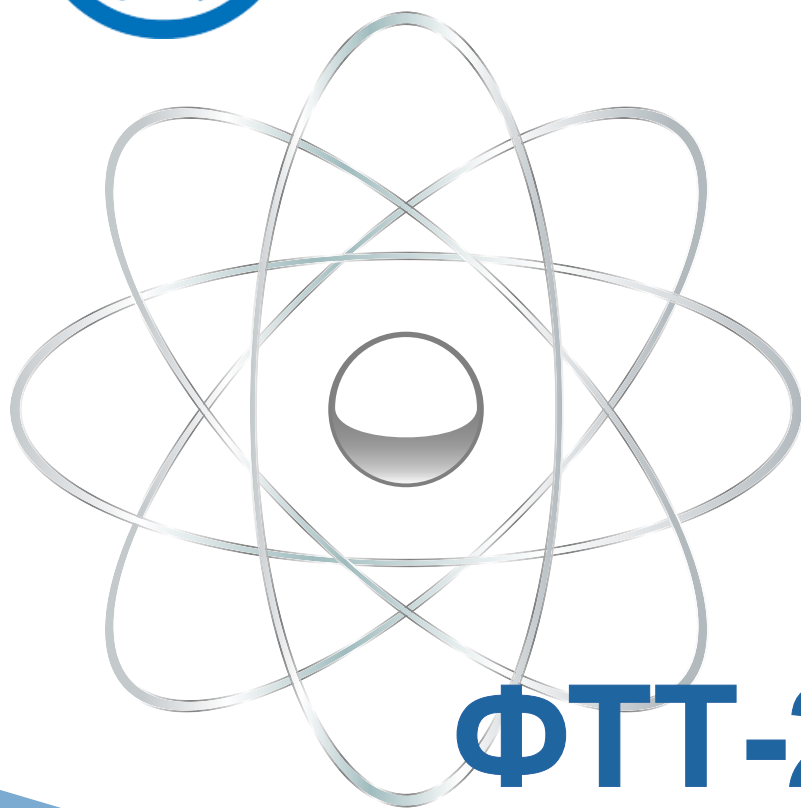




Сборник материалов  
XVIII Российской  
научной студенческой  
конференции  
по физике твердого тела



**ФТТ-2022**



**ТОМСК**

28 – 31 марта 2022 г.



Национальный  
исследовательский  
Томский  
государственный  
университет



ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПРОЧНОСТИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



ИНСТИТУТ  
СИЛЬНОТОЧНОЙ  
ЭЛЕКТРОНИКИ  
СО РАН



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ИМ. А.В. РЖАНОВА**  
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Национальный исследовательский  
Томский государственный университет»

## **СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ**

XVIII Российской научной студенческой конференции  
«Физика твёрдого тела»  
(ФТТ-2022)

28 – 31 марта 2022 года  
Томск, Россия

Томск – 2022

## ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

- Национальный исследовательский Томский государственный университет
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
- Институт сильноточной электроники СО РАН
- Институт физики полупроводников СО РАН

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

д-р физ.-мат. наук, Брудный В.Н.;  
д-р физ.-мат. наук, Мейснер Л.Л.;  
д-р физ.-мат. наук, Литовченко И.Ю.;  
д-р физ.-мат. наук, Дмитриев А.И.;  
д-р физ.-мат. наук, Курзина И.А.;  
д-р физ.-мат. наук, Дитенберг И.А.;  
д-р физ.-мат. наук, Эрвье Ю.Ю.;  
д-р физ.-мат. наук, Ивонин И.В.;  
д-р физ.-мат. наук, Шилько Е.В.;  
д-р физ.-мат. наук, Чайковская Т.В.;  
канд. физ.-мат. наук, Филимонов С.Н.;  
канд. физ.-мат. наук, Рыжих Ю.Н.;  
канд. физ.-мат. наук, Новиков В.А.;  
канд. физ.-мат. наук, Марченко Е.С.;  
канд. физ.-мат. наук, Корчуганов А.В.;  
канд. физ.-мат. наук, Козулин А.А.;  
канд. физ.-мат. наук, Бобровникова И.А.

ассистент, Смирнов И.В.;  
аспирант, Сараева А.А.;  
аспирант, Янушоните Э.И.;  
аспирант, Гарин А.С.;  
аспирант, Тохметова А.Б.;  
аспирант, Осипов Д.А.;  
аспирант, Ветрова А.В.;  
студент, Ковалёва М.А.;  
студент, Сапежинская Т.А.;  
студент, Курлевская И.Д.;  
студент, Асанова Г.Т.;  
студент, Турушева В.В.;  
студент, Курчин К.Н.;  
студент, Ишков А.Д.;  
студент, Морозов А.В.;  
студент, Франко О.Н.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Алмаев Д.А.</b> Исследования электропроводящих свойств оксида хрома со структурой корунда.....	6
<b>Астапов Д.О., Гуртова Д.Ю., Реунова К.А.</b> Изучение микроструктуры, фазового состава и механических свойств высокоэнтропийного сплава FeMnCrNiCo, легированного атомами азота.....	9
<b>Валихов В.Д., Ахмадиева А.А., Мирошкина В.Д.</b> Влияние базальта на структуру и механические свойства сплава A7.....	11
<b>Васильева Л.А.</b> Исследование распределения напряженности поля в структурах арсенида галлия, легированного хромом, в зависимости от степени легирования....	13
<b>Верхолетов М.Г.</b> Влияние напряжения на время переключения фотоэлектрического ключа HGPCSS на основе GaAs, легированного глубокими центрами.....	16
<b>Винарский В.П.</b> Моделирование эпитаксиального формирования двумерных материалов с учётом зависимости десорбционного члена от толщины.....	18
<b>Выродова А.В.</b> Влияние атомов замещения в малых концентрациях на твердорастворное и деформационное упрочнение [001] - монокристаллов системы COCRFENI.....	21
<b>Вязовская А.Ю.</b> Особенности поверхностной электронной структуры интерметаллидов на основе редкоземельных и благородных металлов, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием.....	24
<b>Гарин А.С., Дубовиков К.М., Шишелова А.А.</b> Влияние морфологии порошков на структуру и фазовый состав спеченных пористых сплавов на основе TiNi.....	26
<b>Гуртова Д.Ю., Астапов Д.О., Панченко М.Ю.</b> Особенности водородного охрупчивания высокоэнтропийных сплавов системы FeMnCrNiCo(N).....	28
<b>Дьяченко Ф.А., Атовуллаева А.А.</b> Влияние структуры на физико-механические свойства поверхностных Ti-Ni-Nb сплавов, синтезированных на TiNi-подложке электронно-пучковым способом.....	30
<b>Жердева М.В.</b> STRAIN GLASS превращения в сплавах с эффектом памяти формы.....	32
<b>Ишков А.Д.</b> Модель поверхностной сегрегации примеси при легировании в системах молекулярно-лучевой эпитаксии.....	35
<b>Кахидзе Н.И., Синкина И.Л., Селиховкин М.А.</b> Синтез лигатуры Al-Eg и ее влияние на структуру и физико-механические свойства сплава AMg5.....	38
<b>Ким А.В.</b> Структурные изменения в реакторной аустенитной стали ЭК-164 в результате высокотемпературных термомеханических обработок.....	40
<b>Кукенов О.И., Дирко В.В.</b> Особенности осцилляций интенсивности дифракционных картин при эпитаксии Si/Si (100) и Ge/Si (100).....	42

