандаков, Д. В. Сивков, О. В. Петрова, С. В. Некипелов, К. А. Бакина, В. Н. Сивков
«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия
e-mail: scanick@yandex.ru, тел.: +7 (908) 329-60-82

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ (МК-3796.2021.1.2), РФФИ и Республики Коми в рамках научных проектов № 19-32-60018 и 20-42-110002 р-а и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части исследований NEXAFS-спектроскопии.*

Полученные в настоящей работе результаты в сопоставлении с данными других экспериментальных исследований и моделирования слияния молекул C_{60} в нанокапсулу C_{120}, позволяют сделать следующие выводы: 1) структура получаемого материала представляет собой последовательности хаотически ориентированных нанокапсул с графеновой поверхностью, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса; 2) средние размеры нанокапсул составляют ~2.5 нм а их диаметры ~0.68—0.98 нм; 3) формирование нанокапсул осуществляется путем первоначальной [2 + 2] реакции циклоприсоединеия с последующими GSW-преобразованями, приводящими к $2C_{60} \rightarrow C_{120}$ процессу слияния.

© Скандаков Р. Н., Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Бакина К. А., Сивков В. Н., 2022

Для приготовления образцов использовались фуллериты C_{60} чистотой 99.98 % в виде кристаллического порошка с размерами кристаллитов 0.05—0.5 мм. Образцы для исследования методом TEY приготовлялись методом прессования порошка фуллерена в поверхность медной пластинки. Образцы фуллерита C_{60} для исследования методом прямого фотопоглощения приготовлялись методом термического испарения (сублимации) фуллерита в вакууме с танталовой лодочки на свободную титановую пленку толщиной порядка 220 нм, закрепленную оптическим контактом на круглое отверстие диаметром 1 мм в медном держателе. Для приготовления модифированных баротермической обработкой образцов использовался фуллерит C_{60} чистотой 99.98 % (ЗАО «Фуллерен-центр», г. Нижний Новгород) растертый в ступке в течении 20 минут в гексане и спрессованный в таблетки с диаметром 20 мм и толщиной 3 мм и подвергнутый высокотемпературной газостатической обработке (Hot Isostatic Pressure — HIP), в атмосфере аргона, при давлении 1000 атм и в различных температурных режимах вблизи и за границей термической устойчивости фуллерена. Используемая газостатическая установка содержала многоуровневый рабочий столик, на который помещались обрабатываемые образцы и там же находились термопары для контроля температуры. По высоте установки имелся градиент температур около 200 K, что позволяло одновременно нагружать несколько образцов и проводить HIP–обработку при разных температурах. В ходе HIP обработки были получены образцы, синтезированные при постоянном давлении в 1000 атм в среде аргона и температурах 950, 1020, 1160 и 1260 K при выдержке 3 часа.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГРУПП НА ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ XPS И NEXAFS

Д. В. Сивков[1, 2], **О. В. Петрова**[2], **С. В. Некипелов**[2], **А. С. Виноградов**[1], **Р. Н. Скандаков**[2], **К. А. Бакина**[2], **С. И. Исаенко**[2], **А. М. Объедков**[3], **Б. С. Каверин**[3], **И. В. Вилков**[3], **В. Н. Сивков**[2]
[1]*«ФГБОУ ВО СПбГУ», Санкт-Петербург, Россия*
[2]*«КомиНЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия*
[3]*«ИМХ РАН», Нижний Новгород, Россия*
e-mail: danjorno@yandex.ru, тел.: 8 (8212) 391461

Моноуглеродные соединения, такие как многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ), карбонизированный спонгин морской губки (CSS) и фуллерит C_{60} широко используются для получения новых наноструктурированных материалов. Химическая устойчивость МУНТ к агрессивным средам, большая площадь внешней поверхности, исключительная механическая прочность и теплопроводность делают их перспективным материалом для широкого спектра различных применений, в частности, их используют в качестве подложки для получения катализаторов путем осаждения карбидов и оксидов металлов на их внешнюю поверхность. Альтернативой нанотрубкам являются природные биоматериалы, которые имеют разветвленную архитектуру с большой площадью внешней поверхности. Например, карбонизация каркаса морских губок в аргоне при температурах до 1200 °C приводит к образованию трехмерной нанопористой структуры из турбостратового графита. Получаемый таким образом CSS является перспективным для изготовления композиционных материалов, используемых в качестве катализаторов химических процессов. Существенной проблемой при производстве таких материалов является определение механизма адгезии слоя покрытия к химически инертной углеродной поверхности. Исследования показали, что наличие оксидов на внешней поверхности МУНТ и карбонизированных материалов может обеспечить хорошую адгезию металлических покрытий за счет образования мостиковых связей углерод-кислород-металл в процессе осаждения. Основной целью представленной работы является определение количественной концентрации атомов кислорода и молекулярных соединений на поверхности карбонизированных морских губок в сравнении с МУНТ, высокоориентированным пиролитическим графитом (HOPG) и C_{60}.

Исследования показали, что основным источником содержания кислорода в количестве около 2 ат.% на поверхности порошков HOPG, МУНТ и C_{60} является конденсированная из атмосферы вода в виде адсорбированных молекул H_2O и гидроксильной группы при незначительном содержании оксидов углерода на поверхности. Принципиально иная ситуация наблюдается на поверхности CSS, где концентрации атомов кислорода как в составе оксидов углерода, так и в виде адсорбированных молекул воды и гидроксильных групп близки и равны 4—5 % и 5—6 %, соответственно.

© Сивков Д. В., Петрова О. В., Некипелов С. В., Виноградов А. С., Скандаков Р. Н., Бакина К. А., Исаенко С. И., Объедков А. М., Каверин Б. С., Вилков И. В., Сивков В. Н., 2022

ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА ИОНОВ ЦИНКА В ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ЦЕНТРАХ СВЯЗЫВАНИЯ В ГЕМОГЛОБИНЕ

Е. В. Пронина, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: ev_pronina_105@mail.ru, тел.: +7 (905) 427-01-72

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-29-12052 mk).*

Под действием неблагоприятных экзогенных и эндогенных факторов — повышенного радиационного фона, экологических загрязнений, окислительного и термического стресса наблюдается прогрессирующее аномальное накопление ионов металлов на биоорганических макромолекулах. Известно, что нарушение пространственной структуры белка может приводить к образованию нефункциональных структур или белков со сниженной активностью при формации комплексов с переходными металлами [1], [2]. Как известно, в активном центре гемоглобина располагаются ионы железа, которые отвечают за транспорт кислорода в организме. Однако под воздействием неблагоприятных факторов в гемоглобине могут возникать дополнительные центры связывания, которые могут связывать такие нетипичные для гемоглобина ионы как цинк.

© Пронина Е. В., Кременная М. А., Яловега Г. Э., 2022

В работах [3, 4] на основе анализа экспериментальных спектров рентгеновского поглощения для К-краев цинка, измеренных от белковых пленок, сформированных на поверхности жидкости было выдвинуто предположение о наиболее вероятном месте для образования координационного соединения молекулы гемоглобина с атомом цинка. Измерения спектров XANES проводились в Курчатовском центре синхротронного излучения на линии поворотного магнита LANGMUIR в режиме выхода флуоресценции в условиях полного внешнего отражения.

В данной работе, из базы данных PDB (Protein Data Bank) были взяты структурные данные трех видов гемоглобина. Из полной молекулы гемоглобина выделены структурные модели возможных дополнительных центров связывания цинка. Проведена геометрическая оптимизация полученных структурных моделей методом теории функционала электронной плотности. Для всех структурных моделей, содержащих аминокислоты гистидина и цистеина, проведен теоретический анализ экспериментальных спектров поглощения за К-краем цинка.

В результате проведенных расчетов была определена локальная атомная структура дополнительных центров связывания цинка в гемоглобине: количество и тип лигандов, длины химической связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gomes, *Cláudio M.* (2019). Biophysical and Spectroscopic Methods for Monitoring Protein Misfolding and Amyloid Aggregation //[Methods in Molecular Biology, Protein Misfolding Diseases Volume 1873 (Methods and Protocols), 10.1007/978-1-4939-8820-4(Chapter 1), 3—18.

2. Reeg, Sandra; Grune, Tilman, Protein Oxidation in Aging: Does It Play a Role in Aging Progression? // Antioxidants & Redox Signaling, 2015, 23(3), 239—255.

3. Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Рогачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов //Кристаллография. 2019. Т. 64, № 6, с. 931—937

4. *Oleg V.* Konovalov, *Natalia N.* Novikova, *Mikhail V.* Kovalchuk, *Galina E.* Yalovega, *Alexey F.* Topunov, *Olga V.* Kosmachevskaya, *Eleonora A.* Yurieva, *Alexander V.* Rogachev, *Alexander L.* Trigub, *Maria A.* Kremennaya, *Valentin I.* Borshchevskiy, *Daniil D.* Vakhrameev, *Sergey N.* Yakunin // Materials. 2020, V.13(20). P. 4635

ОСОБЕННОСТИ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАНИЛИНА И КОМПОЗИТОВ ПАНИ/ME (CU, ZR)

О. В. Недоедкова, В. Ю. Лысенко, В. А. Шматко, Г. Э. Яловега
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru, тел.: +7 (961) 330-95-93

Благодарности: *публикация подготовлена в рамках реализации ГЗ ЮНЦ РАН на 2022 г., № гр. проекта 121100500084-2.*

Авторы выражают благодарность Мясоедовой Т. Н. за предоставление образцов для исследования.

Среди различных проводящих полимеров, синтезированных на сегодняшний день, полианилин (ПАНИ) получил наибольшее внимание из-за его уникальной структуры, высокой химической стабильности и высокой электрической проводимость при соответствующем модифицировании. ПАНИ имеет множество промышленных применений, таких как использование его для различных микро- и наносенсоров, предотвращение коррозии в лакокрасочной промышленности, удаление ртути из воды, также его можно найти в составе светодиодов, хирургических инструменты, батареи и солнечных элементов и пр. Варьирование проводящих свойств полианилина, в основе которых лежит его электронная структура, возможно путем модификации полимера различными соединениями, в частности солями металлов.

Целью данной работы являлось исследование атомной и электронной структуры различных форм полианилина и композита ПАНИ/Me (Cu, Zr) методами рентгеновской спектроскопии поглощения и УФ-видимой спектроскопии. Образцы для исследования получены бескислотным методом с последующим термостатированием [1]. Экспериментальные спектры XANES за К-краем углерода были получены в синхротронном центре Elettra (Италия), за К-краями меди и циркония в Курчатовском центре синхротронных исследований. Для теоретической интерпретации имеющихся экспериментальных данных рентгеновской спектроскопии поглощения были построены модельные структуры, проведена их геометрическая оптимизация на основе теории функционала электронной плотности.

© Недоедкова О. В., Лысенко В. Ю., Шматко В. А., Яловега Г. Э., 2022

Для всех оптимизированных структур рассчитаны теоретические спектры рентгеновского поглощения, методом конечных разностей в полном потенциале с помощью программного комплекса FDMNES.

В результате проведенных расчетов определена локальная атомная структура меди и циркония в нанокомпозите ПАНИ/Me (Cu, Zr). Установлено, что цирконий взаимодействует с полимерной цепью через атомы азота.

Электронная структура различных форм полианилина и композитов на его основе ПАНИ/Cu и ПАНИ/Zr исследована методом УФ-видимой спектроскопии поглощения. Наличие двух полос на УФ-спектрах, соответствующих аминной и хинониминовой формам, позволяет сделать вывод, что полианилин в исследуемых образцах находится в частично окисленном состоянии. Модификация полианилина дигидрохлоридом меди и оксидом-дихлоридом циркония привело к смещению полос поглощения, что свидетельствует об изменении формы полианилина в ПАНИ/Me.

На основе полученных методом УФ-видимой спектроскопии данных была определена ширина оптической запрещенной зоны (Eg) для чистого полианилина и композитов по графикам Тауца. Выявлено, что добавление модифицирующих добавок $CuCl_2*2H_2O$ и $ZrCl_2*8H_2O$ в ходе химической полимеризации полианилина позволяет уменьшить ширину запрещенной зоны и подобные материалы имеют перспективу применения в суперконденсаторах и оптических устройствах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Шматко В. А.*, *Мясоедова Т. Н.*, *Яловега Г. Э.* Электронная структура полианилина, модифицированного солями меди и циркония//Оптика и спектроскопия. 2020. Вып. 5. Стр.617.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ИОНОВ ЦИНКА В ВОДНОЙ СУБФАЗЕ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МОНОСЛОЕМ АРАХИНОВОЙ КИСЛОТЫ

В. Ю. Лысенко[1], **М. А. Кременная**[1], **О. В. Недоедкова**[1], **А. В. Рогачев**[2], **Г. Э. Яловега**[1]

[1]*Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, Россия*

[2]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

e-mail: viktoriya.250699@mail.ru, тел.: +7 (903) 47-02-93

Благодарности: *авторы выражают благодарность гранту президента МК-2767.2021.1.2 за финансовую поддержку исследования.*

Метод Ленгмюра — Блоджетт является простейшим методом, позволяющим получать упорядоченные органо-неорганические слои, используя принцип их самоорганизации на границе раздела фаз. Таким образом можно решить одну из проблем микро- и наноэлектроники — получение активного и проводящего слоев в одном процессе. С другой стороны, координация ионов металлов в водных растворах электролитов играет решающую роль в их реакционной способности, стабильности, растворимости и транспорте. Следовательно, изучение физико-химических процессов на границе раздела фаз, особенно на границе раздела жидкостей, является актуальной и сложной задачей, требующей новых диагностических подходов.

В данной работе были проведены исследования взаимодействия монослоя арахиновой кислоты, расположенной на поверхности жидкой субфазы (раствор $ZnCl_2$) и ионов цинка из жидкой субфазы в Ленгмюровской ванне. Изучена координация ионов цинка в водной субфазе. Изучение взаимодействия ионов цинка с липидным слоем представляет интерес еще и с точки зрения биологии, так как является упрощенной моделью взаимодействия металлов с клеточной мембраной, что в свою очередь имеет важное значение для многих процессов, протекающих в организме человека, например таких как сокращение мышц и передача нервных импульсов.

© Лысенко В. Ю., Кременная М. А., Недоедкова О. В., Рогачев А. В., Яловега Г. Э., 2022

Одним из лучших методов, исследующих механизмы взаимодействие липид-металл, позволяющих изучить локальную атомную и электронную структуру ионов цинка в жидкой субфазе и под поверхностью монослоя арахиновой кислоты, является метод рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES). Представляемые результаты были получены методом теоретического моделирования экспериментальных спектров XANES, зарегистрированных в режиме выхода флуоресценции в условиях полного внешнего отражения в режиме реального времени. Этот метод, применим практически для любых ионов, позволяет исследовать системы с малыми концентрациями исследуемого вещества в жидкости.

Спектры рентгеновского поглощения для К-краев цинка в жидкой субфазе (раствор $ZnCl_2$) и липидных слоях арахиновой кислоты на поверхности жидкой субфазы (раствор $ZnCl_2$) в ленгмюровской ванне были получены в Курчатовском центре синхротронного излучения на экспериментальной станции «Ленгмюр» Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований. Измерения проводились для трех различных концентраций $ZnCl_2$ в растворе: $6\cdot10^{-4}$, $6\cdot10^{-5}$, $3\cdot10^{-6}$ моль/литр.

Проведен анализ спектров XANES за К-краем Zn для 3-х концентраций на начальном этапе измерений — полученные спектры сравнивали с экспериментальными спектрами раствора $ZnCl_2$, и порошка $ZnCl_2$ (рис. 1 a). Показано, что при увеличении концентрации $ZnCl_2$ в растворе, наблюдается перераспределение интенсивностей и энергетическое положение особенностей спектра, что говорит об изменении локального окружения ионов цинка в растворе в зависимости от концентрации. Для определения закономерностей изменения локального окружения ионов цинка в зависимости от концентрации раствора, были построены теоретические модели окружения Zn в водном растворе (табл. 1) и для них рассчитаны теоретические спектры поглощения за К-краем цинка в программном комплексе FDMNES (рис. 1 b).

Таблица 1

Расстояния от иона цинка до кислорода из молекулы воды в моделях

	Аксиальное расстояние, Å	Расстояние в плоскости, Å
Model 1	2.95	2.05
Model 2	2.80	2.05
Model 3	2.65	2.05

Установлено, что ион Zn 6-ти координирован молекулами воды, а изменения в спектрах связаны с изменениями аксиальных расстояний между атомом цинка и кислородом из молекулы воды.