<b>Курдюков Р.В.</b> Модель встраивания атомов в излом при росте полупроводниковых соединений $A_xB_{1-x}D$ из четверного раствора.....	45
<b>Курлевская И.Д., Тохметова А.Б.</b> Влияние старения в мартенсите под нагрузкой на проявления двустороннего эффекта памяти формы и ферроэластичности в гетерофазных монокристаллах сплава $Ni_{48}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$ .....	48
<b>Курчин К.Н.</b> Численное моделирование полупроводниковых устройств на основе пентацена.....	51
<b>Линник В.В.</b> Влияние режимов обработки на карбидную подсистему ферритно-мартенситной стали ЭП-823.....	54
<b>Лобань В.В.</b> Механические свойства и деформационное поведение TiNi проволок субмиллиметровых диаметров с поверхностным Ti-Ni-Ta сплавом.....	57
<b>Мамазакиров О.</b> Исследование проницаемости модифицированного никелида титана, полученного методом диффузионного спекания.....	59
<b>Насырбаев А.</b> Влияние зарядного напряжения на нанесение покрытий кубического карбида вольфрама на медные подложки плазмодинамическим методом.....	61
<b>Осипов Д.А., Толстихин В.И.</b> Влияние термической обработки на структурно-фазовое состояние и микротвердость прекурсора порошковой смеси W-Ta-Mo-Nb-Zr-Cr-Ti после энергонапряженной механической активации.....	63
<b>Петраков В.А.</b> Моделирование структуры висмута методом функционала плотности.....	65
<b>Петров Е.К.</b> Влияние эффекта Яна-Теллера на зонную структуру на магнитную и зонную структуру хром-содержащих магнитных топологических изоляторов.....	68
<b>Плетнев А.Д., Дьяченко Ф.А.</b> Структура и фазовый состав поверхностных слоев TiNi сплава, модифицированных в результате высокодозной имплантации пучками ионов титана.....	71
<b>Попова А.С.</b> Определение ширины запрещенной зоны беспримесных алмазов.....	73
<b>Сараева А.А.</b> Особенности механического поведения высокоэнтальпийных сплавов в высокопрочном состоянии.....	75
<b>Сушков А.А., Андрианов А.И.</b> метод эпитаксии Ge для интеграции соединений III-V с подложками кремний на изоляторе.....	78
<b>Тохметова А.Б., Курлевская И.Д.</b> Условия проведения старения в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой вдоль [110] – ориентации в однофазных монокристаллах ферромагнитного сплава $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ .....	80
<b>Фаткуллин И.Д., Ефтифеева А.С.</b> Оксидный поверхностный слой и его влияние на функциональные свойства в монокристаллах сплава $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$ .....	83
<b>Янушоните Э.И.</b> Влияние термомеханических обработок на циклическую стабильность функциональных свойств и эластокалорический эффект в монокристаллах сплава $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ .....	86

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ХРОМА  
СО СТРУКТУРОЙ КОРУНДА

Д.А. Алмаев

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.В. Алмаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: almaev001@mail.ru

Корундообразный ( $a = 0.4958$  нм,  $c = 1.3594$  нм) оксид хрома  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  представляет собой металлооксидный полупроводник  $p$ -типа проводимости, который является одним из самых твердых материалов среди всех оксидов [1, 2, 3]. Значения ширины запрещенной зоны изменяются в пределах от 2.9 эВ до 3.4 эВ [1, 2, 3]. Данная работа посвящена исследованию электропроводящих свойств тонких пленок  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  и ведется в рамках исследования электрофизических свойств гетероструктур на основе корундообразных оксидов галлия и хрома. Также следует отметить малое количество литературы об электрофизических свойствах  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ .

Тонкие пленки  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  толщиной 150 нм были получены методом ВЧ магнетронного распыления мишени хрома (99.95 %) в кислородно-аргоновой плазме. Напыление пленок проходило в течение 45 минут в установке Edwards A-500 при комнатной температуре на сапфировых подложках  $c$ -plane (0001). Рабочее давление и мощность установки составляли 7 мкбар и 70 Вт, соответственно. Расстояние между подложкой и мишенью – 70 мм. После напыления пленки делили на 2 кусочка и отжигали в воздухе при температуре отжига  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  и  $900^\circ\text{C}$  в течение  $t_{\text{ann}} = 180$  минут.

Для электрофизических измерений на поверхности тонких пленок  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  через маску методом вакуумного напыления были сформированы Ti/Pt и Pt контакты. Данные измерения проводились при помощи микрозондовой установки фирмы Nextron и источника-измерителя Keithley 2636A. Процесс измерений был автоматизирован при помощи программы, разработанной в среде Lab View. Измерительная камера Nextron позволяет проводить измерения в диапазоне температур  $T$  от комнатной до  $750^\circ\text{C}$  с точностью  $\pm 0.1^\circ\text{C}$ . Погрешность измерений для Keithley 2636A составляет 0.03 %.

Перед исследованием электропроводящих свойств оксида хрома был проведен рентгенодифракционный анализ, из которого определили, что пленки  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  на сапфировой подложке соответствуют  $\alpha$ -фазе с ориентацией (0001).

Измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) тонких пленок  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ , отожженных в воздухе при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  и  $900^\circ\text{C}$ , проводили в диапазоне напряжений  $U = 0 - 200$  В при  $T = 25 - 400^\circ\text{C}$ . В качестве контактов были использованы Pt и Ti/Pt. Работа выхода электрона  $\chi$  для  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  составляет  $4.8 \pm 0.2$  эВ [4]. Работа выхода  $\chi_M$  металлов Pt и Ti составляет 5.12 – 5.93 эВ и 4.14 – 4.50 эВ, соответственно [5]. Для того, чтобы между полупроводником и металлом существовал омический контакт, необходимо, чтобы разность  $\chi$  и  $\chi_M$  была минимальна. В связи с этим ожидалось, что контакты Pt и Ti к  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  будут омическими.

Из анализа ВАХ (рис. 1) следует, что контакт Ti/Pt к  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  является омическим,  $J \sim U$ . Тот же контакт к  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$  является омическим только при  $T > 50^\circ\text{C}$ . Контакт Pt к тонким пленкам  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ , отожженным при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$ , проявляет омичность при  $T > 200^\circ\text{C}$ . А для Pt/ $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ , отожженных при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$ , ВАХ являются нелинейными во всем интервале исследуемых температур. Плотность тока  $J \sim U^m$ , где  $m$  – показатель степени. Значения  $m$  для пленок  $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$  с Pt

контактами изменяются в интервале от  $1.43 \pm 0.01$  до  $1.0157 \pm 0.0007$  с повышением  $T$  от комнатной до  $400^\circ\text{C}$ . Также следует отметить, что значения  $J$  изменяются в зависимости от  $T_{\text{ann}}$ . Для структур Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  значения  $J$  на 1-3 порядка величины больше, чем при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$ , а для Ti/Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – на 2-5 порядков величины. Это может быть связано с тем, что при повышении  $T_{\text{ann}}$  увеличиваются размеры зерен [6]. При увеличении размеров зерен плотность центров адсорбции для кислорода снижается, и сопротивление пленки растет.

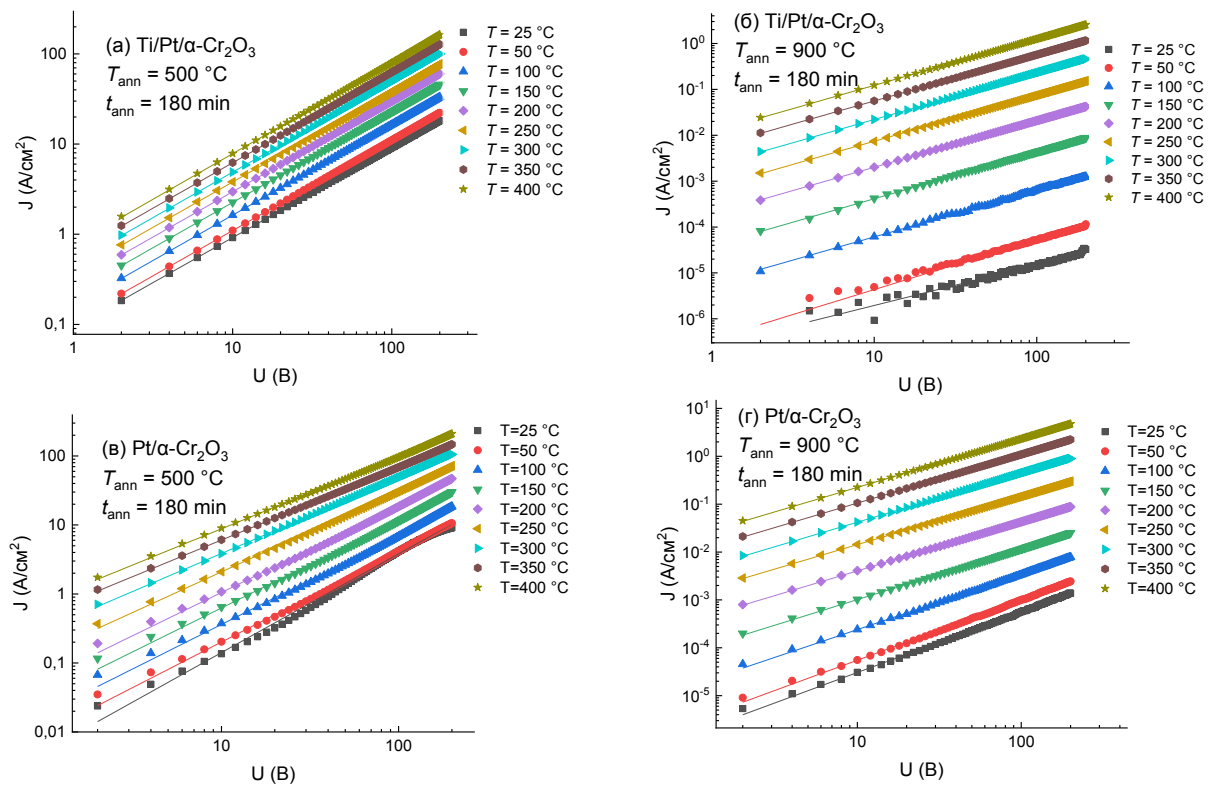


Рис. 1. ВАХ структур Ti/Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  (а),  $900^\circ\text{C}$  (б) и Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при  $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$  (в),  $900^\circ\text{C}$  (г)

Для пленок  $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характерны прыжковый, зонный и поляронный механизмы проводимости [3, 7, 8], но в работе [7] сообщили, что прыжковый механизм возможен только при низких значениях  $T$ . Таким образом, был рассмотрен зонный и поляронный механизмы проводимости, которым соответствуют зависимости в координатах  $\ln(\rho)$  от  $10^3/T$  и  $\ln(\rho/T)$  от  $10^3/T$  (рис. 2), где  $\rho$  – удельное сопротивление. Значения  $\rho$  определили из анализа ВАХ структуры Ti/Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В ходе анализа данных зависимостей были определены значения энергии активации проводимости  $\Delta E$  и энергия активации прыжка носителей заряда  $W$ , соответственно.  $\Delta E_{500^\circ\text{C}} = 0.099 \pm 0.005$  эВ;  $\Delta E_{900^\circ\text{C}} = 0.530 \pm 0.007$  эВ;  $W_{500^\circ\text{C}} = 0.136 \pm 0.006$  эВ;  $W_{900^\circ\text{C}} = 0.567 \pm 0.008$  эВ, где индекс снизу указывает на температуру отжига пленок. Экспериментально полученные значения  $\Delta E$  и  $W$  соответствуют значениям, представленным в работах [3,7,9].