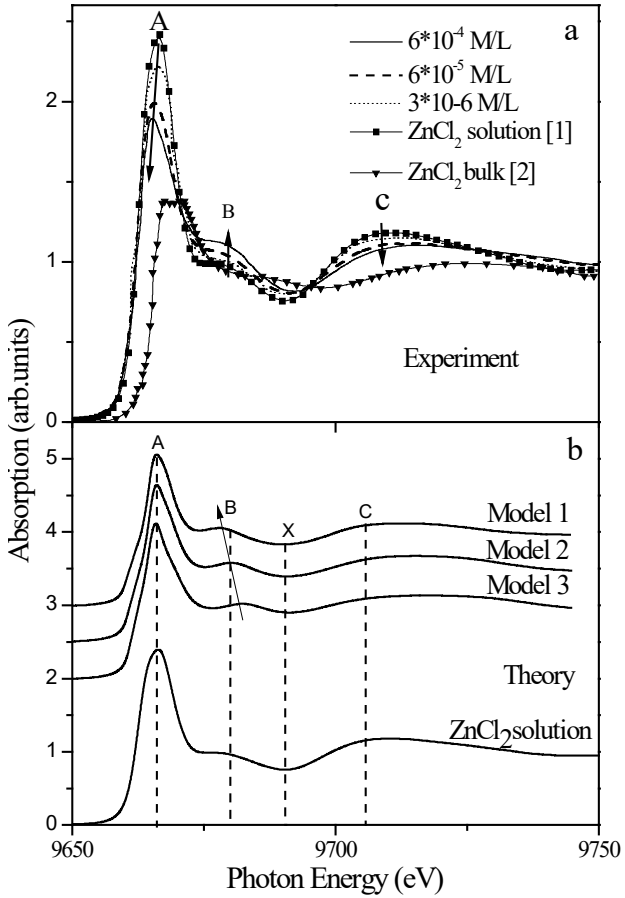


Рис. 1. Экспериментальные спектры XANES за К-краем цинка на начальном этапе измерений, в зависимости от концентрации $ZnCl_2$ в жидкой субфазе в сопоставлении с экспериментальным спектром раствора $ZnCl_2$ [1] и порошка $ZnCl_2$ [2] (a); сопоставление спектра за К-краем цинка в растворе $ZnCl_2$ в сопоставлении с теоретическими спектрами для различных моделей локального окружения ионов цинка в растворе

Далее был проведен анализ экспериментальных спектров зарегистрированных в течение 18 часов. Анализ проводился по методу «отпечатка пальца» — сопоставление экспериментальных спектров исследуемых соединений с экспериментальными спектрами известных соединений. Исходя из результатов проведенного анализа, выявлено, что изменения в экспериментальных спектрах являются результатом изменения локального окружения ионов цинка в процессе эксперимента по сравнению с его окружением в водном растворе $ZnCl_2$. На начальном этапе измерений ионы цинка окружены 6 молекулами воды, что соответствует окружению водного раствора $ZnCl_2$. Дальнейший процесс взаимодействия монослоя арахиновой кислоты и раствора $ZnCl_2$ не приводит к образованию наночастиц оксида цинка под слоем арахиновой кислоты, как это наблюдалось для случая солей никеля [3]. Предполагается, что наблюдаемые изменения связаны с взаимодействием полярных групп молекул арахиновой кислоты с ионами цинка из водного раствора.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Рогачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов, Кристаллография, **2019**, 64(6), 945

2. *Cooper D. C.*, A. L. Neal, R. K. Kukkadapu, D. Brewe, A. J. Coby, and F. W. Picardal, Geochimica et Cosmochimica Acta, **2005**, 69(7), 1739

3. Chumakov A, Al-Alwani1 A J, Ermakov A, Shinkarenko1 O, Begletsova N, Glukhovskoy E and Santer S2018 The Formation of arachidic acid Langmuir monolayers on the NiCl2 solution *J. of Phys.* 1124 (2018) 081009

XPS И СПЕКТРЫ МЕССБАУЭРА ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ АТОМАМИ СПЛАВА И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ В НАНОКОМПОЗИТАХ $(CO_{45}FE_{45}ZR_{10})_X(MGF_2)_{100-X}$

С. А. Ивков, А. Т. Козаков, А. В. Никольский, Ю. Г. Сегал, Э. П. Домашевская

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: ivkov@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Acknowledgements: *the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the state task for universities in the field of scientific activity for 2020—2022, project No. FZGU-2020-0036. The study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russia under agreement № 075-15-2021-1351 in part of the resistive percolation threshold and impedance investigations.*

В системе пленочных композитов типа металл-диэлектрик $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(MgF_2)_{100-x}$, полученных ионно-лучевым распылением составной мишени на ситалловые и стеклянные подложки, методом XRD установлено образование металлических нанокристаллов гексагональной сингонии на основе структуры α-Co при значении x = 30 ат.% с последующим фазовым переходом при x = 42 ат.% в кубическую ОЦК структуру на основе α-Fe. Одновременно с образованием металлических нанокристаллов в композите со средними размерами 10—20 нм диэлектрическая матрица MgF2 претерпевает антибатный переход из нанокристаллического в аморфное состояние. Данные ИК-спектроскопии подтверждают наличие межатомных связей Mg-F по всей толщине (несколько микрон) пленочных образцов нанокомпозитов [1, 2]. Ренгеноэлектронные исследования остовных уровней трех металлов в сплаве CoFeZr показали, что наименее окисленным является Co, а наиболее окисленным Zr. При этом сложная форма спин-дублетов Co $2p_{1/2,3/2}$ и Fe $2p_{1/2,3/2}$ соседних, к тому же окисленных 3d-металлов, не дали однозначного ответа на вопрос о наличии или отсутствии связей Fe-F и Co-F на межфазных границах сплав-диэлектрик. В то время как метод спектроскопии Мессбауэра позволил обнаружить химические связи между атомами железа и фтора Fe-F на межфаз-

© Ивков С. А., Козаков А. Т., Никольский А. В., Сегал Ю. Г., Домашевская Э. П., 2022

ных границах нанокристаллов сплава CoFeZr и аморфного диэлектрика MgF_2 с образованием парамагнитной фазы FeF_2. В спектре Мессбауэра образца $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_{51}(MgF_2)_{49}$ с максимальным содержанием магнитного сплава в композите (x = 51 ат.%) зарегистрирован интенсивный магнитный секстет (сверхтонкое магнитное расщепление) с параметрами (Is = –0.08 мм/с, Q = 0 мм/с G = 0.70мм/с, H = 339 кЭ), близкими к α-Fe, который мы относим к железу в составе нанокристаллов сплава CoFeZr с ОЦК структурой α-Fe. Наряду с магнитным секстетом, в спектре нанокомпозита был выделен парамагнитный квадрупольный дублет, принадлежащий фазе FeF_2. Соотношение площадей α-Fe-подобного магнитного секстета и парамагнитного дублета FeF_2 составляет 82:18 при суммарной площади 100 %.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. P. Domashevskaya, S. A. Ivkov, A. V. Sitnikov, et al., Journal of Alloys and Compounds 2021, 870,159398.

2. Э. П. Домашевская, С. А. Ивков, П. В. Середин, А. В. Ситников, Высокоточная диагностика функциональных материалов, лабораторные и синхротронные исследования (13—15 декабря 2021, Воронеж), 2021

РЕКОМБИНАЦИОННАЯ И ЭКСИТОННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PBS

М. С. Смирнов, К. С. Чирков, А. И. Звягин, Т. А. Чевычелова, Т. С. Кондратенко, В. Ю. Хохлов, В. Н. Дерепко, С. В. Асланов, И. Г. Гревцева
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: kirill200598@mail.ru, тел.: +7 (473) 220-87-80

Благодарности: *работа поддержана грантом РНФ № 22-12-00232.*

Несмотря на широкую сферу потенциального применения полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ) в различных оптоэлектронных устройствах и оптических системах [1,2], важной проблемой их практического применения до сих пор остается установление закономерностей фотопроцессов, определяющих размерно-зависимые спектрально-люминесцентные свойства. Особенно остра данная проблема для КТ из нестехиометрических полупроводниковых соединений. Одним из типичных представителей нестехиометрических полупроводников является PbS, ширина запрещенной зоны массивного кристалла которого составляет 0.41 эВ [3], а боровский радиус экситона около 20 нм. При этом варьирование размеров кристаллов PbS в диапазоне 1—20 нм, дает возможность контролировать полосы поглощения от ИК до видимого диапазона за счет квантово-размерного эффекта.

В работе представлены результаты исследований закономерностей ИК люминесценции коллоидных квантовых точек PbS средним размером 3 нм, покрытых молекулами тиогликолевой кислоты. Спектр люминесценции демонстрирует перераспределение интенсивности люминесценции между двумя пиками (1100 и 1280 нм) при понижении температуры до 80 К. При этом показано, что для коротковолнового пика люминесценции в спектре ее возбуждения присутствует полоса, обусловленная поглощением в основное состояние экситона, а стоксов сдвиг составляет ~ 0.1 эВ. Напротив, в спектре возбуждения люминесценции длинноволновой полосы отсутствует экситонный пик, а красная граница смещена в более коротковолновую сторону, что обеспечивает стоксов сдвиг более 0.3 эВ. Сделан вывод, что коротковолновая полоса люминесценции возникает в результате излучательной аннигиляции экситона, а длинноволновая является результатом рекомбинации носителей заряда на локализованных состояниях. При этом рекомбинационная люминесценция более эффективно возбуждается при непосредственном поглощении излучения центром свечения. Предложена трехуровневая схема, определяющая ИК люминесценцию коллоидных КТ PbS, покрытых молекулами тиогликолевой кислоты.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shehab M.*, *Ebrahim S.* and *Soliman M. J. of Lumin.,* **2017**, 184:110.
2. *Chen F.*, *Lin Q.*, *Tang A.*, *Material Chemistry Frontires,* **2020**, 4:1340.
3. *Scanlon W. W.* J. Physics and Chemistry of Solids, **1959**, 8:423.

© Смирнов М. С., Чирков К. С., Звягин А. И., Чевычелова Т. А., Кондратенко Т. С., Хохлов В. Ю., Дерепко В. Н., Асланов С. В., Гревцева И. Г., 2022

СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ $(COFEB)_X(NBLIO_3)_{1-X}$

А. В. Белых[1], **Н. С. Буйлов**[1], **Э. П. Домашевская**[1], **А. С. Ситников**[2]
[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*
[2]*Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*
e-mail: belyh@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Наногранулированные композиты металл–диэлектрик представляют собой металлические гранулы диаметром несколько нанометров, хаотически распределенные в объеме диэлектрической матрицы. Обладая туннельным электронным транспортом при комнатной температуре, ярко выраженными размерными эффектами и необычными магнитными свойствами, изменяющимися в зависимости от концентрации металлической фазы от суперпарамагнитного до магнитоупорядоченного состояния, эти среды оказались черезвычайно интересными объектами для фундаментальных физических исследований [1—4]. В тоже время нанокомпозитные материалы металл–диэлектрик представляют практический интерес для применения в энергонезависимой магниторезистивной памяти благодаря такому уникальному свойству как эффект туннельного магнитосопротивления (ТМС), величина которого достигает максимального значения в области порога перколяции.

Исследуемые в данной работе нанокомпозитные пленки $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ переменного состава были получены методом ионно-лучевого распыления на ситалловую подложку на кафедре физики твердого тела в Воронежском государственном техническом университете.

Целью данной работы было определение положения порога перколяции в аморфном нанокомпозите $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ с переменным составом, посредством исследования концентрационной зависимости удельного сопротивления. А также измерение величины эффекта ТМС в точке перколяции.

С использованием растрового электронного микроскопа JSM-6510LV JEOL (ЦКПНО ВГУ) были получены микрофотографии, представленные на рисунке 1 и измерены толщины нанокомпозитных пленок переменного состава $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ представленные в таблице 1.

© Белых А. В., Буйлов Н. С., Домашевская Э. П., Ситников А. С., 2022

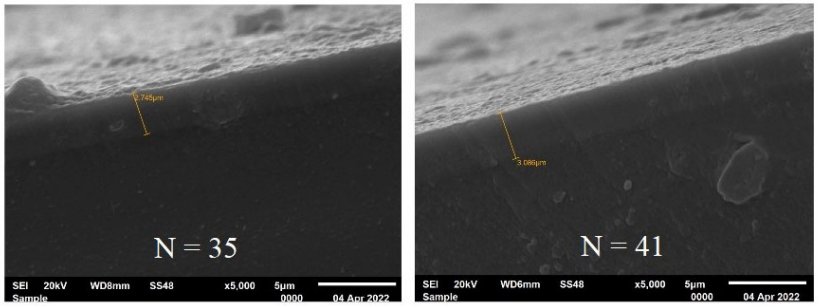


Рис. 1. Микрофотографии нанокомпозитных пленок переменного состава $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$

Таблица 1

Толщины пленок нанокомпозита $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ переменного состава

№ образца $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$	Толщина пленки (мкм)
3	0.9
17	1.8
25	2.3
31	2.7
35	2.7
41	3
51	2.8
61	3
77	2

С использованием четырехзондового метода была измерена величина удельного сопротивления исследуемых образцов нанокомпозитов. По результатам измерений была построена концентрационная зависимость удельного сопротивления, представленная на рисунке 2 слева, по которой было определено положение порога перколяции в области образцов № 30—35.

Исследование туннельного магнитосопротивления пленок нанокомпозита $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ переменного состава проводились на установке ECOPIA HMS-3000 при переменном внешнем магнитном поле. Абсолютная величина эффекта ТМС системы $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ определялась в соответствии с выражением:

$$\frac{\Delta R}{R(0)} = \frac{R(H) - R(0)}{R(0)} \cdot 100\%, \qquad (1)$$

где R(H) — сопротивление композита при наличии внешнего магнитного полянапряженностью H; R(0) — сопротивление композита при отсутствии магнитного поля.

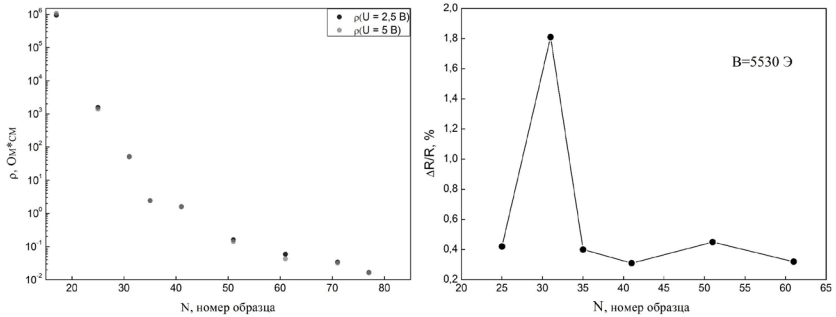


Рис. 2. Концентрационная зависимость удельного сопротивления (слева) и концентрационная зависимость эффекта ТМС (справа) нанокомпозитных пленок переменного состава $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$

По результатам проведенных измерений было определено, что величина туннельного магнитного сопротивления в нанокомпозитах $(CoFeB)_x(NbLiO_3)_{1-x}$ достигает максимального значения ΔR/R(0) = 1,8 % в образце N-31 при B = 5530 Эрстед.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Neugebauer C. A.* et al., Thin Solid Films, **1970**, 6, 443—447.
2. *Gittleman J. L.* et al., Physical Review B, **1972**, 5, 3609—3621.
3. *Abeles B.* et al. // Advances in Physics, **1975**, 24, 407—461.
4. *Helman J. S.* et al. Phys. Rev. Lett, **1976**, 37, 1429—1433.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И СИНТЕЗА ИСКУССТВЕННЫХ Y-ПОДОБНЫХ ДНК КОНСТРУКЦИЙ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ МИШЕНИ ДЛЯ БАКТЕРИАЛЬНОГО БЕЛКА DPS.

М. С. Скоробогатов, Е. В. Преображенская, С. С. Антипов
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
email: skorobogatov.matvei@mail.ru тел: +7 (930) 416-10-46

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Одной из актуальных современных фундаментальных задач является обоснование принципов молекулярного конструирования на основе органических веществ способных к самосборке. Главным вопросом оставалось одно — какиебиомакромолекулы использовать для этого. Первично для молекулярного конструктора были использованыбелки, но практически сразу эта идея оказалась провальной, так как у белков сложный механизм образования третичной структуры, множество различных видов слабых взаимодействий, стабилизирующихнадмолекулярные комплексы, при этом они легко денатурируют, асам процесс выделения и очистки белка очень длительный и кропотливый. Однако эту проблему удалось решить с использованиеммолекул ДНК. Водородные связи, высокая стабильность, и принцип комплиментарности делают ДНК отличным молекулярным конструктором.

Существуютдва основных подхода конструирования из ДНК: Принцип «пазла» и принцип «шпилек». Используя эти методы, возможно получение как двух-, так и трехмерных структур.[1]

Белок Dps является природной наночастицей, способной накапливать ионы двухвалентного и трехвалентного железа. *Dps* способен прикрепляться к ДНК используя гибкие неструктурированные N-концевые участки, содержащие 3 аминокислотныхостатка положительно заряженного лизина. Таким образом формируются нуклеопротеидные комплексы. [2]

© Скоробогатов М. С., Преображенская Е. В., Антипов С. С., 2022

Относительно недавно было показано сродство Dps к разветвленным структурам ДНК.

В частности, было показано, что константа связывания Dps с линейным участком ДНК на порядок ниже, чем константа связывания Dps с Y-подобной структурой (10^7 и 10^8 соответственно. Несмотря на то, что Dps не имеет в своей структуре специальных модулей (структур) способных распознавать конкретные нуклеотидные последовательности, по данным полногеномного секвенирования его сайтов связывания, было установлено его неравномерное распределение по бактериальной хромосоме. Среди таких сайтов было выявлено наличие различных генов кодирующих функционально разные белки, но основное количество среди них — это белки регуляторы транскрипции. Помимо этого, общим для этих сайтов связывания было наличие ДНК-мотива.**[3]**

В данный момент проведен синтез Y-подобных конструкций, спроектированных на основании нуклеотидных последовательностей регуляторной области гена *dps* с использованием твердотельного термостата и ПЦР-амплификатора. Зарегистрированы электрофореграммы результатов фракционирования синтезированных Y-подобных структур ДНК, установлено, что длительный процесс охлаждения смеси олигонуклеотидов обеспечивает более высокую специфичность сборки. Таким образом, получены самособирающиеся конструкции, пригодные для исследования рентгеноспектральными методами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lu B, Vecchioni S, Ohayon YP, Sha R, Woloszyn K, Yang B, Mao C, Seeman NC. 3D Hexagonal Arrangement of DNA Tensegrity Triangles. ACS Nano. 2021 Oct 26;15(10):16788—16793. doi: 10.1021/acsnano.1c06963. Epub 2021 Oct 5. PMID: 34609128.

2. Chesnokov Y, Mozhaev A, Kamyshinsky R, Gordienko A, *Dadinova L.* Structural Insights into Iron Ions Accumulation in Dps Nanocage. Int J Mol Sci. 2022 May 10;23(10):5313. doi: 10.3390/ijms23105313. PMID: 35628121; PMCID: PMC9140674.

3. *Сотников Д. В.*, *Жердев А. В.*, *Дзантиев Б. Б.* Детекция межмолекулярных взаимодействий, основанная на регистрации поверхностного плазмонного резонанса // Успехи биологической химии. 2015. Т. 55. С. 391—420

ОСОБЕННОСТИ ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА ДЕРМАЛЬНЫХ ПОКРОВОВ *CLARIAS GARIEPINUS*

М. В. Лиходзиевская, М. М. Бородина, Д. В. Буркова, С. С. Антипов
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
e-mail: lihodzievskaya.rita@gmail.com, тел.: +7 (915) 501-08-21

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Белки коллагены, относящиеся к фибриллярным белкам, являются наиболее распространенными структурными белки и основой для межклеточного матрикса соединительных тканей. Фибриллярные коллагены придают прочность, эластичность, улучшают заживляемость.

На данный момент описаны свойства 27 видов коллагена, однако в международной базе PDB имеется только три структуры молекул коллагена, разрешенные с использованием РСА. Все опубликованные структуры относятся к КРС, ни одной структуры коллагена гидробиотнов не опубликовано.