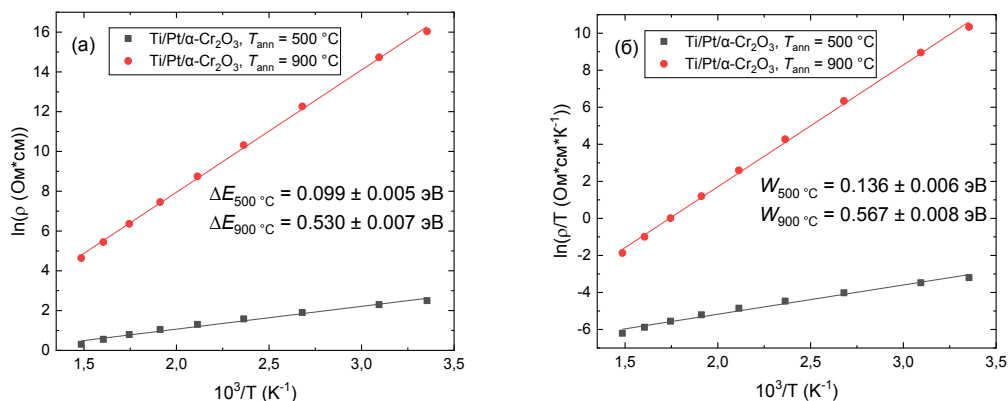


Рис. 2. Температурные зависимости удельного сопротивления структур Ti/Pt/ $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в координатах  $\ln(\rho)$  от  $10^3/T$  (а) и  $\ln(\rho/T)$  от  $10^3/T$  (б)

В результате исследований было показано, что тонкие пленки оксида хрома, полученные методом ВЧ магнетронного распыления, являются монокристаллическими и имеют ориентацию (0001). Контакт Ti/Pt к  $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> является омическим, а Pt контакт к  $\alpha$ -Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> проявляет омичность только при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$  и  $T > 200^\circ\text{C}$ . Также были экспериментально оценены значения  $\Delta E$  и  $W$ , которые согласуются с литературными данными [3,7,9], но выбрать механизм проводимости не удалось, так как все полученные в ходе эксперимента кривые точно аппроксимируются в предложенных координатах.

#### Литература

1. Алмаев А.В., Кушнарев Б.О., Черников Е.В., Новиков В.А. Синтез и газовая чувствительность тонких пленок оксида хрома // Письма в ЖТФ. – 2020. – Т. 46. – №. 20. – С. 35–37.
2. Fan Z., Zhu M., Pan S., Ge J., Hu L. Giant photoresponse enhancement in Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films by Ni doping-induced insulator-to-semiconductor transition // Ceramics International. – 2021. – P. 125202-1–125202-10.
3. Farrell L., Fleischer K., Caffrey D., Mullarkey D., Norton E., Shvets I. Conducting mechanism in the epitaxial p-type transparent conducting oxide Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: Mg. // Physical review. – 2015. – P. 13655–13659.
4. Wilde M., Beauport I. Adsorption of potassium on Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) at ionic and metallic coverages and uv-laser-induced desorption // Physical review. – 2015. – V. 59. – No. 20. – P. 13402–13412.
5. Lide D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics. – 2005. – 2661 p.
6. Almaev A.V., Kushnarev B.O., Chernikov E.V., Novikov V. A., Korusenko P. M., Nesov S.N. Structural, electrical and gas-sensitive properties of Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thin films // Superlattices and Microstructures. – 2021. – No. 151. – P. 1–12.
7. Cheng C., Gomi H., Sakata H. Electrical and Optical Properties of Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Films Prepared by Chemical Vapour Deposition // Department of Applied Chemistry. – 1996. – P. 417–425.
8. Uekawa N., Kaneko K. Dopant Reduction in p-Type Oxide Films upon Oxygen Absorption // Advance ACS Abstracts. – 1996. – P. 4193–4198.
9. Julkarnain MD., Hossain J., Sharif K.S., Khan K.A. Temperature effect on the electrical properties of chromium oxide (Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) thin films // Journal of optoelectronics and advanced materials. – 2011. – V. 13. – No. 5. – P. 485–490.



**ИЗУЧЕНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ, ФАЗОВОГО СОСТАВА И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА FeMnCrNiCo, ЛЕГИРОВАННОГО АТОМАМИ АЗОТА**

Д.О. Астапов<sup>1</sup>, Д.Ю. Гуртова<sup>1</sup>, К.А. Реунова<sup>2</sup>

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н., Е.Г. Астафурова

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

E-mail: denis.0612@mail.ru

В последние годы высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) привлекают все большее внимание исследователей за счет своих уникальных свойств. Впервые они были представлены в работах ученых Йе и Кантора в 2004 году [1, 2]. Такие сплавы были выделены в новый класс многокомпонентных материалов, для которого было характерно отсутствие одного базового компонента: химический состав ВЭСов включает пять и более элементов, находящихся в эквиатомном соотношении или в диапазоне концентрации от 5 до 35 ат. %, и они имеют однофазную структуру [2, 3]. ВЭСы способны формировать твердые растворы на основе ГЦК, ОЦК и ГПУ кристаллических решеток [4]. В настоящее время ведутся активные исследования ВЭСов на основе сплава Кантора FeMnCrNiCo, имеющих ГЦК-кристаллическую решетку. Повышенный интерес к сплавам Кантора со стороны ученых обусловлен их уникальными физико-механическими свойствами, а именно сочетанием высокой прочности и пластичности [5]. Кроме того, было показано, что механизм разрушения изучаемых сплавов является вязким вплоть до криогенных температур испытаний [5]. Предполагается, что формирование твердых растворов внедрения (легирование атомами азота) и вызванная твердорастворным упрочнением модификация микроструктуры позволят получить сплавы со значительным увеличением прочности без существенной потери пластичности.

В настоящем исследовании методами оптической микроскопии (ОМ), рентгеноструктурного анализа (РСА) и одноосного статического растяжения при комнатной температуре испытания были изучены микроструктура, фазовый состав и механические свойства сплава FeMnCrNiCo, легированного атомами азота с концентрацией 1.6 ат. %. Слитки химического состава 20Fe-20Mn-20Cr-20Ni-20Co (ат. %) (ВЭС-0N) и 20.4Fe-20.4Mn-20.3Cr-20.3Ni-17Co-1.6N (ВЭС-1.6N) были выплавлены в вакуумной индуцированной печи в атмосфере аргона. После плавки сплавы не подвергали какой-либо термомеханической обработке.