Цель: провести первичное сопоставление компонентов эмульсии, полученной дермальных покровов пресноводных гидробионтов на примере африканского сома Clarias gariepinus. Был изучен фракционный состав дермальных покровов африканского сома (Clariasgariepinus) как источника функциональных биополимеров. Исследовали физико-химические характеристики фракций белков, входящих в состав полученной эмульсии. Белковые структуры коллагенов анализировали с использованием электрофореза в додецилсульфат-полиакриламидном геле натрия (SDS PAGE) по модифицированному методу Лемли

Была проведена ионообменная хроматография с использованием анионнообменной смолы SephadexDEAEA-25 на хроматографе ActaStart. Мы зарегистрировали два максимума, соответствующих 36 и 67 минутам элюции. Ширина максимумов соответствует 1—10 и 20—30 фракциям белков. Электрофореграммы свидетельствуют о том, что некоторые фракции эмульсии белков, полученных в ходе ионообменной хроматографии, присутствуют высокомолекулярные белки, масса которых составляет свыше

© Лиходзиевская М. В., Бородина М. М., Буркова Д. В., Антипов С. С., 2022

120 кДа, они наиболее гомогенны и содержат наибольшее количество белка по результатам количественного окрашивания 1 % раствором Кумасси R-250.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Антипова Л. В.* Оценка бактериостатического эффекта иммобилизованных на коллагеновом носителе антибиотиков и ионов серебра в обеспечении асептики / Л. В. Антипова [и др.] // Гигиена и санитария. 2015 г. — 94 (9). — С. 54—56.

2. *Батечко С. А.* Коллаген. Новая стратегия сохранения здоровья и продления молодости / С. А. Батечко, А. М. Ледзевиров — Колечково, 2010 г. — 244с.

3. Types of Collagen // tropocollagen.eu 07 октября 2014. URL: http://www.tropocollagen.eu/types-of-collagen/ (дата обращения: 11.08.2015)

КОЛЛАГЕН *CLARIAS GARIEPINUS* КАК АКТУАЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

М. М. Бородина, М. В. Лиходзиевская, Д. В. Буркова, С. С. Антипов
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
e-mail: demerchi@list.ru, тел.:8 (989) 285 04 63

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Коллаген представляет собой фибриллярный белок, который формирует основу соединительной ткани организма (сухожилия, кости, хряща, дермы и так далее) и обеспечивает его устойчивость и эластичность. Текущий уровень знаний о структуре, биологических функциях и свойствах белков коллагена указывает на их уникальность и чрезвычайную распространенность на различных уровнях организации жизни. Согласно общим данным, по расположению в тканях существует 27 различных типов животных коллагенов. Гораздо меньше известно о структуре гидратированных коллагенов по сравнению с коллагены млекопитающих.

© Бородина М. М., Лиходзиевская М. В., Буркова Д. В., Антипов С. С., 2022

Целью данной работы было провести исследование физико-химических характеристик белков входящих в состав эмульсии, полученной из дермальных покровов африканского сома (*Clarias gariepinus)*.

На первом этапе был исследован фракционный состав белков дермальных покровов африканского сома (*Clarias gariepinus*) как источника функциональных биополимеров. Исследовали физико-химические характеристики фракций белков, входящих в состав полученной эмульсии, оценили способность эмульсии белков, полученной из дермальных покровов африканского сома (*Clarias gariepinus*) к расщеплению коллагеназой. Белковые структуры коллагенов анализировали с использованием электрофореза в полиакриламидном геле (SDS PAGE) по модифицированному методу Лемли. Была проведена ионообменная хроматография с использованием анионнообменной смолы Sephadex DEAE A-25 на хроматографе ActaStart. Мы зарегистрировали два максимума, соответствующих 36-ти и 67-ми минутам элюции. Ширина максимумов соответствует 1—10 и 20—30 фракциям белков.

Полученные данные однозначно свидетельствуют о том, что в эмульсии белков, полученной из дермальных покровов южного сома, присутствуют высокомолекулярные белки, масса которых составляет свыше 120 кДа. Также присутствует большое количество фракций, мигрирующих в области от 120 до 212 кДа [1]. Это свидетельствует о том, что даже в условиях денатурирующего электрофореза значительная часть препарата представляет собой высокомолекулярный белок. Согласно данным Батечко и Ледзевирова [2], коллаген имеет молекулярную массу свыше 100 кДа. Коллаген, полученный польскими учеными из рыбьей кожи, имеет массу 357—362 кДа. Для цепей α2 это приблизительно 130 кДа, для α1 это 105 кДа, а для β это 250 кДа, и они являются доминирующими единицами [3].

Дальнейшиее электрофореграммы свидетельствуют о том, что некоторые фракции эмульсии белков, полученных в ходе ионообменной хроматографии, присутствуют высокомолекулярные белки, масса которых составляет свыше 120 кДа, они наиболее гомогенны и содержат наибольшее количество белка по результатам количественного окрашивания 1 % раствором Кумасси R-250. Образцы этих фракций были подвергнуты воздействию коллагеназы на протяжении 1, 6 и 24 часов при 37 °С. Полученные данные свидетельствую в пользу предположения о том, что белки входящие в их состав относятся к семейству коллагенов. Таким образом, учитывая высокую сорбционную емкость неорганических частиц коллагенами, то такой материал является крайне перспективными для рентгеноспектральных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Антипова Л. В.* Оценка бактериостатического эффекта иммобилизованных на коллагеновом носителе антибиотиков и ионов серебра в обеспечении асептики/ Л. В. Антипова [и др.]// Гигиена и санитария. 2015 г. — 94 (9). — С. 54—56.

2. *Батечко С. А.* Коллаген. Новая стратегия сохранения здоровья и продления молодости [Текст]/ С. А. Батечко, А. М. Ледзевиров — Колечково, 2010 г. — 244 с.

3. Types of Collagen // tropocollagen.eu 07 октября 2014. URL: http://www.tropocollagen.eu/types-of-collagen/ (дата обращения: 11.08.2015).

ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК A-SIOX ПОСЛЕ ИМПУЛЬСНОГО ФОТОННОГО ОТЖИГА

В. А. Терехов[1], **Е. И. Теруков**[2], **Ю. К. Ундалов**[2], **И. Н. Трапезникова**[2], **К. А. Барков**[1], **Н. А. Курило**[1], **Д. Л. Голощапов**[1], **П. В. Середин**[1], **И. Е. Занин**[1]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*

e-mail: barkov@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Благодарности: *исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90234.*

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части диагностики фазового состава.

Частично работа поддержана грантом FZGU-2020-0036 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания.

Тонкие пленки нестехиометрического оксида кремния a-SiO_x с нанокластерами кремния в настоящее время активно исследуются различными лабораториями из-за возможности эффективного управления их оптическими свойствами, как на стадии формирования, так и с помощью технологических обработок [1]. При этом количество и размеры нанокластеров кремния в пленках определяется технологией их получения, что сказывается на оптических свойствах пленок SiO_x, в том числе на фотолюминесценции. Поэтому в данной работе проводились исследования влияния содержания кислорода в камере технологического реактора на формирование нанокластеров аморфного кремния в матрице SiO_x в процессе плазмохимического осаждения.

В рамках данной работы были исследованы 3 образца *a*-SiO_x: H+*ncl*-Si [2] трех составов с содержанием нанокластеров кремния около 15 мол.%, 50 мол.% и 53 мол.%. Эти образцы были отожжены в вакууме с помощью импульсного фотонного отжига (ИФО). Исследование возможности образования нанокристаллов кремния проводилось с помощью рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре PANalytical Empyrean B. V. с монохроматизированным Cu kα1 излучением, в ЦКПНО ВГУ. Кроме того, для одновременного контроля как кристаллических, так и аморфных фаз на основе кремния, пленки анализировались с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света на спектрометре Raman Microscope RamMics M532 EnSpectr в области 360—560 $см^{-1}$ с использованием лазера с длиной волны 532 нм, а также с помощью уникального метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500. Спектры оптического поглощения были получены в диапазоне 6.5—1.4 эВ на спектрометре LAMBDA 650 фирмы Perkin Elmer, а спектры фотолюминесценции на оптико-волоконном спектрометре USB4000-VIS-NIR фирмы Ocean Optics при возбуждении лазером с $\lambda = 405$ нм.

Результаты рентгенодифрактометрических исследований фазового состава пленок SiOx с нано-кластерами кремния показывают, что ИФО данных пленок приводит к образованию нанокристаллов кремния со средними размерами ~10 нм, ~50 нм и крупных кристаллитов с размерами > 100 нм, а также к кристаллизации по крайней мере части оксидной фазы в гидроокись кремния $H_6O_7Si_2$. В тоже время по данным Raman-спектроскопии в пленках с содержанием *ncl*-Si ≥ 50 мол.% после ИФО формируются массивы нанокристаллов Si со средними размерами ~1—2 нм (рис. 1), при этом интенсивность КРС мод при $\Delta\nu$~480 $см^{-1}$, обусловленных рассеянием на аморфном кремнии резко падает (рис. 1), но не до нуля. В работе [3] было установлено, что особенности в спектре КРС, обусловленные аморфным кремнием при $\Delta\nu$~480 $см^{-1}$ сохраняются и после отжига при 1000 °C в вакууме. Для объяснения этого результата можно предположить следующее: мелкие нанокластеры могут захватываться оксидной матрицей и не участвовать в процессе кристаллизации.

Кроме того, в пленках с содержанием кластеров чистого кремния ≤ 50 мол.% при отжиге часть кремния уходит на формирование оксида,

© Терехов В. А., Теруков Е. И., Ундалов Ю. К., Трапезникова И. Н., Барков К. А., Курило Н. А., Голощапов Д. Л., Середин П. В., Занин И. Е., 2022

а часть на образование нанокристаллов кремния, а в пленке с концентрацией кластеров кремния ≥ 53 мол.%, наоборот при отжиге происходит частичный переход кремния из оксидной фазы в рост нанокристаллов Si.

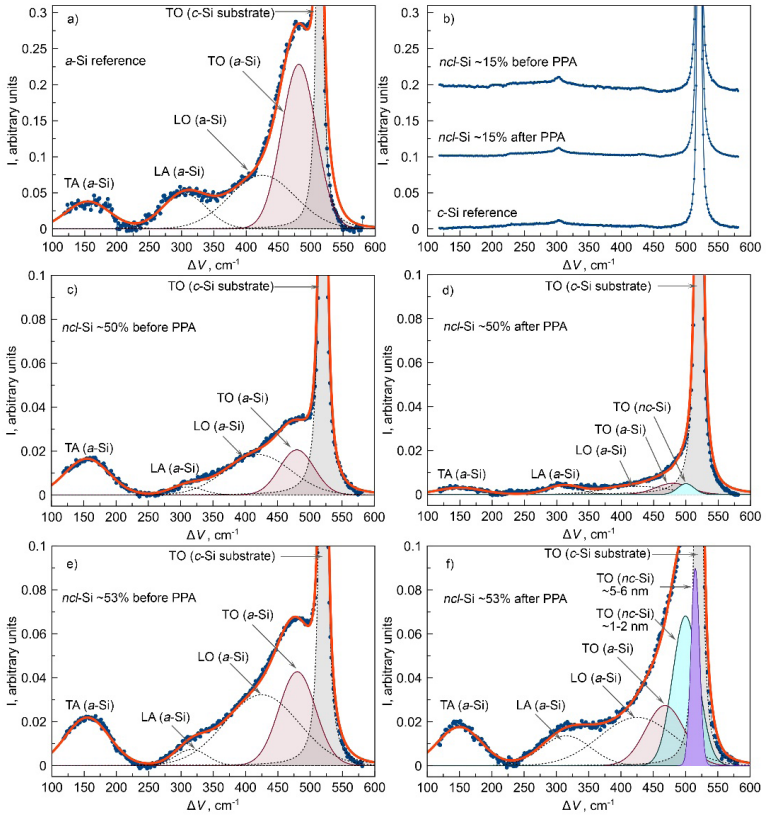


Рис. 1. КРС спектры пленок *a*-SiO_x:H с различным содержанием кремния до и после ИФО и результаты их разложения на компоненты, а также эталонные спектры аморфного *a*-Si и кристаллического *c*-Si кремния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. К. Ундалов, Е. И. Теруков, Физика и техника полупроводников, **2015,** 49, 887.

2. В. А. Терехов и др., Физика и техника полупроводников, **2016,** 50, 212.

3. Н. А. Власенко и др., Физика и техника полупроводников, **2012,** 46, 338.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ПЛЕНКАХ AG-SI ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

В. А. Терехов[1], **Д. Н. Нестеров**[1], **К. А. Барков**[1], **К. Е. Величко**[1], **А. В. Ситников**[2], **Е. С. Керсновский**[1], **И. Е. Занин**[1]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

e-mail: nesterov@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Благодарности: *работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2).*

Частично работа поддержана грантом FZGU-2020-0036 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части диагностики фазового состава.

Наноструктурированные композитные материалы, содержащие наночастицы серебра, являются перспективным материалом для технологии изготовления SERS-подложек, используемых для наблюдения эффекта поверхностно усиленного комбинационного рассеяния (гигантское рамановское рассеяние) [1], а также могут обладать рядом уникальных свойств, такими как высокая фоточувствительность и усиление фототока. Однако для получения данных нанокомпозитов, как правило, используют такие методы как магнетронное напыление, ионно-лучевое распыление, лазерную абляцию и т. д. При этом в композитном слое могут происходить сложные межфазные взаимодействия с формированием метастабильных фаз [2], обладающих собственными свойствами. Поэтому вопрос о фазовом составе пленок Ag-Si, полученных в метастабильных условиях, требует детального изучения.

© Терехов В. А., Нестеров Д. Н., Барков К. А., Величко К. Е., Ситников А. В., Керсновский Е. С., Занин И. Е., 2022

Нанокомпозитные пленки Ag-Si (толщиной 1мкм) с различным содержанием Si (от 21 % до 47 %) были получены с помощью ионно-лучевого распыления на подложках Si (100) в вакууме при давлении $1 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст.

Рентгенофазовый анализ проводился на дифрактометре PANalytical Empyrean B. V. с CuKα излучением (1,5406Å), элементный состав исследовался на РЭМ JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250, электронное строение валентной зоны пленок Ag-Si анализировалось по ультрамягким рентгеновским эмиссионным Si $L_{2,3}$-спектрам на рентгеновском спектрометре-монохроматоре РСМ-500 при энергии первичных электронов 3kV (глубина анализа ~60 нм).

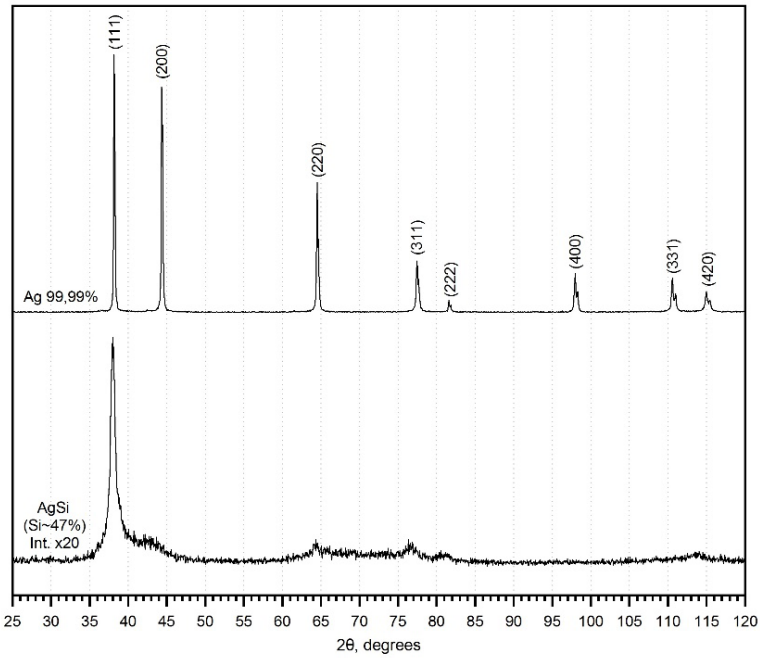


Рис. 1. Обзорные дифрактограммы серебра высокой чистоты (99,99 %) и ионно-лучевой пленки Ag-Si с содержанием Si ~47 % (интенс. x20).

Результаты рентгенодифрактометрических исследований показывают, что Ag в композитной пленке находится в нанокристаллическом состоянии, что хорошо видно по уширению дифракционной линии Ag(111), в то время как фаза кристаллического кремния отсутствует. При этом с увеличением содержания Si в пленках Ag-Si средние размеры нанокристаллов Ag в образцах уменьшаются от 15 нм (содержание Si~21 %) до 10 нм вплоть до состава с содержанием Si~47 %. Кроме того, в образце с содержанием Si~47 % наблюдается значительная асимметрия рефлекса Ag(111), что может быть связано с формированием твердого раствора на основе серебра, как это было ранее обнаружено в пленках Al-Si [2].

В то же время, результаты анализа фазового состава пленок Ag-Si по рентгеновским эмиссионным Si $L_{2,3}$-спектрам показывают, что кремний в пленках находится в основном в виде аморфного кремния (*a*-Si ~60 %) и субоксидов кремния (SiO_x ~40 % со степенью окисления «*x*» ~1.9).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Шлюкер (ред.), Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS): … (Изд-во Техносфера), **2017**, 332с.

2. V. A. Terekhov et. al., Phys. Solid State, **2018**, 60, 1021.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК W-SI

В. А. Терехов[1], **Д. Н. Нестеров**[1], **К. А. Барков**[1], **Е. С. Керсновский**[1], **С. А. Ивков**[1], **С. Хыдырова**[2], **И. В. Михайлова**[2], **Д. Д. Васильев**[2], **К. М. Моисеев**[2]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия*

e-mail: kersnovskiy@inbox.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Благодарности: *работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (МК-2926.2022.1.2).*

Частично работа поддержана грантом FZGU-2020-0036 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания.

© Терехов В. А., Нестеров Д. Н., Барков К. А., Керсновский Е. С., Ивков С. А., Хыдырова С., Михайлова И. В., Васильев Д. Д., Моисеев К. М., 2022

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части диагностики фазового состава.

Ультратонкие сверхпроводящие пленки W_xSi_{1-x} являются перспективным материалом для использования в однофотонных детекторах -сверхпроводниковых детекторах видимого и ИК диапазонов волн. Однако технологические процессы получения сплавов W-Si, а также покрытий на их основе часто являются сильно неравновесными, такие как магнетронное напыление, из-за чего в этой системе могут формироваться различные соединения сильно отличающиеся по физико-химическим свойствам [1].