С использованием РСА было показано, что исследуемые сплавы имеют однофазную аустенитную структуру с ГЦК кристаллической решеткой (рис. 1). Экспериментально показано, что легирование азотом с концентрацией 1.6 ат. % способствует увеличению параметра кристаллической решетки сплава Кантора ( $a$ ): от  $a = 3,592 \text{ \AA}$  в случае исходного сплава ВЭС-0N до  $a = 3,608 \text{ \AA}$  для сплава ВЭС-1.6N. Полученные результаты свидетельствуют о формировании твердого раствора внедрения в аустенитной фазе при легировании сплава Кантора азотом уже в литом состоянии. Методом ОМ было показано, что все исследуемые сплавы характеризуются дендритной микроструктурой (рис. 2). Легирование исходного сплава FeMnCrNiCo атомами азота с концентрацией 1.6 ат. % способствует частичному растворению дендритов, однако полностью исключить микроликвации в сплаве не удастся.

Механические испытания на растяжение показали, что легирование азотом приводит к увеличению предела текучести  $\sigma_{0.2}$  литого сплава FeMnCrNiCo практически в два раза: для ВЭС-1.6N

360 МПа. Также легирование азотом повышает прочностные характеристики сплава Кантора: в случае ВЭС-0N предел прочности  $\sigma_B$  составляет 710 МПа, а после легирования азотом - 1188 МПа.

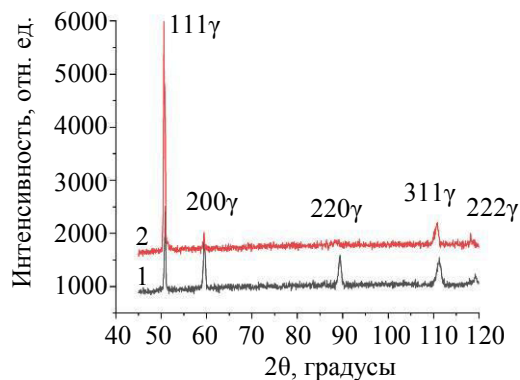


Рис.1 – Рентгенограммы для сплавов: кривая 1 – ВЭС-0N; кривая 2 – ВЭС-1.6N

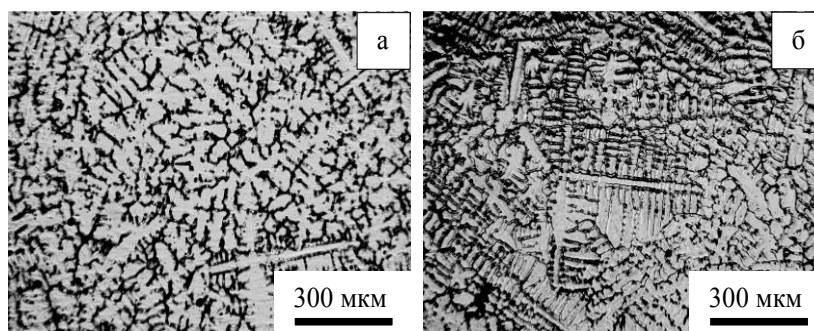


Рис.2 – Металлографические изображения поверхностей образцов: а – ВЭС-0N, б – ВЭС-1.6N

Таким образом, было показано, что исследуемые высокоэнтروпийные сплавы 20Fe-20Mn-20Cr-20Ni-20Co и 20.4Fe-20.4Mn-20.3Cr-20.3Ni-17Co-1.6N обладают однофазной структурой с ГЦК-кристаллической решеткой. Легирование азотом вызывает сильный эффект твердорастворного упрочнения и способствует повышению прочностных характеристик сплава при сохранении высокой пластичности.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00261).

#### Литература

1. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B., Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // Mater. Sci. Eng. – 2004. – № 375–377. – P. 213–218.
2. Yeh J.W., Chen S.K., Lin S.J., et. al., Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes // Advanced Engineering Materials. – 2004. – № 6(5). – P. 299–303.
3. Shun T.T., Yeh J.W., Chen S.K., Lin S.J., Gan J.Y., Chin T.S., et al. Nanostructured high entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes // Advanced Engineering Materials. – 2004. – № 5. – P. 299-303.
4. Chen Y.L., Hu Y.H., Hsieh C.A., et. al., Competition between elements during mechanical alloying in an octonary multi-principal-element alloy system // J. Alloys Compd. – 2009. – № 481. – P. 768–775.
5. Киреева И.В. [и др.] Скольжение и двойникование в монокристаллах высокоэнтропийного сплава // Известия ВУЗов. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 8. – С. 106–113.

**ВЛИЯНИЕ БАЗАЛЬТА НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА А7**

В.Д. Валихов, А.А. Ахмадиева, В.Д. Мирошкина

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Б. Ворожцов

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: valihov.snobls@gmail.com

Алюминиевый сплав А7 используется во многих сферах промышленности: пищевой и автомобильной промышленности, является сырьём для листового проката и проволоки. Распространённость использования технического алюминия марки А7 объясняется его эксплуатационными свойствами: малая плотность, стойкость к коррозии, высокая пластичность по сравнению с другими техническими сплавами. Введение тугоплавких включений (частиц, волокон) позволит повысить прочностные свойства алюминиевого сплава А7: предел прочности, предел текучести, твёрдость, тем самым расширив возможности его применения в промышленности [1–4].

В данном исследовании в качестве матричного материала использовался алюминий марки А7 (Al – 99.7, Fe – 0.16, Si – 0.15, Zn – 0.04, Mn – 0.03, Ga – 0.03, Mg – 0.02, Ti – 0.01, Cu – 0.01). Базальтовые волокна со средней длиной  $45 \pm 5$  мкм и диаметром 4 мкм (рис. 1).

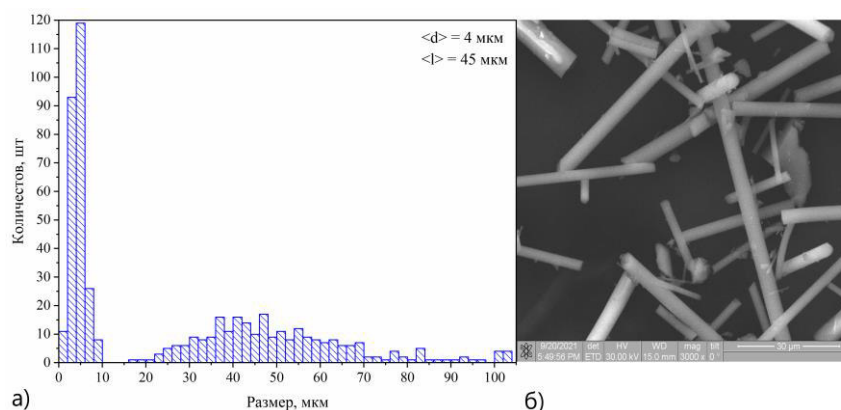


Рис. 1. Базальтовые волокна: а – гистограмма распределения; б – РЭМ-изображение поверхности

Базальт вводился в расплав технического алюминия при температуре 720 °С с одновременным механическим перемешиванием (рис. 3).