В рамках данной работы были исследованы пленки W-Si, получены в МГТУ имени Н. Э. Баумана магнетронным распылением вольфрама и кремния на подложки кремния и сапфира. Толщина пленок составляла 12 нм. Исследование структуры пленок W-Si проводилось с помощью рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре PANalytical Empyrean B. V. с монохроматизированным Cu kα1 излучением, в ЦКПНО ВГУ. Кроме того, для одновременного контроля как кристаллических, так и аморфных фаз на основе кремния, пленки анализировались с помощью уникального метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500 [2].

Результаты исследований показывают, что при совместном магнетронном распылении W и Si на кремниевую подложку наблюдается только стабильные фазы силицидов вольфрама WSi_2 и W_5Si_3. В то же время, в составе пленок, полученных на сапфировых подложках, преобладает метастабильная фаза W_3Si_2. Такой результат может свидетельствовать о взаимодействии растущей пленки с кремниевой подложкой и обогащением силицидной пленки кремнием с последующим формированием высших силицидов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Pan, W. M. Guan, Journal Ceramics International, **2019**, 45, 15649.

2. Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия/ Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев. — Изд-во Ленинградского университета, 1971. —132 с.

DRIFTS AS QUANTITATIVE TOOL FOR STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF PD NANOPARTICLES

B. O. Protsenko, O. A. Usoltsev, A. A. Skorynina, A. Yu. Pnevskaya, A. L. Bugaev
The Smart Materials Research Institute, Rostov-on-Don, Russia
e-mail: bprocenko@sfedu.ru

Acknowledgement: the authors acknowledge the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation for financial support (Agreement № 075-15-2021-1363)

Diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (DRIFTS) is widely known in catalysis as a qualitative tool, mostly sensitive to light molecules, e. g. H_2O, CO, hydrocarbons and functional groups on the surface which can be used for estimation of catalytic properties of Pd nanoparticles [1]. On the other hand, quantitative structural characterization of these catalysts is usually done with use of X-ray absorption and photoelectron spectroscopies, nuclear magnetic resonance and other methods. Such techniques require more resources and more complicated to implement than DRIFTS. Since that, utilization of DRIFTS as a tool for study both structural parameters of catalysts and parameters of absorbed gases can drastically facilitate laboratory study of palladium nanoparticles as catalysts and provide an operando approach for characterization of them in industrial applications. Using machine learning algorithms [2], supported by DFT calculations and experimental X-ray absorption spectroscopy data, we develop an in situ DRIFTS method for quantitative characterization of Pd nanoparticles under exposure of H_2 and carbon monoxide.

REFERENCES

1. *Ryczkowski J.* IR spectroscopy in catalysis // Catalysis Today. — 2001. — Т. 68, № 4. — С. 263—381.

2. *Martini A.*, *Guda S. A.*, *Guda A. A.*, *Smolentsev G.*, *Algasov A.*, *Usoltsev O.*, *Soldatov M. A.*, *Bugaev A.*, *Rusalev Y.*, *Lamberti C.*, *Soldatov A. V.* PyFitit: The software for quantitative analysis of XANES spectra using machine-learning algorithms // Computer Physics Communications. — 2020. — Т. 250. — С. 107064.

© Protsenko B. O., Usoltsev O. A., Skorynina A. A., Pnevskaya A. Yu., Bugaev A. L., 2022

ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ MEOX/МУНТ (ME = CU, NI)

В. О. Дмитриев, Е. С. Богославская, В. А. Шматко, Г. Э. Яловега
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: vdmitriev@sfedu.ru, тел.: +7 (909) 435-93-57

Композиты на основе углеродных нанотрубок и оксидов переходных металлов обладают уникальными физическими и химическими свойствами, что делает их подходящими для множества применений, включая использование в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов. Целью работы было исследование электронная структуры нанокомпозитных материалов на основе оксидов переходных металлов (Cu, Ni) и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) с помощью метода ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure).

NEXAFS спектры в области K-края поглощения углерода были получены методом полного электронного выхода в Русско-Германской лаборатории на BESSY II. NEXAFS спектры в области K-края поглощения меди были получены с использованием излучения канала вывода КМС-2 на BESSY II [1]. NEXAFS спектры в области K-края поглощения никеля были получены с использованием излучения канала вывода КМС-2 на BESSY II [2]. NEXAFS спектры углерода имеют две характерные спектральные особенности — π (~285 эВ) и σ (~292 эВ) резонансы. Особенности в межрезонансной области указывают на окисление или другие модификации нанотрубок. Согласно спектроскопии рентгеновского поглощения, при образовании нанокомпозита MeOx/МУНТ происходят изменения в степени окисления и фазовом составе наночастиц. Спектры нанокомпозитов CuOx/МУНТ совпадают со спектром оксида меди CuO [1]. Спектры композитов NiOx/МУНТ имеют наибольшее сходство со спектром $Ni(OH)_2$ [2]. Отличия в энергии и интенсивностях могут говорить о различениях в локальной вокруг поглощающего атома. Анализ изменений локальной и электронной структуры атомов металлов в наночастицах при формировании композитов также проводился по характерным изменениям L-края спектров рентгеновского поглощения меди и никеля. Спектры нанокомпозитов CuOx/МУНТ соответствуют спектрам оксида меди CuO

© Дмитриев В. О., Богославская Е. С., Шматко В. А., Яловега Г. Э., 2022

с небольшой примесью Cu_2O. Анализ спектров NEXAFS L-края поглощения Ni показывает, что Ni в составе нанокомпозита обладает степенью окисления 2+.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Shmatko, G. Yalovega, A. Barbashova, A. Kuriganova, E. Bogoslavskaya, N. Smirnova // Key Engineering Materials. — **2016** — Vol. 683. — P. 215—220.

2. V. Shmatko, D. Leontyeva, N. Nevzorova, N. Smirnova, M. Brzhezinskaya, G. Yalovega // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena — **2017**. — No. 220 P. 76—80.

ФЕРРИМАГНЕТИЗМ В КВАЗИСВОБОДНОМ ГРАФЕНЕ

А. В. Ерыженков, А. В. Тарасов, А. А. Рыбкина, А. Г. Рыбкин
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: averyzhenkov@gmail.com

Благодарности: *работа выполнена благодаря финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).*

На сегодняшний день графен остается одним из наиболее интенсивно исследуемых материалов благодаря своему высокому потенциалу применения в 2D-электронике и спинтронике. Свободный графен является немагнитным материалом с крайне слабым спин-орбитальным взаимодействием, но контакт с атомами подложки может значительно модифицировать его электронную структуру. Подложки, состоящие из тяжелых атомов, в силу эффекта Рашбы зачастую индуцируют на графене значительное спин-орбитального взаимодействие, открывая возможность эффективной генерации спиновых токов на основе спинового эффекта Холла и его квантовой версии [**1**].

Наблюдение квантового *аномального* эффекта Холла, однако, требует комбинирования сильного спин-орбитального взаимодействия с магне-

© Ерыженков А. В., Тарасов А. В., Рыбкина А. А., Рыбкин А. Г., 2022

тизмом [**2**], что достигается в системе Gr/Au/Co(0001) [**3**] при сохранении линейного характера дисперсии зон графена.

В предыдущей работе нашей научной группы [**4**] сообщалось о реализации такого «магнитно-спин-орбитального» графена на интерфейсе Au/Co(0001), где последний характеризуется петлевыми дислокациями в верхнем слое кобальта под графеном. Посредством расчетов в рамках теории функционала плотности (ТФП) ограниченной модели с периодичностью (2 × 2) без учета петлевых дислокаций было показано, что для такой системы характерна асимметрия спинового расщепления электронной структуры графена в K и K’ долинах. В данной работе расчеты были выполнены для более реалистичной модели системы Gr/Au/Co(0001) с периодом (9 × 9), содержащей в себе треугольные дефекты, наблюдаемые в данных сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Теоретические модели СТМ-изображений поверхности образца совпали с экспериментальными данными в части проявления треугольных дефектов в местах нахождения петлевых дислокаций.

Посредством ТФП-расчетов было показано, что основное состояние исследуемой системы характеризуется равномерным ферримагнитным порядком в графене, обуславливающим долинную асимметрию спинового расщепления его электронных состояний, сопряженную с открытием в них запрещенной зоны. Указанные характеристики зон графена подтверждаются данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением (SARPES), полученными от образцов с намагниченным вдоль поверхности и поперек ГК-направлению графена слоем кобальта. SARPES-измерения демонстрируют запрещенную зону 60—100 мэВ и асимметричное расщепление π-состояний величиной 40 и 80 мэВ в ГК и ГК’-ветвях дисперсии, соответственно.

Основные характеристики зонной структуры графена, полученные в SARPES-измерениях, удалось *количественно* воспроизвести в модели чистого графена, построенной по методу сильной связи при наличии Рашба- и кулоновского взаимодействий при неравной (ферримагнитной) спиновой заселенности подрешеток. Оказалось, что для такой модели свойственно наличие дипольных структур кривизны Берри в K и K’ долинах и **k**-селективность фотовозбуждения межзонных переходов, позволяющая получить свободные носители заряда с разными знаками кривизны Берри путем применения быстрых (1—10 фс) и мощных импульсов инфракрасного ($h\nu$ ~ 120 мэВ) циркулярно поляризованного излучения, что в свою очередь позволяет наблюдение аномальной холловской проводимости в течение короткого промежутка времени.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Kane C. L.*, *Mele E. J.* // Phys. Rev. Lett. — **2005**. — V. 95 — P. 146802
2. *Phong V. T.*, *Walet N. R.* and *Guinea F.* // 2D Mater. — **2017**. — V. 5 — P. 014004
3. *Marchenko D.* et al. // Nat. Commun. — **2012**. — V. 3. — P. 1232
4. *Rybkin A. G.* et al. // Nano Letters. — **2018**. — V. 18 — P. 1564

ДЕКОРИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ TiO_2 КОЛЛОИДНЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ PBS ДЛЯ СЕНСИБИЛИЗАЦИИ К ИЗЛУЧЕНИЮ ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

А. С. Перепелица, С. В. Асланов, Ф. А. Цыбенко
«Воронежский государственный университет», Воронеж, Россия
e-mail: a-perepelitsa@yandex.ru, тел.: +7 (473) 220-87-80

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-4406.2022.1.2.*

В настоящее время в научной и технической литературе большое внимание уделяется исследованиям в области разработки активных соединений для фотокатализа на основе наночастиц (НЧ) широкозонных полупроводников (TiO_2, ZnO и др.), обеспечивающих эффективное фотоиндуцированное разделение носителей заряда и генерацию активных форм кислорода [1]. Существенным ограничением практического применения данных фотокатализаторов является ограничение собственного поглощения УФ-областью, что делает актуальным разработку методик их фотосенсибилизации к излучению видимого диапазона [1]. Один из подходов решения этой проблемы является разработка методик сенсибилизации НЧ за счет декорирования поверхности НЧ коллоидными квантовыми точками (КТ) с широкой полосой поглощения [1].

В данной работе разработана методика декорирования наночастиц диоксида титана (НЧ TiO_2) коллоидными квантовыми точками PbS (КТ PbS), синтезированными в рамках водного синтеза в растворах пассиваторов (тиогликолевой (PbS/TGA), 2-меркаптопропионовой (PbS/2-MPA) или 3-меркаптопропионовой (PbS/3-MPA) кислот). Средний размер КТ PbS, согласно данным просвечивающей электронной микроскопии, составлял

© Перепелица А. С., Асланов С. В., Цыбенко Ф. А., 2022

для КТ PbS/TGA — 2.9 ± 0.5 нм, для КТ PbS/2-MPA — 3.1 ± 0.7 нм и для КТ PbS/3-MPA — 2.7 ± 0.4 нм. НЧ TiO_2 обладали средним размером 10 нм и кристаллической структурой анатаза. Исследованы спектры оптического поглощения и люминесценции коллоидных КТ PbS с различными пассиваторами и ассоциаты с НЧ TiO_2 на их основе. Установлено, что формирование агрегатов НЧ TiO_2/КТ PbS приводит к тушению люминесценции КТ до 5 раз вне зависимости от типа пассивирующих молекул. Экспериментальные данные показывают, что формирование агрегатов НЧ TiO_2/КТ PbS сенсибилизацию фотосенсибилизатора к излучению из видимой области спектра. При этом наблюдается продуцирование активных форм кислорода (гидроксильный радикал (·OH), перекись водорода (H_2O_2), синглетный кислород ($^1O_2$)). Сенсибилизация НЧ TiO_2 при декорировании КТ PbS ассоциирована с переносом зарядов между компонентами нанокомпозита. Полученные экспериментальные данные свидетельствует о пригодности разработанного нами метода для сенсибилизации НЧ TiO_2 к излучению из видимой области спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Tahir M.*, *Rafique M.*, *Rafique M.* In Micro and Nano Technologies, Nanotechnology and Photocatalysis for Environmental Applications. — Amsterdam: Elsevier Inc. (2020).

ИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ AG_2SE, ПОКРЫТЫХ МОЛЕКУЛАМИ 2-МЕРКАПТОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ

М. С. Смирнов, Т. С. Кондратенко, А. И. Звягин, В. Ю. Хохлов, Т. А. Чевычелова, В. Н. Дерепко, С. В. Асланов, К. С. Чирков
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: viol.physics@gmail.com, тел.: +7 (473) 220-87-80

Благодарности: *работа поддержана грантом РНФ № 22-12-00232.*

© Смирнов М. С., Кондратенко Т. С., Звягин А. И., Хохлов В. Ю., Чевычелова Т. А., Дерепко В. Н., Асланов С. В., Чирков К. С., 2022

Размерно-зависимые оптические свойства полупроводниковых квантовых точек (КТ) обеспечивают возможность их практической реализации в широком спектральном диапазоне. Однако, наибольшим преимуществом обладают КТ на основе халькогенидов металлов (Ag_2S, Ag_2Se, PbS, PbSe и др.), размерно-зависимые оптические свойства которых расположены в ИК области [1]. В литературе представлены данные для КТ различного химического состава, обладающих полосами люминесценции в области 0.75—2.5 мкм. Однако, несмотря на этот прогресс большинство составов ИК люминесцирующих КТ принадлежат к существенно нестехиометрическим соединениям. Высокая концентрация структурных дефектов существенным образом усложняет понимание фотопроцессов, определяющих люминесценцию, полосы которой имеют значительный стоксов сдвиг и сложную размерную зависимость. В связи с этим, установление механизмов фотопроцессов, определяющих ИК люминесценцию КТ является актуальной задачей современной нанофотоники.

В работе представлены результаты исследований спектрально-люминесцентных свойств КТ Ag_2Se средним размером около 2.5 нм, покрытых молекулами 2-меркаптопропионой кислоты. Показано, что спектр оптического поглощения КТ Ag_2Se имеет экситонную структуру с пиком при энергии 1.89 эВ, что значительно превышает ширину запрещенной зоны для массивных кристаллов Ag_2Se (0.15 эВ) [2]. Положение максимума люминесценции (1.70 эВ), полуширина полосы (0.18 эВ), стоксов сдвиг (0.19 эВ) свидетельствуют об экситонном механизме свечения КТ Ag_2Se.Понижение температуры от 300 до 77 K сопровождался тушением экситонной люминесценции и разгоранием новой интенсивной полосы при 1.47 эВ, полуширина которой составила 0.45 эВ, а стоксов сдвиг 0.42 эВ. Анализ спектров возбуждения, кинетики затухания люминесценции, а также энергии активации температурного тушения позволил предложить трехуровневую схему энергетических уровней, определяющих люминесценцию КТ Ag_2Se. Показано, что температурные эффекты в люминесценции определяются конкуренцией между захватом на центр свечения и термическим освобождением с него носителей заряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ma Y.*, Zhang Yu and *Yu W. W.* J. *Mater. Chem. C*, **2019**,7:13662.

2. Zhu Ch.-N., *Jiang P.*, Zhang Zh.-L., et. al. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2013**, 5(4):1186.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РОСТА И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ НА БИОГЕННЫХ ПОДЛОЖКАХ В УСЛОВИЯХ ЖИДКОФАЗНОГО СИНТЕЗА

А. А. Емельянова[1], **Д. Л. Голощапов**[1], **П. В. Середин**[1], **Ю. А. Ипполитов**[2]
[1]*ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет» Воронеж, Россия*
[2]*ФГБОУ ВО «Воронежский государственный медицинский университет им. Н. Н. Бурденко» Воронеж, Россия*
e-mail: anna.liviero238@mail.ru, тел.: +7 (9009) 310-765

В настоящее время одной из актуальнейших задач в стоматологическом материаловедении является изучение процессов восстановления эмали зубов человека за счет создания на ее поверхности биоинспирированных слоев и покрытий на основе нанокристаллического карбонат-замещенного гидроксиапатита кальция (нкГАп). Отдельным вопросом выступает изучение физико-химических характеристик образованных слоев по сравнению с нанокристаллическим комплексом апатита эмали.

В данной работе с использованием методик Атомно–силовой микроскопии (АСМ), высокоразрешающей сканирующей электронной микроскопии (ВСЭМ), Рамановской микроспектроскопии и наноиндентирования были изучены морфологические, субструктурные и механические особености формирования слоев на поверхности эмали зубов человека. Получение биоинспирированных слоев осуществлялось с предобработкой исходной эмали в кислотных, щелочных средах с участием аминокислот и минерализации в растворах нкГАп [1].

Исследование образцов методами АСМ и ВСЭМ показало, что обработка эмали в щелочном растворе приводит к образованию однородной и гомогенной морфологии новообразованного слоя с наличием текстуры по всей поверхности. Анализ микрофотографий сколов подтвердил образование слоев с толщиной порядка ~350 нм. Образцы эмали, которые были минерализованы в растворах нкГАп без обработки в щелочи, характеризовались наличием агломератов 0,5—1 мкм и отсутствием текстуры.

© Емельянова А. А., Голощапов Д. Л., Середин П. В., Ипполитов Ю. А., 2022

С использованием Рамановской микроспектроскопии установлено, что для образцов подвергнутых минерализации положение главного максимума относимого к симметричному валентному колебанию PO_4^{3-} локализовано в области 961.5 $см^{-1}$. В то же время анализ показывает, что интактная эмаль имеет максимум в области 959,5 $см^{-1.}$ Сдвиг полосы объясняется формированием слоя менее дефектного нкГАп на поверхности эмали после процедуры минерализации.

Исследование твердости с использованием наноиндентирования позволило определить, что предобработка в различных средах и минерализация в растворах нкГАп влияет на средне значение как твердости, так и модуля упругости. В случае минерализации эмали без обработки в щелочи значение механических характеристик возрастает относительно исходной эмали. Для образцов предобработанных в щелочи и с участием аминокислот значений твердости превышают HV = 600, определяема для интактной эмали.

ЛИТЕРАТУРА

1. Goloshchapov, D.; Kashkarov, V.; Nikitkov, K.; Seredin, P. *Biomimetics* **2021**, *6*, 70.

КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА ДЛЯ МОНИТОРИНГА КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ, ЗАГРУЖЕННЫХ ЛЕКАРСТВОМ

А. В. Бреева[1], **Н. В. Первушин**[2], **У. А. Цурикова**[1], **А. А. Елисеев**[3], **М. Б. Гонгальский**[1], **Л. А. Осминкина**[1]
[1]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет фундаментальной медицины, Москва, Россия*
[3]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия*
e-mail: breeva.av19@physics.msu.ru, тел.: +7 (903) 773-63-96

Благодарности: *исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-75-10107, https://rscf.ru/project/22-75-10107/*

© Бреева А. В., Первушин Н. В., Цурикова У. А., Елисеев А. А., Гонгальский М. Б., Осминкина Л. А., 2022

Задачи разработки эффективных систем доставки лекарств для преодоления нежелательных побочных эффектов и максимизации терапевтической эффективности химиотерапии опухолей — одни из главных в современной медицине. Для этого активно используются различные носители лекарств нанометровых размеров (наноконтейнеры). Однако, для достижения максимальных терапевтических эффектов от использования наноконтейнеров, необходимо уметь отслеживать местонахождение наночастиц после введения в клетки и ткани.

В последнее время микро-спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) стала мощным и хорошо подходящим инструментом в биоаналитике. КР регистрирует молекулярные колебания, которые активируются лазерным излучением. На основе спектров КР можно определить химические отпечатки молекул, что позволяет отслеживать локализацию веществ внутри клетки [1].

В данной работе проведен мониторинг *in vitro* композитных наночастиц пористого кремния с золотом, покрытых полиэтиленгликолем (ПЭГ-Au-пКНЧ), в поры которых было загружено химиотерапевтическое лекарство Sunitinib malate (СБ), при их взаимодействии с клетками колоректального рака HCT116 методом спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Показана интернализация ПЭГ-Au-пКНЧ при их инкубации 3—12 часов с клетками. В спектре КР наблюдаются пики на характерных частотах нанокристаллического кремния (518 $см^{-1}$), СБ (1320 и 1574 $см^{-1}$) и белков клетки. При этом необходимо отметить, что за счет эффекта гигантского КР на наночастицах золота, наблюдалось усиление интенсивности спектров от лекарства, адсорбированного в порах ПЭГ-AuКНЧ.

Размер нанокристаллов кремния рассчитывался из положения максимума в спектре КР формуле [2]:

$$D = 0.543\left(\frac{52.3}{\Delta\omega}\right)^{0.63}, \qquad (1)$$

где Δω — сдвиг максимума спектра КР нанокристаллов относительно 520,5 $см^{-1}$ (максимум сигнала КРС кристаллического кремния). Рассчитанный по положению максимума диаметр D кремниевых нанокристаллов, из которых состоят ПЭГ-Au-пКНЧ, составлял ~ 6 нм.

Таким образом, показано, что наноконтейнеры на основе наночастиц пористого кремния с загруженным в них химиотерапевтическим лекарством могут быть успешно обнаружены в раковых клетках и тканях с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Tolstik E.* et al. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*. **2016**. 12. 7. 1931—1940.

2. *Gongalsky M. B.* et al. *Faraday Discussions*. **2020**. 222. 318—331.

СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С УЧАСТИЕМ ЗОЛОТЫХ НАНОЧАСТИЦ

К. А. Гончар, И. В. Божьев, О. А. Шалыгина, А. А. Елисеев, Л. А. Осминкина
«МГУ имени М. В. Ломоносова», Москва, Россия
e-mail: k.a.gonchar@gmail.com, тел.: +7 (915) 091-39-17

Благодарности: *исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, https://rscf.ru/project/22-72-10062/.*

Кремниевые нанонити (КНН), изготовленные методом металл-стимулированного химического травления (МСХТ), проявляют такие свойства, как фотолюминесценция в видимом и инфракрасном диапазонах спектра, низкий коэффициент отражения в видимом диапазоне спектра и усиление комбинационного рассеяния света по сравнению с исходной подложкой кристаллического кремния [1]. В подавляющем большинстве работ в методе МСХТ в качестве катализатора химических реакций используются серебряные наночастицы, осажденные химическим способом из раствора, содержащем $AgNO_3$ и HF. В настоящей работе КНН были получены МСХТ, где в качестве катализаторов химической реакции выступали наночастицы Au. Для травления были использованы пластины монокристаллического кремния p-типа проводимости, кристаллографической ориентацией (100) и различным удельным сопротивлением.

Структурные свойства КНН исследовались с помощью сканирующей (CarlZeiss SUPRA 40 FE-SEM) и просвечивающей (Zeiss Libra200FE) электронной микроскопии для контроля размеров, формы и пористости полученных образцов. Были измерены спектры отражения полученных образцов в ближнем и среднем ИК диапазонах, а также спектры полного отражения для контроля поверхности образцов, а также для получения

© Гончар К. А., Божьев И. В., Шалыгина О. А., Елисеев А. А., Осминкина Л. А., 2022

интерференционной картины, которая, в зависимости от толщины слоя нанонитей и их морфологии, может быть в видимом, ближнем ИК или среднем ИК диапазонах спектра. По интерференционной картине рассчитан эффективный показатель преломления и оценена пористость получившихся образцов по модели эффективной среды. Изучение межзонной фотолюминесценции и комбинационного рассеяния света КНН было выполнено для контроля кристалличности структуры и усиления локальных полей, которые выражаются в увеличении интенсивности как комбинационного рассеяния света, так и интенсивности межзонной фотолюминесценции, а изучение видимой фотолюминесценции позволило сделать выводы о наличии кремниевых нанокристаллов и их количестве на поверхности и в объеме кремниевых нанонитей, а также оценить их размер.

ЛИТЕРАТУРА

1. Osminkina LA, Gonchar KA, Marshov VS, Bunkov KV, Petrov DV., Golovan LA, Talkenberg F, Sivakov VA and Timoshenko VYu. NRL, 2012, 7:524.

КОМПОЗИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ В КАЧЕСТВЕ ЭФФЕКТИВНЫХ КОНТЕЙНЕРОВ ДЛЯ ЗАГРУЗКИ ПРОТИВОРАКОВОГО ПРЕПАРАТА SUNITINIB MALATE

М. Г. Шатская, Н. В. Первушин, Ж. В. Самсонова, Н. Ю. Саушкин, Л. А. Осминкина
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
e-mail: ciniksa1@gmail.com, тел.: +7 (977) 987-75-64

Благодарности: *исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-75-10107, https://rscf.ru/project/22-75-10107/».*

Для повышения эффективности противораковой терапии используются методы доставки лекарств непосредственно к раковым клеткам, что позволяет повысить селективность воздействия препарата и снизить вред окружающим здоровым клеткам. Использование пористых наночастиц

© Шатская М. Г., Первушин Н. В., Самсонова Ж. В., Саушкин Н. Ю., Осминкина Л. А., 2022

кремния (пКНЧ) возможно благодаря их свойствам биодеградируемости и биосовместимости[1]. Наряду с противораковой терапией возможно проведение диагностики с детектированием частиц в организме, для этого создается композит пКНЧ с золотом, что позволяет получить плазмонный резонанс на благородных металлах. При малых концентрациях вещества измерение спектра методом спектроскопии комбинационного рассеяния света может не дать результата, если же использовать композит с благородным металлом, то пик плазмонного резонанса проявится[2].

В данной работе были изучены специальные методики получения композитных пКНЧ с вкраплениями золота и далее загрузки препарата Sunitinib malate(СБ) в поры частиц. Также пКНЧ покрываются полиэтиленгликолем для дальнейшей доставки в организм. Методом динамического рассеяния света был получен средний размер изготовленных частиц — 63 нм. При загрузке препарата одним из важнейших параметров является процент загрузки, он напрямую влияет на эффективность терапии. В данной методике процент загрузки составил примерно 30 %.

Для изучения возможной токсичности наночастиц были использованы методы Вестерн-блот анализа и проточной цитометрии. Исследования проводились на клеточной линии колоректального рака HCT116. Результаты показали, что частицы ПЭГ-Au-пКНЧ не приводят к гибели раковых клеток в диапазоне концентраций до 1000 мкг/мл при инкубации с клетками в течение 72 часов. Изучаемые наночастицы не являются токсичными и могут быть использованы в дальнейших *in vitro* и *in vivo* экспериментах. Также, наночастицы, загруженные препаратом Sunitinib malate, показали высокую эффективность запуска гибели в клетках HCT116, которая была сравнима с действием данного препарата без использования частиц *in-viro*.

Итого, композитные пКНЧ с золотом, загруженные противораковым препаратом, имеют большой потенциал для таргетированной терапии рака без вреда всему организму.

ЛИТЕРАТУРА

1. Helder a. Santos | Porous silicon for biomedical applications | Woodhead Publishing Series in Biomaterials, 2021

2. *Liubov A.* Osminkina, Olga Žukovskaja, *Svetlana N.* Agafilushkina, Egor Kaniukov, Ondrej Stranik, *Kirill A.* Gonchar, Dmitry Yakimchuk, Victoria Bundyukova, *Dmitry A.* Chermoshentsev, *Sergey A.* Dyakov, *Nikolay A.* Gippius, Karina Weber, Jürgen Popp, Dana Cialla–May, Vladimir Sivakov | Gold nanoflowers grown in a porous Si/SiO2 matrix: The fabrication process and plasmonic properties | Applied Surface Science 2020

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $MNBI_2TE_4$ ПРИ ДОПИРОВАНИИ АТОМАМИ GE, SB И S

Т. П. Макарова, А. М. Шикин, А. В. Ерыженков, А. В. Тарасов
«Санкт-Петербургский Государственный Университет», Санкт-Петербург, Россия
e-mail: i@tmakarova.ru, тел.: +7 (950) 017-70-98

Благодарности: *работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 90383050).*

В последнее время значительное внимание привлекается к исследованию новых квантовых материалов с уникальной электронной структурой, таких как топологические изоляторы (ТИ) [1]. Эти материалы являются перспективными элементами для электроники с низким энергопотреблением [2], спинтроники и реализации фундаментальных эффектов, таких как топологический магнитоэлектрический эффект [3] и квантовый аномальный эффект Холла [4]. Собственные магнитные ТИ — это материалы с объемной запрещенной зоной и топологически защищенными проводящими состояниями на поверхности, существование которых обусловлено сильным спин-орбитальным взаимодействием, приводящим к инверсии объемной запрещенной зоны и изменению топологии материала. В таких ТИ магнитный металл стехиометрически встроен в кристаллическую решетку образца. Металлический характер поверхностных состояний оказывается защищенным благодаря наличию симметрии обращения времени [5]. Кроме того, это приводит к существованию точки вырождения состояний конуса Дирака по спину в точке их пересечения в вершине конуса (согласно теореме Крамерса) — так называемой точке Дирака. Однако если нарушить симметрию обращения времени, в поверхностных состояниях образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака зоны Бриллюэна, вследствие чего возможен переход материала в состояние квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ) [6]. Таким образом, для дальнейшего изучения ТИ необходимо понимать, как можно влиять на электронную структуру ТИ и величину ЭЗЗ. Данная работа посвящена изучению возможности изменения электронной структуры ТИ $MnBi_2Te_4$ при замене атомов Mn на Sn, Pb, Ge; Bi — на Sb; Te — на S. Исследование проводилось как с теоретической точки зрения методом теории функционала плотности, так и с экспериментальной при использовании метода фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. В данной работе показана корреляция между величиной ЭЗЗ и концентрацией примеси в кристалле, что предполагает гибкое управление электронными свойствами ТИ $MnBi_2Te_4$ при его допировании немагнитными атомами. Варьируя элементы в поверхностном слое, можно менять эффективный магнитный момент, который определяет величину ЭЗЗ. Замена немагнитных атомов Bi и Te приводит к изменению спин-орбитального взаимодействия. Вышеперечисленные изменения позволяют модулировать как электронную структуру топологических поверхностных состояний, так и величину ЭЗЗ в точке Дирака.

© Макарова Т. П., Шикин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. *Hasan M.* Z and *Kane C. L. Reviews of modern physics*., **2010**, 4:3045.
2. *Chen Y. P. Micro-and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications IV*., **2012**. 8373: 83730B.
3. Zhang, D., Shi, M., Zhu, T., Xing, D. *Physical review letters*., **2019**, 20:206401
4. Yu, R., Zhang, W., Zhang, H. J., Zhang, S. C. *Science*., **2010**, 5987:61.
5. *Chang C. Z.*, *Wei P.*, *Moodera J. S. MRS Bulletin*., **2014**. № . 10. С. 867—872.
6. *Chang C. Z.*, *Li M. Journal of Physics: Condensed Matter*., **2016**, 12:123002.

АДСОРБЦИЯ МОНОСЛОЯ NA НА ГРАФЕН/PT(111)

А. А. Гогина[1], **А. В. Тарасов**[1], **А. Г. Рыбкин**[1],
А. М. Шикин[1], **М. Филянина**[2], **И. И. Климовских**[1, 3]
[1]*Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Department of Physics, AlbaNova University Center, Stockholm University, S-106 91 Stockholm, Sweden*
[3]*Центр перспективных методов мезофизики и нанотехнологий, Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*
e-mail: alevtina_gogina@mail.ru, тел.: +7 (963) 244-46-67

Благодарности: *работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 90383050).*

В настоящее время графен продолжает привлекать значительный исследовательский интерес, обусловленный его большим потенциалом для практического применения в электронике и спинтронике [1, 2] ввиду наличия уникальной линейной дисперсии электронных π-состояний в близи *K*-точки зоны Бриллюэна, именуемой конусом Дирака, которая может быть использовано для реализации бездессипативного электронного транспорта. Однако, состояния свободного графена не обладают обменным и спин-орбитальным расщеплением, что препятствует его использованию в спинтронике.

Тем не менее, контакт графена с другими атомами может приводить к существенной модификации его электронных свойств. Например, в системе Gr/Pt сохраняется квазисвободный характер графена, однако при этом *d*-состояния платины гибридизуются с π-состояниями графена, приводя к их спин-орбитальному расщеплению и появлению ассиметричной спиновой поляризации конуса Дирака. Благодаря этому система графен/Pt(111) обладает потенциальной возможностью создания спин-поляризованных токов, как это было показано в работе [3].

Стоит, однако, отметить, что из-за того, что π-состояния графена при контакте с атомами платины становятся *p*-допированным, посредством измерений валентных состояний системы графен/Pt(111), в фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) удается получить

© Гогина А. А., Тарасов А. В., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., М. Филянина, Климовских И. И., 2022

экспериментальные данные только лишь о некоторой части нижних ветвей конуса Дирака (*p*-допирование приводит к тому, что точка Дирака находится выше уровня Ферми).

В данной работе нами была предпринята попытка экспериментально проанализировать верхнюю часть конуса π-состояний графена в системе графен/Pt(111) путем их n-допирования за счет нанесения на поверхность графена атомов натрия. В результате данной процедуры мы не только смогли провести ФЭСУР измерения верхней части конуса Дирака, но и обнаружить формирование двумерного металлического слоя, состоящего из атомов натрия. Для характеризации полученной вертикальной гетероструктуры, помимо ФЭСУР измерений, нами было использовано моделирование электронной и спиновой структуры посредством расчетов в рамках метода теории функционала плотности (ТФП). В результате стоит констатировать, что наиболее интригующим свойством изучаемой системы является появление в электронной структуре адсорбированного натрия частично спин-поляризованных состояний, напоминающей графеновый конус Дирака. Появление данных состояний подтверждается как проведенными ФЭСУР измерениями, так и результатами ТФП расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Han W.* et al. Graphene spintronics //Nature nanotechnology. — 2014. — Т. 9. — № . 10. — С. 794—807.

2. *Rybkina A. A.* et al. Advanced graphene recording device for spin–orbit torque magnetoresistive random access memory //Nanotechnology. — 2020. — Т. 31. — № . 16. — С. 165201.

3. *Klimovskikh I. I.* et al. Nontrivial spin structure of graphene on Pt (111) at the Fermi level due to spin-dependent hybridization //Physical *Review B.* — 2014. — Т. 90. — № . 23. — С. 235431.

СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ СПОСОБА ВЫСУШИВАНИЯ НА СОСТАВ И СТРУКТУРУ ПОРОШКОВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

С. С. Титова[1], **Д. А. Коюда** [1], **Л. А. Осминкина**[2], **Р. Г. Чумаков**[3], **А. М. Лебедев**[3], **А. А. Кудрявцев**[4], **Ю. С. Какулия**[1], **Е. В. Паринова**[1], **О. А. Чувенкова**[1], **С. Ю. Турищев**[1]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

[3]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

[4]*Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия*

e-mail: titova@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 240-66-53

Благодарности: *работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20180) Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Наночастицы пористого кремния (PSi NPs) обладают рядом отличительных биологических свойств, которые во многом зависят от качеств исходного кремния, параметров электрохимического травления пластин монокристаллического кремния c-Si, методов и способов высушивания, полученных в процессе измельчения пористого слоя PSi NPs и способов и режимов их совмещения с биологической средой. Кроме того, наличие у PSi NPs биологических свойств свидетельствуют о возможности применения их в биомедицинском аспекте, в том числе тераностике различных заболеваний. В виду потенциальной возможности использовать PSi NPs в биомедицине актуально подобрать оптимальные условия и способы их получения. Поэтому применение прямых экспериментальных методов высокоточной диагностики состава и структуры, атомного и электронного строения таких материалов безусловно востребовано.

Высушивание суспензии наночастиц PSi NPs, полученной методом механического измельчения в планетарной мельнице, происходило двумя методами. Первый способ — термическое высушивание в сушильном шкафу, полученный образец — порошок AD-PSi NPs (air drying). Второй был высушен лиофильным способом в результате был получен порошок FD-PSi NPs (freeze drying).