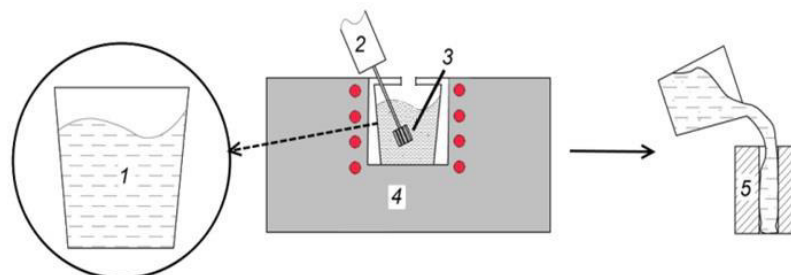


Рис. 3. Схема литья сплавов: 1 – расплав, 2 – механический смеситель, 3 – лигатура, 4 – печь, 5 – кокиль.

# XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

Разливка расплава осуществлялась в стальной кокиль цилиндрической формы. Содержание базальтовых волокон в сплаве составило 10 мас.%. Исходный алюминиевый сплав А7 был получен при аналогичных условиях.

Исследование структуры и распределения волокон по размерам, структуры исходного алюминиевого сплава А7 и с введёнными базальтовыми волокнами производилось с использованием металлографического оптического микроскопа МЕТАМ ЛВ-34 и растрового электронного микроскопа Quanta 200 3D (Томский региональный центр коллективного пользования). Измерения твёрдости проводились на твердомерах Метолаб 703 по методу Бринелля с диаметром индентора 2,5 мм, нагрузкой 31,25 кг и выдержкой 10 секунд.

Микротвёрдость измерялась по методу Виккерса на микротвердомере Метолаб 502 с нагрузкой 50 граммов и выдержкой 10 секунд (Томский региональный центр коллективного пользования). Исследование механических свойств проводилось на универсальной испытательной машине Instron 3369 со скоростью движения подвижной траверсы 0,2 мм/мин. (Томский региональный центр коллективного пользования).

Из гистограммы распределения базальтовых волокон видно, что они имеют бимодальное распределение: средний диаметр волокон равен 4 мкм, а средняя длина  $45 \pm 5$  мкм. Результаты измерения твёрдости по методу Бринелля показали, что введение 10 мас.% базальтовых волокон в алюминиевый сплав А7 позволяет повысить твёрдость с 18 до 21 НВ. Обнаружено, что при введении базальта микротвёрдость алюминиевого сплава А7 увеличилась с 28 до 34 НВ.

В результате проведенных исследований, было выявлено повышение твёрдости по Бринеллю 17% и микротвёрдости по Виккерсу на 22%. Распределение базальтовых волокон по размер имеет бимодальную структуру: средний диаметр равен 4 мкм, а средняя длина равна  $45 \pm 5$  мкм.

Работа проводилась с применением оборудования Томского регионального центра коллективного пользования и при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSWM-2020-0028.

## Литература

1. Tolaminejad B., Dehghani K. Microstructural characterization and mechanical properties of nanostructured AA1070 aluminum after equal channel angular extrusion // *Materials & Design*. – 2012. – V. 34. – P. 285–292.
2. Yilmaz N. F., Öztürk M. Improvement of mechanical properties of AA1070 aluminium by the addition of borax under different holding conditions // *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. – 2012. – V. 43. – №. 12. – P. 1006–1018.
3. Zhiming Y., Jinxu L., Xinya F. Investigation on mechanical properties and failure mechanisms of basalt fiber reinforced aluminum matrix composites under different loading conditions // *Journal of Composite Materials*. – 2018. – V. 52. – №. 14. – P. 1907–1914.
4. Fan C., Ou L., Hu Z.-Y., Yang J.-J., Chen G., Yan H.-G. Microstructures and mechanical properties of BP/7A04 Al matrix composites // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. – 2019. – V. 29. – №. 10. – P. 2027–2034.

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ПОЛЯ В СТРУКТУРАХ  
АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО ХРОМОМ, В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СТЕПЕНИ  
ЛЕГИРОВАНИЯ**

Л.А. Васильева

Научный руководитель: м.н.с. И.И. Колесникова

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: wassil\_93@mail.ru

Полупроводниковые детекторы представляют собой твердотельные ионизационные камеры, в которых чувствительной является область дрейфа неравновесных носителей заряда [1]. Они используются для обнаружения рентгеновского, гамма и другого ионизирующего излучения [2]. В настоящий момент широкое распространение получили детекторы ионизирующего излучения на основе кремния и CdTe. Однако кремний имеет невысокую радиационную стойкость, а процесс выращивания CdTe является дорогостоящим, поэтому одним из наиболее перспективных материалов для изготовления данных детекторов является GaAs:Cr, обладающий более высокой радиационной стойкостью и сравнительно недорогой в изготовлении.

Выбор легирующей примеси обуславливается характеристиками материала, которые необходимы для изготовления детекторов. Добавление хрома увеличивает время жизни носителей заряда и удельное сопротивление материала, кроме этого, хром позволяет уменьшить влияние *EL2*-центров. Легирование GaAs хромом осуществляется методом высокотемпературной диффузии. При этом важно определить оптимальную температуру, при которой будет происходить диффузия, это необходимо для равномерного распределения примеси в объёме полупроводника [1, 3, 4].

Целью данной работы являлось определение качества проведенной диффузии путем проведения исследования распределения профиля напряжённости электрического поля в полупроводниковом детекторе оптическим методом Поккельса. Под эффектом Поккельса понимается изменение двойного лучепреломления вещества из-за смещения собственной частоты во внешнем электрическом поле. Эффект Поккельса может наблюдаться только в кристаллах, не обладающих центром симметрии, т.е. во всех прозрачных кристаллах, кроме кристаллов кубической системы, а также в поляризованных полимерах и стеклах. Важно, чтобы до наложения внешнего электрического поля в кристалле не было двойного лучепреломления.

Экспериментальная установка состояла из источника оптического излучения, поляризатора, полупроводникового образца, источника питания, анализатора, камеры и компьютера (ПК). Более подробно с методикой эксперимента можно ознакомиться в статье A. Cola [5].

К граням образца подводилось напряжение от источника-измерителя Keithly 2410, при этом направление вектора напряженности электрического поля в образце было перпендикулярно падающему оптическому излучению. Излучение источника проходило поляризатор, который находился под углом  $45^{\circ}$ , полупроводниковый образец, анализатор, расположенный под углом  $135^{\circ}$  (работали в скрещенных поляризаторах), и затем поступал на приёмную оптическую систему. Сигнал записывался на видеокамеру и с видеокамеры передавался на ПК, где хранилась и обрабатывалась информация.