Полученные порошки были детально исследованы методами растровой и просвечивающей электронной микроскопии, а также рентгеновской дифракции. Для исследования специфики локального атомного окружения, электронного строения и состава нами использовался метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES — X-ray Absorption Near Edge Structure). Для получения спектров XANES (возбуждения остовного $L_{2,3}$ уровня атомов кремния) используется высокоинтенсивное излучение синхротронных источников класса «мегасайенс», что позволяет варьировать энергию квантов рентгеновского излучения без потерь в интенсивности. В нашем случае использовалось излучение станции НАНОФЭС синхротрона НИЦ «Курчатовский институт». Глубина информативного слоя составляла ~ 5 нм для Si $L_{2,3}$ спектров. Кроме порошков были получены данные для исходного образца пористой пленки на пластине кремния совместно с эталонными объектами: пластиной кристаллического кремния, пленками аморфного кремния и термически выращенного диоксида кремния.

Показаны и проанализированы отличия в размере наночастиц, их агломерации и структуре. Данные синхротронных исследований говорят о следующем. Существенные различия тонкой структуры и распределения основных особенностей рентгеноспектральных линий (краев поглощения) наблюдаются в области края, относимого к элементарному кремнию. Спектральные особенности указывают на почти полное окисление в случае AD-PSi NPs, в случае же FD-PSi NPs характер распределения тонкой структуры XANES Si $L_{2,3}$ спектров предполагает присутствие атомов кремния в наночастицах, не подверженных окислению.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что высушивание лиофильного типа предотвращает окисление PSi NPs, по крайней мере в пределах глубины информативного слоя использованного метода. Такой результат говорит о влиянии способа высушивания на поверхностные свойства и их стабильность, в том числе при длительном хранении, а также на дальнейшее взаимодействие PSi NPs с биологическими объектами.

© Титова С. С., Коюда Д. А., Осминкина Л. А., Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Кудрявцев А. А., Какулия Ю. С., Паринова Е. В., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю., 2022

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ДИСИЛИЦИДА КОБАЛЬТА

Г. П. Потуданский, С. И. Курганский
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: potudanskiy@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 220-83-63

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

В настоящее время с развитием наноэлектроники и спинтроники возникает интерес в фундаментальных и прикладных исследованиях наносистем, что влечет за собой необходимость в высокоточных методах анализа свойств материалов. Наноструктуры из дисилицидов переходных металлов являются одними из фундаметальных материалов при производстве изделий микро- и наноэлектроники [1]. Известно, что уменьшение размеров кристаллов до нанометрового масштаба вызывает изменение свойств на границе раздела [2]. Поэтому всестороннее изучение электронного строения $CoSi_2$ имеет фундаментальное значение.

Дисилицид кобальта представляет собой металл, который принадлежит к кубической сингонии, имеет пространственную группу симметрии 225_Fm3m, элементарную ГЦК ячейку с параметром a = b = c = 5.356 Å и координатами атомов Si:X/a = Y/b = Z/c = 1/4 и Co:X/a = Y/b = Z/c = 0, которая содержит 4 формульных единицы [3].

В данной работе расчет электронного строения дисилицида кобальта $CoSi_2$ проводился полнопотенциальным методом присоединенных плоских волн с локальными орбиталями (FP-APW + lo) и обменно-корреляционным функционалом в приближении обобщенной градиентной аппроксимации (PBE-GGA), который позволяет получить надежный результат при вычислении электронного строения кристаллов с металлическим типом проводимости.

На рисунке 1 приведена зонная структура $CoSi_2$ как для спина вверх, так и для спина вниз, которые представлены одним рисунком, поскольку $CoSi_2$ имеет нулевой магнитный момент и не является магнитным материалом.

© Потуданский Г. П., Курганский С. И., 2022

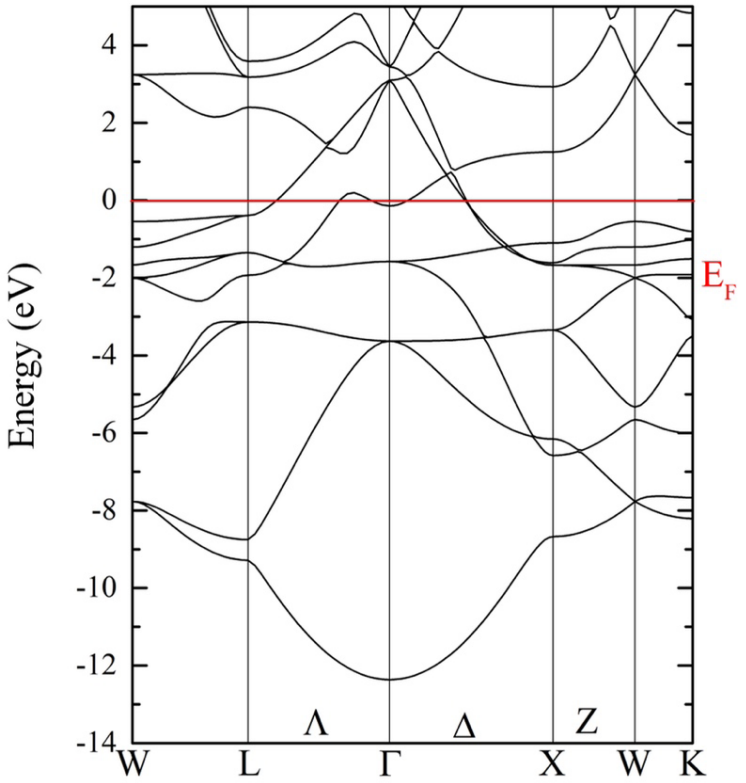


Рис. 1. Зонная структура $CoSi_2$. Уровень Ферми принят за начало отсчета энергии

На рисунке 2 приведены спектры полной и парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС), полученные на основе зонного расчета для основного состояния $CoSi_2$. Анализ парциальных ПЭС показывает, что основной вклад в формирование валентной зоны дают *d*-состояния кобальта и *s*-, *p*-состояния кремния.

Материалы, полученные в данной работе, могут быть использованы для анализа электронного строения структур на основе кобальта и кремния [4].

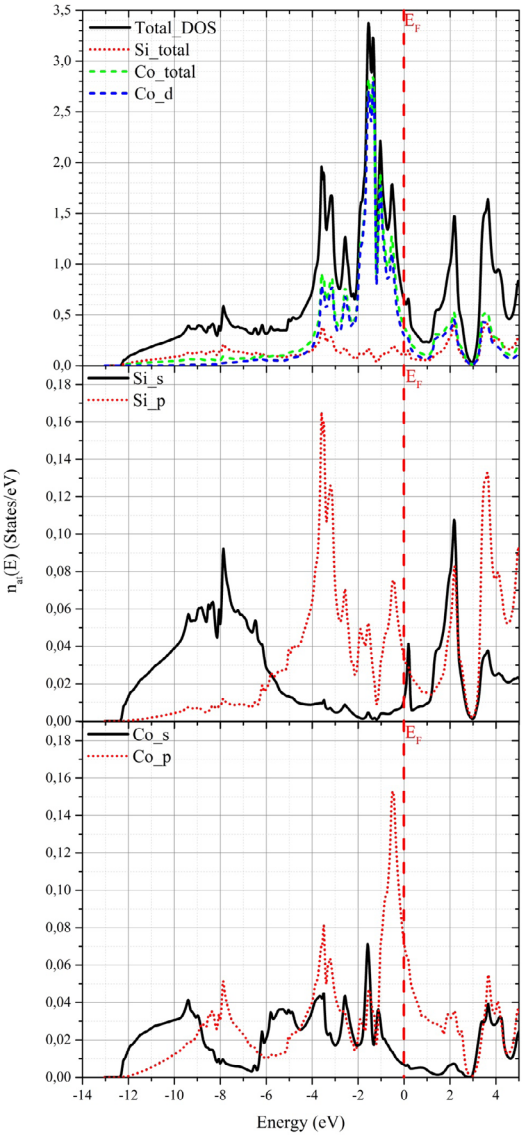


Рис. 2. Полная и парциальные ПЭС $CoSi_2$. Уровень Ферми принят за начало отсчета энергии

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский, Журнал физической химии, **2014**, 88, 1523.

2. J. Kalt, M. Sternik, B. Krause, I. Sergueev, M. Mikolasek, D. Bessas, O. Sikora, T. Vitova, J. Göttlicher, R. Steininger, P. T. Jochym, A. Ptok, O. Leupold, H. — C. Wille, A. I. Chumakov, P. Piekarz, K. Parlinski, T. Baumbach, S. Stankov, Physical *Review B.*, **2020**, 101, 165406.

3. $CoSi_2$ Crystal Structure. — Текст: электронный // SpringerMaterials: сайт. — URL: https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0452326 (дата обращения: 04.08.2022)

4. G. P. Potudanskii, S. I. Kurganskii, E. P. Domashevskaya, Materials Research Express, **2019**, 6, 1150g9.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ОСАЖДЕНИЯ ЦИННАРИЗИНА В ПОРИСТЫЙ КРЕМНИЙ

В. А. Гулей, А. С. Леньшин, Ю. А. Полковникова

ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
тел: +7 (951) 551-22-41, эл. почта: guley.valentina@mail.ru

Разработка контейнеров для адресной доставки лекарств в настоящее время одна из главных задач данной научной области. Ввиду своей биосовместимости и технологичности, перспективной основой для данной системы доставки являются наночастицы на основе оксида кремния и пористого кремния. В лечении последствий цереброваскулярных заболеваний, когнитивных и астенических расстройств, ассоциированных с COVID-19, наиболее перспективно использование нейрометаболических препаратов с нейропротективными и нейротрофическими свойствами. Представляет большой интерес опыт использования нейропротективного и нейротрофического препарата Циннаризин у пациентов с неврологическими расстройствами в постковидном периоде [1].

Целью данной работы является изучение особенностей осаждения циннаризина на поверхность пористого кремния.

В экспериментальных исследованиях в качестве активной фармацевтической субстанции использовали 1-(дифенилметил)-4-(3-фенил-2-пропенил) пиперазин-циннаризин. С целью изучения процесса сорбции цин-

© Гулей В. А., Леньшин А. С., Полковникова Ю. А., 2022

наризина на поверхности, пластины пористого кремния погружали в раствор этилового спирта с концентрацией циннаризина 2 грамма на 100 мл. Пластины выдерживали в течение 60 минут.

Особенности сорбции исследовали методом ИК-спектроскопии. Сравнительный анализ ИК-спектров образцов исходного пористого кремния и образцов после осаждения циннаризина показывает присутствие циннаризина на поверхности пористого кремния, что проявляется в виде появления дополнительных выраженных особенностей спектра в области 1200—1750 $см^{-1}$, в том числе соответствующих циннаризину пиков поглощения в области при 1647 (C = C), 1453 $см^{-1}$. Положение особенностей ИК-спектров для осаждаемых лекарственных препаратов определялось с использованием базы данных AIST: Spectral Database for Organic Compounds, SDBS [2]. Для получения более точной информации о составе, использовали метод Рамановской спектроскопии. Рамановский спектр porSi содержит один высокоинтенсивный симметричный максимум около 520 $см^{-1}$, соотносимый с LO фононной модой кремния, а также максимумы на 301(LA) и 935(2TO) $см^{-1}$. При сравнении полученного образца с эталонным спектром циннаризина (Spectrabase)[3] установлено, что после осаждения циннаризина в пористый кремний на спектре появились новые пики, соответствующие пикам циннаризина на 2920 $см^{-1}$, 2940 $см^{-1}$, 1453 $см^{-1}$, 1340 $см^{-1}$, 1075 $см^{-1}$, 851 $см^{-1}$, 480 $см^{-1}$. Оптические свойства образцов изучались в диапазоне 190—900 нм методом УФ спектроскопии с использованием методики съемки на отражение, позволяющей получать информацию от тонких слоев, сформированных на оптически более плотных подложках. Мы перестроили спектры пропускания-отражения в спектры поглощения с учетом формулы Ламберта — Бугера. По данным УФ-спектроскопии определили возможные прямые переходы. Для porSi с осажденным циннаризином — 1.4 эВ, 1.8 эВ, 2.4 эВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Способ получения фармацевтической композиции, содержащей циннаризин / *Сорокоумова М. В.*, *Щербакова Л. И.* заявл.12.09.16; опубл. 28.07.2020. — Бюл. № 22. — 5 с.
2. https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
3. https://spectrabase.com

ЗАВИСИМОСТЬ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ОТ ПОКАЗАТЕЛЯ ПОРИСТОСТИ

Я. А. Пешков, А. С. Леньшин

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: tangar77@mail.ru, тел.: +7 (960) 102-86-31

Благодарности: *работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007. Часть работы выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. № FZGU-2020-0036 в рамках Государственного Задания Вузам.*

Пористый кремний представляет собой сложный многофазовый материал, состав и функциональные свойства которого сильно зависят от его пористости [1]. Самым известным свойством пористого кремния, которое отличает его от кристаллического объемного кремния, является его фотолюминесценция в видимом диапазоне. В пористом кремнии известны несколько возможных механизмов возникновения фотолюминесценции. Основным является квантово-размерный эффект, который обычно проявляется в виде яркой люминесценции с пиком в области 600—700 nm. Кроме того, возможно проявление люминесцентных свойств пористого кремния в области 500—600 nm, обусловленных центрами излучательной рекомбинации, которые образуются в дефектном оксиде, покрывающем поверхность пористого кремния. В данной работе мы провели исследование особенностей фотолюминесцентных свойств пористого кремния различной пористости. Варьирование пористости образцов производилось изменением плотности тока электрохимического анодирования.

Пористость контролировали методом рентгеновской рефлектометрии по методике, описанной в работе [2]. Фотолюминесцентные свойства регистрировались при возбуждении источником с длиной волны 405 нм. Исследование показало, что образцы пористого кремния с пористостью менее 30 % демонстрируют преимущественно люминесценцию характерную для дефектного оксида SiOx. В то же время для образцов с пористостью более 30 % наблюдается яркая фотолюминесценция, соответствующая квантово-размерному эффекту для нанокристаллов диаметром

© Пешков Я. А., Леньшин А. С., 2022

порядка 3 nm (в области длин волн 650 nm). При этом, чем больше пористость образца, тем выше у него интенсивность фотолюминесценции. Полученные результаты можно объяснить следующим образом: при увеличении пористости кремния происходит разделение поверхности на люминесцирующие нанокристаллы. При этом, чем больше пористость, тем больше нанокристаллов в поверхностном слое, тем выше интенсивность люминесценции. Полученные результаты и выводы хорошо согласуются с известными представлениями о природе люминесценции пористого кремния, описанными выше. Следует отметить, обычно считается, что пористый кремний начинает проявлять заметные люминесцентные свойства при пористости больше 50 %. Согласно нашему исследованию показатель пористости, при которой пористый кремний начинает проявлять яркие люминесцентные свойства — от 30 % и выше.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Canham, *Handbook of Porous Silicon* (Springer, CH., 2014), p. 733.

2. A. S. Lenshin, Ya.A. Peshkov, M. V. Grechkina, S. V. Kannykin, Yu.A. Yurakov, J. Phys.: Conf. Ser., **1984**, 012018 (2021).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВ АДДУКТОВ YB(III)

С. В. Москалец, А. В. Шурыгин, В. В. Короченцев
Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
e-mail: sammozg890chp@yandex.ru, тел.: +7 (908) 458-26-43

Одной из важных проблем химии и фотохимии комплексов лантаноидов островного и полимерного строения является выявление механизма связи электронной структуры с их свето-трансформирующими и фотохимическими свойствами, а также определение физико-химических свойств [1, 2]. Решение данной задачи для комплексов лантаноида Yb(III) осуществлялось путем синтеза аддуктов с последующим экспериментом (ФЭС). Интерпретация экспериментальных данных проводилась хорошо зарекомендовавшим себя методом теории функционала плотности DFT (программный комплекс FireFly 8.2.0). Сочетание экспериментального метода

© Москалец С. В., Шурыгин А. В., Короченцев В. В., 2022

и теоретических методов квантовой химии представляет собой мощный и надежный инструмент для анализа электронной структуры химических соединений.

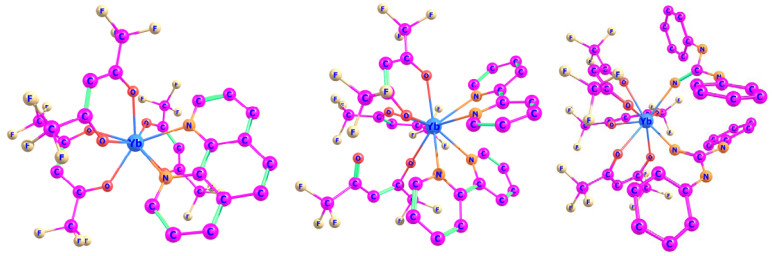


Рис. 1. Расчетная структура исследуемых аддуктов

Были синтезированы аддукты Yb(Hfac)3(Phen), Yb(Hfac)3(Dipy)2, Yb(Hfac)3(DphGu)2, для каждого из которых получены экспериментальные РФЭ и оптические спектры поглощения, возбуждения, люминесценции. Проведенное квантово-химическое моделирование позволило интерпретировать экспериментальные данные, проанализировать электронную структуру, выявить зависимость замещения лигандного окружения на структуру возбужденных состояний, определить тип связи ион-лиганд. Проведено моделирование возбужденных состояний и интерпретированы экспериментальные оптические спектры. В перспективе проведение полного цикла исследований аддуктов дибензоилметанатов Yb(III) с фенильными и фосфорными лигандами.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. V. Shurygin, V. I. Vovna, V. V. Korochentsev, A. G. Mirochnik, I. V. Kalinovskaya, V. I. Sergienko Optical properties and electronic structure of Eu(III) complexes with HMPA and TPPO // Spectrochimica Acta — Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. — 2021, — V. 250, 119397

2. А. В. Шурыгин, В. И. Вовна, В. В. Короченцев, А. Г. Мирочник, В. И. Сергиенко Электронная структура аддуктов Eu(III) с OP(C6H5)3 и OP[NMe2]3 // ЖСХ, т. 60, № 12, 2019, стр.2010

МОДЕЛИРОВАНИЕ L_3-КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ГЕМИОКСИДА МЕДИ

В. Р. Радина, С. И. Курганский
ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: viminova@inbox.ru, тел.: +7 (900) 944-13-47

Благодарности: *исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.*

Сфера применения гемиоксида меди Cu_2O включает в себя преобразование солнечной энергии, оптоэлектронику, производство газовых датчиков, катализаторов, тонкопленочных транзисторов. В связи с этим, важно знать электронное строение этого материала. В данной работе представлены результаты теоретического исследования XANES (X-ray absorption near edge structure) L_3-спектров Cu в сравнении с экспериментальными данными [1]. Соединение Cu_2O имеет кубическую сингонию кристаллической решетки и относится к пространственной группе Pn3 [2]. В этом оксиде атомы кислорода находятся в тетраэдрическом окружении из атомов меди.

Расчет электронной структуры исследуемых кристаллов проводился в рамках теории функционала плотности полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [3] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии и приближения остовной дырки [4]. В данной работе XANES спектры оксида меди Cu_2O для сравнения были рассчитаны в трех вариантах:

- Элементарная ячейка, атом содержит половину остовной дырки
- Суперъячейка, атом содержит половину остовной дырки
- Суперъячейка, атом содержит остовную дырку

Как теоретические, так и экспериментальный спектры имеют главный максимум при энергии 935 эВ и незначительный рост интенсивности при больших энергиях. В данном случае хороший результат виден в расчете, который выполнен в элементарной ячейке с половиной остовной дырки. Однако спектр, рассчитанный в суперъячейке с половиной остовной дырки по форме и положению особенностей наилучшим образом согласуется с экспериментальным спектром [1].

© Радина В. Р., Курганский С. И., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Wang, S. Lany, J. Ghanbaja, Y. Fagot-Revurat, Y. P. Chen, F. Soldera, D. Horwat, F. Mücklich, J. F. Pierson, Phys. Rev. B, **2016**, 94, 245418.
2. M. Heinemann, B. Eifert, C. Heiliger, Phys. Rev. B, **2013**, 87, 11511.
3. K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen, Comput. Phys. Commun., **2002**, 147, 71.
4. M. D. Manyakin, S. I. Kurganskii, O. I. Dubrovskii, O. A. Chuvenkova, E. P. Domashevskaya, S. V. Ryabtsev, R. Ovsyannikov, E. V. Parinova, V. Sivakov, S. Yu. Turishchev, Materials Science in Semiconductor Processing, **2019**, 99, 28.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТОНКИХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК НА ИЗОЛИРУЮЩИХ ПОДЛОЖКАХ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СКОРОСТИ НАБОРА ДОЗЫ ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ АРГОНА

Т. С. Картапова, Ф. З. Гильмутдинов, М. А. Еремина
Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск, Россия

Благодарности: *работа выполнена в рамках в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (№ гос. регистрации 121030100002-0)0*

В данной работе тонкие углеродные пленки напылялись на поверхность стекла методом магнетронного распыления углеродной мишени в среде рабочего газа Ar^+. Затем углеродные пленки подвергались имплантации ионов аргона в импульсно-периодическом режиме. В процессе варьировалась скорость набора дозы имплантации ионов. Толщины и топографии пленок были оценены методом атомно-силовой микроскопии. По результатам на уровне ошибки измерения на исходной пленке значения толщины коррелируют с расчетными данными при напылении. Поверхностно-чувствительными методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света изуче-

© Картапова Т. С., Гильмутдинов Ф. З., Еремина М. А., 2022

ны их химический состав и особенности атомной структуры. Измерено электросопротивление углеродных пленок в зависимости от скорости набора дозы имплантации. Показано, что ионно-лучевая обработка может быть направленно использована для формирования углеродных пленок и покрытий с заданными свойствами.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ НА РАСЩЕПЛЕНИЕ 1S-УРОВНЯ ФТОРА

И. С. Осьмушко, В. И. Немтинов
«ДВФУ», Владивосток, Россия
e-mail: nemtinov.vi@students.dvfu.ru, тел.: +7 (984) 180-83-48

Водородная связь играет заметную роль в физико-химических процессах, особенно при наличии атомов кислорода и азота. Справочные данные по длине водородной связи F…H в полимере $(HF)_n$ указывают на значения 1,4 ангстрема при длине химической связи F-H — 0,92 ангстрема. Однако в работе [1] была установлена обратно пропорциональная зависимость длин связей F-H и F…H. Что не позволяет говорить об определенных универсальных значениях длин водородных связей. По-видимому, они могут сильно отличаться для разных случаев. Поэтому мы провели ряд расчетов для разных длин водородной связи на модельных соединениях C(H) F2-CF2-CF2-C(H)F2 и C(H3)-C(H2)-O-C(H2)-C(H2)-O-C(H2)-C(H3). Установление точного геометрического строения полимеров или их частей в экспериментальном образце не было целью исследования. Целью явилась оценка влияния водородной связи на энергии уровней F1s и сопоставление с экспериментальными данным РФЭС.

Экспериментальные данные, полученные в ИХ ДВО РАН для конденсированного состояния «политетрафторэтилена на полиэтиленгликоле», оцененные по расщеплению линии F1s, указывают на значение около 1 эВ. Расчетные значения нельзя однозначно сравнивать с экспериментальным результатом по ряду причин. Это разные соединения, расчет одной молекулы против конденсированного состояния экспериментального образца, различные геометрические и поверхностные эффекты. В ходе проведения расчетов было установлено, что наличие водородной связи приводит к однозначному и заметному расщеплению уровней F1s, для различных длин F…H. Длины водородной связи выбирались в диапазоне 1,40—2,20 Å с шагом 0,2 Å, что перекрывает диапазон значений, представленных в исследованиях разных авторов. Таким образом, по наличию явного расщепления спектра 1s-уровня атомов фтора при проведении РФЭС можно судить о наличии водородных связей в веществе.

© Осьмушко И. С., Немтинов В. И., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. Соотношение между длинами связей в водородных мостиках n — H…N, O — H…O, F — H…F И Cl — H…Cl. Е. Г. Тараканова, Г. В. Юхневич. ЖСХ. 2009. Т. 50, № 6. С. 1063—1069.

FDTD-МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА В КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУРАХ

П. А. Макаров, Д. В. Сивков, Р. Н. Скандаков, В. Н. Сивков
ФМИ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: makarovpa@ipm.komisc.ru, тел.: +7 (8212) 39-14-61

Исследование электродинамических свойств композитных сред (включая стохастические и неупорядоченные системы) и функциональных материалов на их основе в рентгеновском диапазоне является актуальной проблемой, как в фундаментальной науке, так и в прикладных исследованиях и инженерных приложениях [1—6]. Существуют специфические задачи физики конденсированного состояния, радиофизики, электроники, биофизики и других областей, в которых эта проблема играет важную роль. В связи с этим важно совершенствование методов, позволяющих анализировать процесс распространения электромагнитных волн (и особенно импульсов ультакоротких длительностей) в конкретных стохастических многофазных композитах. В то же время разработка этих методов еще далеко не завершена. Например, существует не так много исследований с подробным описанием применимых для анализа распространения электромагнитных сигналов рентгеновского диапазона в конечных неупорядоченных неоднородных композитах, образованных гетерогенными фазами.

© Макаров П. А., Сивков Д. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н., 2022

В рамках данного исследования был разработан алгоритм моделирования прохождения электромагнитных волн через стохастические многофазные композитные среды методом FDTD [7—8]. Данный алгоритм был использован для численного моделирования распространения различных типов волн в композитных средах без учета потерь. В ходе моделирования показано, что ультракороткие импульсы синусоидальной формы могут быть успешно использованы для определения типа распределения неоднородностей по толщине материала. Эта информация может быть получена путем анализа разности сигналов, отраженных от среды при распространении падающей волны во взаимно противоположных направлениях.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кляцкин В. И. УФН,* **2004,** 174.
2. *Скипетров С. Е.*, *Меглинский И. В. ЖЭТФ*. **1998,** 113:4.
3. *Прохоров А. М.* и др. *УФН,* **1974,** 114.
4. *Кравцов Ю.*А, *Саичев А. И. УФН,* **1982,** 137.
5. *Кузьмин В. Л.*, *Романов В. П. УФН,* **1996,** 166.
6. *Тучин В. В. УФН,* **1997,** 167.
7. *Yee K. IEEE Trans. on Ant. and Prop.,* **1966**. 14:3.
8. *Makarov P.* et al. *IEEE Magn. Let.,* **2022,** 13:2101305.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ В ANO_2 (AN = TH — CF)

А. Е. Путков[1, 2], Ю. А. Тетерин[1, 2], М. В. Рыжков[3], К. И. Маслаков[1], А. Ю. Тетерин[2], К. Е. Иванов[2], С. Н. Калмыков[1], В. Г. Петров[1]

[1]*МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

[3]*«ИХТТ УрО РАН», Екатеринбург, Россия*

e-mail: andrei.putkov@mail.ru, тел.: +7 (915) 486-83-16

Благодарности: *работа поддержана грантом РФФИ № 20-03-00333.*

На основе анализа результатов расчетов электронного строения релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ), частично полученных ранее для AnO_2 (An = Th, U — Am) [1–5], показано, что в AnO_2 (An = Th — Cf) в диапазоне энергий связи электронов 0 — ~50 эВ возникают внешние валентные (ВМО) и внутренние валентные молекулярные орбитали (ВВМО). Найдено, что An 5f-, 6p- и O 2s-электроны непосредственно участвуют в химической связи во всех этих диоксидах. При этом, состав ВМО с участием An 6d, 7s и 7p АО мало изменяется в рассматриваемом ряду. Эти орбитали вместе с O 2s и O 2p АО образуют «жесткий каркас», в котором перемещаются МО, содержащие вклады An 5f АО.

Найдено, что спектрах РФЭС для ряда AnO_2 (An = Th – Cf) относительная интенсивность ВМО растет. Это, в основном, обусловлено увеличением плотности состояний An 5f-электронов в этом ряду. В спектрах РФЭС рассматриваемых AnO_2 в диапазоне энергий связи электронов от ~0 до ~15 эВ наблюдается структура, обусловленная электронами ВМО, а в диапазоне от ~15 до ~50 эВ — электронами ВВМО.

На основании результатов расчетов электронных конфигураций ионов An в AnO_2 найдено, что в рассматриваемом ряду диоксидов эффективный заряд An существенно меньше +4, принимаемом в ионном приближении, что свидетельствует о высоком вкладе ковалентной составляющей в химической связи в данных соединениях.

Из анализа результатов расчетов заселенностей связей по Малликену найдено, что в ряду AnO_2 (An = Th – Cf) в совокупности электроны ВВМО ослабляют ковалентную составляющую химической связи, обусловленную электронами ВМО на ~30 %.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Teterin A. Yu.*, *Ryzhkov M. V.*, *Teterin Y. A.*, *Vukcevic L.*, *Terekhov V. A.*, *Maslakov K. I.*, *Ivanov K. E.* // *Nuclear Technology and Radiation Protection.* 2008. V. 23. № 2. P. 34 — 42.

2. *Maslakov K. I.*, Teterin Yu.A., *Ryzhkov M. V.*, *Popel A. J.*, *Teterin A.* Yu., *Ivanov K. E.*, Kalmykov St.N., *Petrov V. G.*, *Farnan I.* // *International Journal of Quantum Chemistry*. 2019. V. 119, № 24. P. e26040.

3. Teterin Yu.A., *Teterin A.* Yu., *Ivanov K. E.*, *Ryzhkov M. V.*, *Maslakov K. I.*, Kalmykov St.N., *Petrov V. G.*, *Enina D. A.* // *Physical Review B.* 2014. V. 89. P. 035102.

4. Teterin Yu.A., *Maslakov K. I.*, *Teterin A.* Yu., *Ivanov K. E.*, *Ryzhkov M. V.*, *Petrov V. G.*, *Enina D. A.*, Kalmykov St.N. // *Physical Review B.* 2013. V. 87. P. 245108.

5. *Teterin Y. A.*, *Maslakov K. I.*, *Ryzhkov M. V.*, *Teterin A. Y.*, *Ivanov K. E.*, *Kalmykov S. N.*, *Petrov V. G.* // *Nuclear Technology and Radiation Protection.* 2015. V. 30. № 2. P. 83 — 98.

© Путков А. Е., Тетерин Ю. А., Рыжков М. В., Маслаков К. И., Тетерин А. Ю., Иванов К. Е., Калмыков С. Н., Петров В. Г., 2022

ОТРАЖЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО ОГРАНИЧЕННОГО СИНХРОТРОННОГО ПУЧКА ЭКСТРЕМАЛЬНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ МНОГОСЛОЙНОГО ЗЕРКАЛА

Д. М. Мальков
Физико-математический институт
ФИЦ Коми научного центра УрО РАН

Многослойные зеркала для отражения экстремального ультрафиолетового (ЭУФ) излучения используются в EUV литографии [1] и в астрономии [2]. При расчетах отражения ЭУФ излучения от многослойных структур используются одномерные укороченные уравнения дифракции, рекуррентные соотношения, метод характеристической матрицы и подходы, разработанные в рентгеновской кристаллооптике. Сравнение результатов, полученных с помощью вышеперечисленных методов, показано в работе [3]. Все эти подходы относятся к одномерной рентгеновской дифракции, при этом предполагается, что падающее излучение является плоской волной, которая неограниченна в пространстве. Однако в экспериментальных измерениях коэффициента отражения падающий пучок синхротронного излучения всегда ограничен наличием щелей и коллиматоров. Влияние размера падающего пучка ЭУФ излучения на коэффициент отражения от многослойных зеркал не исследовано.

В работе предлагается новый подход для расчетов отражения ЭУФ излучения от многослойных структур. В отличие от предыдущих теоретических рассмотрений, этот подход базируются на двумерных уравнениях дифракции [4, 5], позволяющих исследовать коэффициенты отражения пространственно ограниченных пучков ЭУФ излучения от многослойных зеркал методом картографирования в обратном пространстве [6]. Рассмотрены граничные условия дифракционной задачи для геометрической оптики и приближения Френеля. Показаны расчеты профилей коэффициентов отражения от Mo/Si зеркала для пучков разных размеров.

Для анализа дефектов многослойной структуры используются карты углового распределения ЭУФ диффузного рассеяния в обратном пространстве [7]. Однако на угловое распределение полной интенсивности рассеяния влияет когерентная (зеркальная) составляющая, учет которой возможен только с использованием разработанного подхода.

© Мальков Д. М., 2022

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chkhalo N. I.* et al. High-reflection Mo/Be/Si multilayers for EUV lithography // Optics Letters — 2017- V42. — P. 5070.

2. *Bogachev S. A.* et al. Advanced materials for multilayer mirrors for extreme ultraviolet solar astronomy // Applied Optics — 2016 — P. 2126.

3. *Kozhevnikov I. V.*, *Vinogradov A. V.* Multilayer X-ray mirrors // Journal of Russian Laser Research –1995 — V.16. — P. 343.

4. *Punegov V. I.* et al. Applications of dynamical theory of X-ray diffraction by perfect crystals to reciprocal space mapping// J. Appl. Cryst. — 2017 — V.50. — P. 1256.

5. *Punegov V. I.*, *Karpov A. V.* X-ray microbeam diffraction in a crystal //Acta Cryst. A. — 2021- V. 77. — P. 117.

6. *Пунегов В. И.* Высокоразрешающая рентгеновская дифракция в кристаллических структурах с квантовыми точками // УФН — 2015. — Т. 185. — С. 449.

7. *Haase A.* et al. Interface morphology of Mo/Si multilayer systems with varying Mo layer thickness studied by EUV diffuse scattering // Optics express — 2017 — V. 25. — P. 15441.

ОТРАБОТКА МЕТОДИК СИНТЕЗА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ С ЦЕЛЬЮ УСТАНОВЛЕНИЯ СКОРОСТИ ОСАЖДЕНИЯ

А. А. Петков[1], **Р. Г. Валеев**[2]
[1]*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*
[2]*УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия*
e-mail: mister.petkov2016@yandex.ru, тел.: +7 (904) 833-36-26

Благодарности: *исследования проводились на оборудовании ЦКП «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН в рамках проекта Минобрнауки России по договору № 075-15-2021-1351.*

Тонкие пленки, полученные нанесением в вакууме, широко используются в различных технических приложениях. Они характеризуются высоким качеством и отличной воспроизводимостью по электрофизическим параметрам полупроводниковых приборов и интегральных микросхем.

© Петков А. А., Валеев Р. Г., 2022

Применение вакуумных методов связно с проблемами технологического оборудования. В настоящее время часто используются разнообразные плазменные технологические устройства, в особенности в промышленности. Большинство из них предназначено для обработки узкого круга изделий и не всегда позволяет добиться требуемых результатов из-за недостатком конструкции или недостаточности сведений о протекании в них физических процессов.

В данной работе проводились исследования по осаждению тонких пленок железа, которые нашли и могут найти применение в различных областях технологии, таких как электрокатализ, получение магнитных структур и др.

Полученные тонкие пленки железа, нанесенные на предметные стекла, были отправлены на метод атомно-силовой микроскопии (АСМ) с целью установления толщины получившихся образцов. Результаты анализа данных, полученных с помощью АСМ, представлены в таблице:

Время осаждения, мин	Толщина пленки, нм
2	30,38 ± 0,92
$2_{повт}$	31,32 ± 1,33
4	62,28 ± 1,92
6	85,97 ± 5,43
8	101,8 ± 1,7
10	134,3 ± 3,0

Говоря о цели работы, взяв отношение толщины пленки к времени осаждения, получаем следующие результаты скорости осаждения пленок на основе железа:

1. $\vartheta_1 = 15,19 \frac{нм}{мин}$.
2. $\vartheta_2 = 15,57 \frac{нм}{мин}$.
3. $\vartheta_3 = 14,33 \frac{нм}{мин}$.
4. $\vartheta_4 = 12,73 \frac{нм}{мин}$.
5. $\vartheta_5 = 13,43 \frac{нм}{мин}$.

Следовательно, средняя скорость будет $\langle\vartheta\rangle = (14,25 \pm 2,23) \frac{нм}{мин}$.

Заслуживает быть отмеченным факт правильно подобранных параметров для проведения синтеза пленок, что доказывает равномерность скорости осаждения железа на подложки, позволяющий заявить о полноте решения поставленных задач и достаточной эффективности примененных методик.