При прохождении света через образец возникает явление двойного лучепреломления. Это явление заключается в следующем: луч света (с длиной волны 937 нм), падающий на анизотропный

кристалл, разделяется в нем на два луча: обыкновенный и необыкновенный, распространяющиеся с разными скоростями в различных направлениях [6]. Различие в отклонении обоих лучей показывает, что по отношению к ним кристалл обладает разными показателями преломления. Исследуя явление при различных направлениях преломленных лучей внутри кристалла, можно обнаружить, что один из лучей (обыкновенный) имеет для всех направлений одно и то же значение показателя преломления, а показатель преломления необыкновенного луча зависит от направления [7].

Учитывая направление приложенного электрического поля относительно ориентации кристалла, можно найти интенсивность прошедшего света, которая описывается выражением:

$$I(x, y) = I_0(x, y) \sin^2[\alpha E(x, y)] = I_0(x, y) \sin^2 \left[ \frac{\pi \sqrt{3} n_0^3 r_{41} d}{2\lambda} E(x, y) \right],$$

где  $I_0(x, y)$  – максимальная интенсивность, передаваемая через несмещенный образец с параллельными поляризаторами;  $n_0$  – показатель преломления без воздействия эл. поля;  $r_{41}$  – линейный электрооптический коэффициент;  $d$  – длина оптического пути через кристалл;  $E(x, y)$  – средняя напряженность электрического поля вдоль оптического пути и  $\lambda$  – длина волны падающего света [5].

В ходе работы были рассмотрены три типа образцов: перекомпенсированные, недокомпенсированные и оптимальные. Для определения качества проведенной диффузии на образец подается напряжение. Оптическое излучение, пройдя через поляризатор, приобретает определенную плоскость поляризации, под действием приложенного постоянного внешнего электрического поля плоскость начинает вращаться. Происходит изменение показателя преломления. Достигнув анализатора, оптическое излучение «сообщает» информацию о распределении напряженности в структуре полупроводника. Так как поляризатор и анализатор расположены под углом  $90^0$ , т.е. поляризаторы скрещенные, то идеальное распределение на изображении – серый фон, любые отклонения и дефекты показаны на изображении светлыми пятнами, чем светлее участок, тем поле больше.

Кроме визуальных данных о распределении напряженности поля, данный способ позволяет провести и числовые расчеты распределения напряженности поля в структуре полупроводника. Получить численные значения можно, если обработать полученное изображение в системе компьютерного проектирования Mathcad.

Профиль распределения напряжённости электрического поля, полученный методом Поккельса и обработанный в системе Mathcad показан на рисунке 1. Тут представлены три образца, легирование которых проводилось при разных температурах. В образце на рисунке 1 а видно, что распределение напряженности поля однородное и не зависит от подаваемого на полупроводник напряжения. Это означает, что в данном случае легирование осуществлено равномерно и температура для проведения диффузии выбрана оптимальная. На рисунке 1,б и 1,в распределение напряженности неоднородное в структуре самого полупроводникового образца. При подаче напряжения в 500 вольт неоднородность усиливается, что свидетельствует о неправильно подобранной температуре отжига и неоднородности распределения примеси. Видно, что напряжённость поля изменяется по толщине образца.

При обработке результатов необходимо учитывать погрешности. Общая погрешность складывается из погрешностей приборов, к которым относится тепловой шум камеры и погрешность источника тока. Кроме того, на точность измерения может повлиять настройка поляризатора и анализатора под нужным углом, что не всегда удается сделать идеально, так как подстраивается «на глаз». Еще одним важным фактором, влияющим на точность измерения, является подготовка кристалла к

работе. Для этого нужно минимизировать рассеяние света по краям кристалла, до начала подачи напряжения кристалл не должен выдавать двойного лучепреломления.

Так как метод является сравнительно новым, то проверка полученных результатов проводится путем их сравнения с данными, полученным при снятии вольт-амперной характеристики.

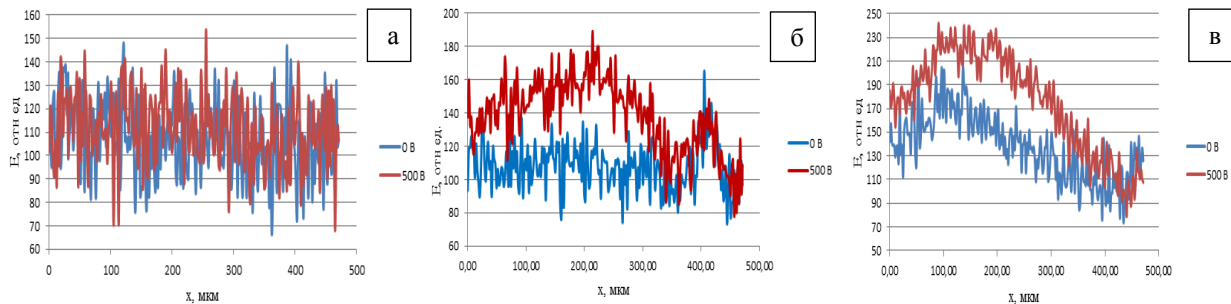


Рис.1. Распределение напряженности поля: а – в оптимальном образце, б – в перекомпенсированном образце, в – в недокомпенсированном образце

Актуальность работы заключается в возможности получения, помимо числовых значений распределения напряженности поля, еще и визуальной характеристики распределения. Кроме того, эта методика информативнее, чем снятие ВАХ сенсора. Используя данную методику, можно определить качество полупроводникового материала, не разрушая его. Наиболее перспективно применение многоэлементных детекторов в системах досмотра грузов в аэропортах и на вокзалах, в ядерной физике и экспериментах в области физики высоких энергий.