IN SITU РОСТ НАНОЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ ВНУТРИ МИКРОФЛЮИДНОГО ЧИПА ПОД КОНТРОЛЕМ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Добровольская[1], **С. В. Чапек**[1], **О. А. Усольцев**[1], **Е. Р. Наранов**[2], **Д. Н. Горбунов**[2], **А. Л. Тригуб**[3], **А. В. Солдатов**[1], **А. Л. Бугаев**[1]
[1]*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*
[2]*Институт нефтехимического синтеза имени А. В. Топчиева, Москва, Россия*
[3]*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
arinadobro.volya@gmail.com

Благодарности: *работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 075-15-2021-1363.*

Биметаллические наночастицы находят различные применения в различных областях, включая катализаторы. В частности, катализаторы на основе золота и палладия являются перспективными материалами для превращения метана в метанол, что имеет большое народнохозяйственное значение. Несколько исследований показывают, что фотостимуляция биметаллических катализаторов в этой реакции улучшит эту технологию, что значительно снизит стоимость реакции и повысит экономическую целесообразность этого процесса. Поэтому рациональная оптимизация структуры и свойств наночастиц путем варьирования параметров синтетической процедуры является важной фундаментальной и практической задачей.

© Добровольская А. В., Чапек С. В., Усольцев О. А., Наранов Е. Р., Горбунов Д. Н., Тригуб А. Л., Солдатов А. В., Бугаев А. Л., 2022

XRD, UV—Vis, TEM, XPS, SEM и XAS являются одними из наиболее часто используемых аналитических методов для характеристики структуры биметаллических наночастиц. Для наночастиц Pd и AuPd, которые не обладают сильным плазмонным резонансом, как частицы чистого золота, рентгеновские методы, такие как рентгеновская абсорбционная спектроскопия (XAS) и рентгеновская дифракция (XRD), могут иметь преимущество перед оптическими. Однако малые объемы образцов, низкая концентрация наночастиц и трудности применения в режиме in situ не позволяют использовать их для онлайн-оптимизации параметров синтеза.

Мы разработали микрофлюидное устройство для in situ синтеза наночастиц под контролем синхротронного излучения, которое было успешно испытано путем мониторинга роста наночастиц палладия в толуоле из предшественника ацетата Pd (II) с помощью in situ XAS. Микрофлюидное устройство было напечатано на 3D-принтере Ultimaker, материал чипа — PETG. Размеры чипа 97 × 85 × 5 мм с двумя входами и одним выходом. Микрочип разделен на зону смесителя общим объемом 0,75 мл и реакционную зону с 10 микроканалами длиной 80 мм и сечением 1,5 × 1,5 мм^2. Рентгеновский пучок выравнивался по каждому каналу. Оптимизированная длина микроканалов позволила собирать высококачественные данные как в областях XANES, так и в областях EXAFS даже при низкой концентрации металла в растворе, а также преобразовывать данные с пространственным разрешением во временную эволюцию Pd(II) - > Pd(0) преобразование. Насколько нам известно, это первый случай исследования методом in situ XAS роста наночастиц палладия внутри микрочипа и первый экспериментальный отчет по выравниванию луча не перпендикулярно, а параллельно каналам, что открывает новые возможности для онлайн-контроля. оптимизация параметров синтеза.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hofmann, G.; Tofighi, G.; Rinke, G.; Baier, S.; Ewinger, A.; Urban, A.; Wenka, A.; Heideker, S.; Jahn, A.; Dittmeyer, R., et al., A microfluidic device for the investigation of rapid gold nanoparticle formation in continuous turbulent flow. *J. Phys. Conf. Ser.* **2016,** *712*. https://doi.org/10.1088/1742—6596/712/1/012072

2. Chaussavoine, I.; Beauvois, A.; Mateo, T.; Vasireddi, R.; Douri, N.; Priam, J.; Liatimi, Y.; Lefrancois, S.; Tabuteau, H.; Davranche, M., et al., The microfluidic laboratory at Synchrotron SOLEIL. *J. Synchrotron Radiat.* **2020,** *27* (Pt 1), 230—237. https://doi.org/10.1107/S1600577519015042

3. Oyanagi, H.; Sun, Z. H.; Jiang, Y.; Uehara, M.; Nakamura, H.; Yamashita, K.; Zhang, L.; Lee, C.; Fukano, A.; Maeda, H., In situ XAFS experiments using a microfluidic cell: application to initial growth of CdSe nanocrystals. *J. Synchrotron Radiat.* **2011,** *18* (Pt 2), 272—9. https://doi.org/10.1107/S0909049510050545

4. Probst, J.; Borca, C. N.; Newton, M. A.; van Bokhoven, J.; Huthwelker, T.; Stavrakis, S.; deMello, A., In situ X-ray absorption spectroscopy and droplet-based microfluidics: An analysis of calcium carbonate precipitation. *ACS Measurement Science Au* **2021,** *1* (1), 27—34. https://doi.org/10.1021/acsmeasuresciau.1c00005

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АДДУКТОВ ТЕНОИЛТРИФТОРАЦЕТОНАТА ER И YB

А. В. Шурыгин, В. В. Короченцев, В. И. Вовна
ФГАОУ ВО «ДВФУ», Владивосток, Россия
e-mail: shurygin.av@dvfu.ru, +7 (994) 009-98-81

Аддукты лантанидов являются уникальными фотофизическими материалами, свойства которых активно изучаются экспериментальными и теоретическими методами. Ключевым свойством аддуктов лантаноидов является люминесценция — лиганды, выступая в качестве антенн, поглощают световую энергию, затем в результате внутримолекулярного переноса, передают ее на резонансные уровни иона лантанида, вызывая люминесценцию [1].

Получены результаты исследования электронной структуры двух аддуктов с формулой $Ln(tta)_3(TPPO)_2$, где в качестве атомов лантаноидов (Ln) выступают Er и Yb. Выбор нейтрального лиганда трифенилфосфиноксид (TPPO) обусловлен его высокой областью поглощения и способностью изолировать комплекс от молекул воды, которые вызывают тушение люминесценции. Использование теноилтрифторацетона (tta) в качестве основных β-дикетонатных лигандов в комплексах лантаноидов представляет интерес из-за возможности увеличения интенсивности люминесценции за счет высокого показателя переноса энергии, связанный с «антенным эффектом».

Установлено, что лигандное окружение в виде трех теноилтрифторацетона и двух трифенилфосфиноксидов демонстрируют высокую поглощающую способность в широкой области спектра, граничащей с ИК-областью (рис. 1). Такая конфигурация лигандов обеспечивает высокую фотостабильность и возможность растворимости в воде. Показано, что

© Шурыгин А. В., Короченцев В. В., Вовна В. И., 2022

соединения обладают отличающимися оптическими характеристиками, это связано со структурой возбужденных состояний уровней Er^{3+} и Yb^{3+} и вероятностью переноса энергии с лигандов.

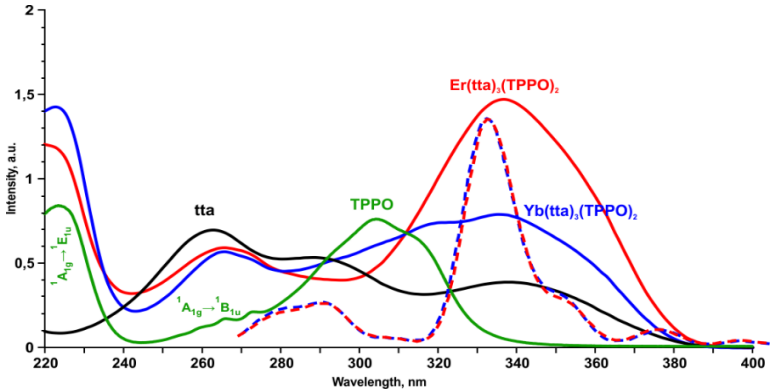


Рис. 1. Экспериментальный спектр поглощения аддуктов и их лигандов, пунктирной линией показа модельный спектр

ЛИТЕРАТУРА

1. A. V. Shurygin, V. I. Vovna, V. V. Korochentsev, A. G. Mirochnik, I. V. Kalinovskaya, V. I. Sergienko Optical properties and electronic structure of Eu(III) complexes with HMPA and TPPO // Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. — 2021, — V. 250, N. 119397

NEXAFS ИССЛЕДОВАНИЯ КОСТЕЙ РЫБ И МЛЕКОПИТАЮЩИХ

О. В. Петрова, К. А. Бакина, Д. В. Сивков, С. В. Некипелов, Р. Н. Скандаков, В. Н. Сивков
«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», Сыктывкар, Россия
e-mail: teiou@mail.ru, тел.: +7 (909) 122-52-01

Благодарности: *работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-3796.2021.1.2.*

© Петрова О. В., Бакина К. А., Сивков Д. В., Некипелов С. В., Скандаков Р. Н., Сивков В. Н., 2022

Исследование химического состава и нанокристаллической структуры композиционных биологических материалов, в состав которых входят как органические, так и неорганичесие элементы имеет важное прикладное значение, а также представляет большой интерес с эволюционной точки зрения. К таким материалам, относятся кости и другие минерализованные образования живых организмов разных классов, в том числе рассматриваемые в данной работе кости рыб и млекопитающих.

Кость представляет собой композиционный материал, со сложной иерархически организованной архитектурой, характеризующийся высоким содержанием минерализованной компоненты — биоапатита и наличием органической составляющей, преимущественно (90 %) в виде коллагена. В костной ткани млекопитающих и большинства видов рыб биоапатит представлен в виде гидроксиапатита $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ и его замещенных форм [1]. Нанокристаллическая структура кости может быть представлена в виде трехмерной сверхрешетки, в которой отдельные конгломераты, образующие минеральный матрикс рассматриваются как система нанокристаллитов биоапатита, разделенных гидратными слоями ненасыщенных растворов ионов фосфата и кальция. В результате теоретических и экспериментальных исследований была показана взаимосвязь между электронной структурой биоапатита, входящего в состав минерального матрикса кости и линейными размерами его отдельных нанокристаллитов [2, 3].

При этом уменьшение размеров нанокристаллитов $\boldsymbol{L}$, с учетом гидратной прослойки толщиной $\boldsymbol{d}$ между ними, приводит к сдвигу плотности свободных 3d-состояний в сторону меньших энергий (красный сдвиг), при переходе от монокристаллического гидроксиапатита к нанокристаллическому биоапатиту. Данный сдвиг может быть зафиксирован экспериментально в спектрах NEXAFS в области C2p-краев поглощения, которые формируются при переходе электрона с 2p занятого на 3d-свободные состояния. Согласно теоретическим расчетам, величина красного сдвига $\boldsymbol{\delta E3d}$ в области NEXAFS Ca2p спектров нанокристаллического биоапатита, по сравнению с монокристаллическим гидроксиапатитом будет равна: $\boldsymbol{\delta E3d = E3d \cdot d/L}$, где $\boldsymbol{E3d}$ — энергия свободного 3d-состояния, отсчитываемая от дна зоны проводимости и равная $\boldsymbol{E3d \approx 2\ eV}$ [2]. Экспериментальное определение величины красного сдвига позволяет оценить размер кристаллитов для костей разного вида.

В данной работе на примере костей рыб (кости челюсти Ледяная рыба) и млекопитающих (позвоночник кита), путем анализа Ca2p NEXAFS спектров проводиться определение величины красного сдвига при пере-

ходе от биоапатита к твердотельному гидроксиапатиту и оценка размера кристаллитов биоапатита.

Исследования методом NEXAFS-спектроскопии осуществлялись с использованием синхротронного излучения Русско-немецкого канала выхода и монохроматизации излучения синхротронного центра BESSY-II (г. Берлин, Германия).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Elliott J. C.* Structure and chemistry of the apatites and other calcium orthophosphates. Elsevier Science **1994**, P. 404

2. *Pavlychev A. A.*, *Avrunin A. S.*, *Vinogradov A. S.* et al. *Nanotechnology.*, **2016**. 27: 504002.

3. *Petrova O. V.*, *Nekipelov S. V.*, *Sivkov D. V.*et al. *Journal of Physics: Conf. Series* **2017**, 917:042001.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

И. В. Ершов, А. А. Лаврентьев
«Донской государственный технический университет»,
Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: iershov@donstu.ru, тел.: +7 (863) 238-13-05

С момента открытия и до настоящего времени, графен по-прежнему представляет большой интерес благодаря своим уникальным механическим, электронным, тепловым и оптическим свойствам, при этом, увеличивается роль графена в таких прикладных областях, как биомедицина, композитные материалы, сенсоры и системы накопления энергии [1]. В последнее время отмечается большой интерес к таким низкоразмерным структурам, как квантовые точки на основе графена благодаря их уникальным оптическим свойствам и перспективам применения в оптоэлектронике и фотовольтаике [2]. Углеродные квантовые в отличие от полупроводниковых обладают низкой токсичностью и отличной биосовместимостью, сочетая при этом низкую стоимость синтеза. На сегодняшний день существует достаточно большое число исследований посвященных синтезу углеродных и графеновых квантовых точек различными методами, среди них выделяют химические методы снизу-вверх и физические по принципу сверху-вниз. Достаточно перспективным среди физических методов является использование импульсного лазерного излучения для синтеза углеродных квантовых точек, при этом не требуется использования сильных кислот и токсичных соединений.

В настоящей работе были получены углеродные наночастицы с использованием импульсной лазерной абляции углеродных лент на основе графитового порошка и их состав был изучен с использованием рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. На основе анализа 1s-спектров углерода и кислорода был установлен состав и количество функциональных групп, присоединенных к углеродным наночастицам. В дальнейшем были построены модели квантовых точек различного размера на основе графена, рассчитана их равновесная структура с использованием методов теории функционала плотности и проведено моделирование методом молекулярной динамики при комнатной температуре. Для построенных моделей был рассчитан электронный энергетический спектр и электронный спектр поглощения с использованием нестационарной теории функционала плотности с возмущением (TDDFPT).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Geim A. K. Science*, **2009**, 324:1530

2. Shamsipur M, Barati A, and *Karami S. Carbon*, **2017**, 124:429

© Ершов И. В., Лаврентьев А. А., 2022

ИССЛЕДОВАНИЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ КЛЕТОЧНОЙ КУЛЬТУРЫ ESCHERICHIA COLI, КАК ИСТОЧНИКА ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР

Е. А. Беликов[1], **С. С. Антипов**[1, 2], **Е. В. Паринова**[1], **Д. А. Коюда**[1], **А. К. Пелагина**[1], **О. А. Чувенкова**[1], **С. Ю. Требунских**[1], **В. Сиваков**[4], **Р. Г. Чумаков**[3], **А. М. Лебедев**[3], **С. Ю. Турищев**[1]

[1]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

[2]*Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия*

[3]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

[4]*Лейбниц институт фотонных технологий, Йена, Германия*

bp4nth3r@mail.ru

Благодарности: *работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 19-72-20180 и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351 в части методических вопросов синхротронных исследований.*

Одним из важных направлений в современной науке и технике является изучение и дальнейшее применение гибридных нанообъектов. Использование такого рода материалов может стать основой в разработке и создании экономически выгодных и энерго-эффективных устройств. В области электроники для улучшения функциональных характеристик все чаще используются гибридные материалы. Бактериальные культуры Escherichia coli и получаемый из них в процессе синтеза белок DPS является уникальным, по своим свойствам, наноразмерным объектом, включающим в себя органическую оболочку и внутреннюю полость, в которой формируется железосодержащее ядро, (~3—6 нм) состоящее из ионов Fe3+, представляющее широкий практический и научный интерес. Получение информации об исходной бактерии, ее морфологических особенностях, а именно поверхности мембраны клеточной культуры Escherichia coli, также крайне востребовано. Более того, важным является и получение данных о ее атомном и электронном строении. Удобным инструментом для выполнения задач по получению информации о морфологических особенностях является сканирующая электронная микроскопия (Scanning Electron Microscopy — SEM). Немаловажным является также получение информации о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении клеточной культуры, а также мембраны, для этого могут быть использованы рентгеноэлектронные методы, а именно рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS — X-ray photoelectron spectroscopy), которая обладает высокой чувствительностью к локальному окружению атомов заданного сорта. Также важным является применение метода фотоэмиссионной электронной микроскопии (PhotoEmission Electron Microscopy — PEEM), который сочетает два таких подхода, позволяющих получать «точечную» информацию не только об атомном и электронном строении, а также и о морфологии малых объектов, в том числе клеток, что особенно актуально в данной работе.

Были проведены исследования физико-химического состояния клеток E.coli K12 MG1665 синхротронными и лабораторными методами PEEM и XPS при контроле методом SEM. При этом SEM исследования были проведены до и после измерений XPS и PEEM. Исходные пробы осаждались на чистые подложки кремния или титана и хранились в лабораторных условиях. Измерения XPS проводились в том числе при AlKa возбуждении (1486.61 эВ), в ходе контрольных измерений SEM использовалось ускоряющее напряжение от 2,5 до 20 кВ. Получение изображений методом PEEM производилось при излучении ртутной лампы ~5 эВ.

Проведенные исследования SEM показали распределение клеток по подложке, были получены изображения поверхности с высоким разрешением отдельных клеток E.coli. При проведении экспериментов XPS не было выявлено каких-либо загрязнений поверхности, продемонстрировано наличие всех характерных компонентов осажденной культуры, показано присутствие железа в различных состояниях, как в объеме, так и на поверхности клетки. Данные, полученные в результате применения метода PEEM, подтвердили возможность эффективного получения изображений биообъектов: массива клеток E.coli. Полученные данные PEEM хорошо соотносятся с данными для белков Dps, полученными ранее синхротронными методами рентгеноэлектронной спектроскопии. Исследования SEM, проведенные после спектромикроскопических исследований, продемонстрировали лишь частичную деградацию мембраны бактерии.

© Беликов Е. А., Антипов С. С., Паринова Е. В., Коюда Д. А., Пелагина А. К., Чувенкова О. А., Требунских С. Ю., В. Сиваков, Чумаков Р. Г., Лебедев А. М., Турищев С. Ю., 2022

Научное издание

ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ: ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Сборник тезисов
II Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 12—17 сентября 2022 г.)

Издание публикуется в авторской редакции

Подписано в печать 07.09.2022. Формат 60×84/16
Усл. печ. л. 7,32. Тираж 100 экз. Заказ 160

ООО Издательско-полиграфический центр «Научная книга»
394018, г. Воронеж, ул. Никитинская, 38, оф. 308
Тел.: +7 (473) 200-81-02, 229-77-33
http://www.n-kniga.ru E-mail: zakaz@n-kniga.ru

Отпечатано в типографии ООО ИПЦ «Научная книга»
394026, г. Воронеж, Московский пр-т, 11/5
Тел.: +7 (473) 229-32-87
http://www.n-kniga.ru E-mail: typ@n-kniga.ru