### Литература

1. Толбанов О.П. Детекторы ионизирующих излучений на основе компенсированного арсенида галлия // Вестн. ТГУ. – 2005. – № 285. – С. 155 – 163.
2. Michael H. Study of electric field in radiation detectors by Pockels effect: Master thesis.– Prague, 2014. – 93 p.
3. Шаймерденова Л.К. Исследование характеристик арсенида галлия, компенсированного хромом, как материала для сенсоров рентгеновского излучения // Сборник тезисов участников форума "Наука будущего – наука молодых": III Всероссийский научный форум, 12 сентября – 14 сентября 2017 г, г. Нижний Новгород. – М., 2017. – С. 391-393
4. Морозова В.А. О концентрации центров EL2 в монокристаллах GaAs, выращенных из расплавов различного состава // Вестник Московского университета. – 2001. – №3. – С. 66 – 70.
5. Cola A., Farella I. Investigation of the electric field distribution in x-ray detectors by Pockels effect // Journal of Optics A: Pure and Applied optics. – 2006. – No. 8. – P. 467 – 472.
6. Сивухин Д. В. Общий курс физики. – М.: Физматлит, 2013. – 792 с.
7. Ландсберг Г. С. Оптика. – М.: Физматлит, 2017. – 857 с.

**ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЯ НА ВРЕМЯ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КЛЮЧА  
HGPCSS НА ОСНОВЕ GAAS, ЛЕГИРОВАННОГО ГЛУБОКИМИ ЦЕНТРАМИ**

М.Г. Верхолетов

Научный руководитель: к.ф.-м.н. И.А. Прудаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: verkhmaks@yandex.ru

Структуры из GaAs с однородным легированием глубокими центрами применяются для изготовления различных приборов. На сегодняшний день наибольший практический интерес вызывают детекторы ионизирующих излучений и заряженных частиц [1–3], а также сверхбыстрые фотоэлектрические переключатели (HGPCSS – high-gain photoconductive semiconductor switch) [4–7].

В отличие от известных фотоключей, ключ HGPCSS открывается за время, которое может быть существенно меньше времени нарастания оптического импульса. При этом ключ поддерживается в открытом состоянии после окончания оптического воздействия на протяжении длительного времени (оно определяется временем разряда накопительной емкости).

Ранее не проводилось исследование влияния напряжения на скорость переключения ключа в проводящее состояние. Представлены результаты численных исследований по коммутации тока лавинным высокоомощным фотоэлектрическим ключом HGPCSS из GaAs в схеме с оптическим запуском. Показано, что увеличение напряжения с 4 кВ до 6.5 кВ нелинейного фотоэлектрического переключателя позволяет уменьшить время переключения на 35%.

Расчет проводился путем численного решения системы дифференциальных уравнений Пуассона, непрерывности для электронов и дырок и уравнений потока с учетом температуры носителей заряда в среде технологического проектирования Synopsys TCAD. Электрическая схема исследования представлена на рис.1.

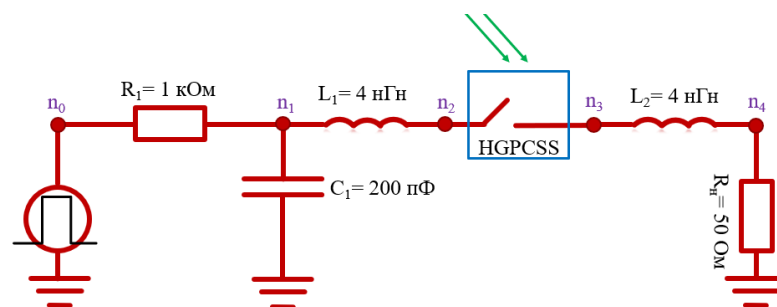


Рис.1. Электрическая схема измерения фотоэлектрического ключа в зависимости от напряжения накачки.

В результате численных исследований получены зависимости изменения напряжения на нагрузке от времени при разных напряжениях на фотоэлектрическом ключе HGPCSS (рис. 2).



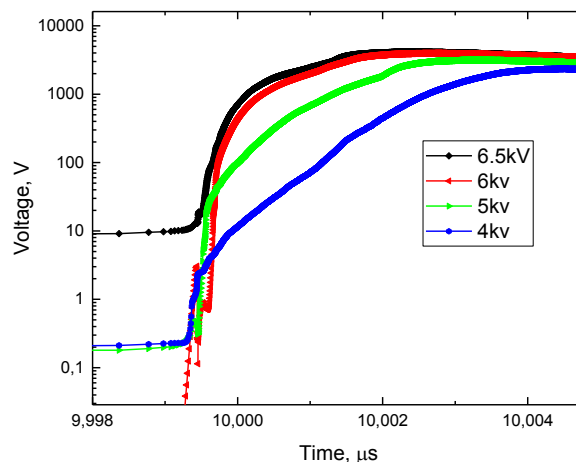


Рис. 2. Временные зависимости напряжения на нагрузке при различных напряжениях на фотоэлектрическом ключе HGPCSS

Анализ фронтов импульсов, полученных при разных напряжениях на фотоэлектрическом ключе, показал, что увеличение напряжения приводит к уменьшению времени нарастания фронта. Оценка времени нарастания фронта импульса напряжения проводилась по уровню 0.1/0.9. При напряжении накачки 4 кВ время нарастания фронта импульса напряжения на нагрузке составляет  $\approx 2.3$  нс. При напряжении накачки 5 кВ время нарастания фронта составляет  $\approx 2$  нс. При изменении напряжения накачки от 6 до 6.5 кВ время нарастания фронта практически не изменяется и остается на уровне  $\approx 1.7$  нс.

Таким образом, впервые путем проведения численных исследований показано, что увеличение напряжения на фотоэлектрическом ключе HGPCSS приводит увеличению его быстродействия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90037.

#### Литература

1. Tyazhev A.V., Budnitsky D.L., Koretskay O.B., Novikov V.A., Okaevich L.S., Potapov A.I., Tolbanov O.P., Vorobiev A.P. //Nucl. Instr. Meth. A. – 2003. – V. 34. – P. 509.
2. Rogalla M., Runge K. //Nucl. Instr. Meth. A. – 1999. – V. 44. – P. 434.
3. Cola A., Reggiani L., Vasanelli L. //Semicond. Sci. Technol. – 1997. – V. 12. – P. 1358.
4. Hanmin Zhao, P. Hadizad, Jung H. Hur, and Martin A. Gundersen, J. Appl. Phys. –V. 73. – 1993. – P. 1807.
5. R. P. Joshi and P. Kayasit, J. Appl. Phys. –V. 86. – 1999. – P. 3833.
6. Прудаев И.А., Верховлетов М.Г. Нелинейность вольт-амперных характеристик однородных компенсированных детекторных структур из GaAs //Письма в ЖТФ. – 2019. – Т. 45. – В. 11. – С. 37 – 40.
7. Верховлетов М.Г., Прудаев И.А. Влияние барьерных контактов на транспорт носителей заряда в однородных структурах из GaAs, легированных глубокими центрами Cr и EL2 //ФТП. – 2021. – Т. 55. – В. 8. – С. 693 – 698.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО ФОРМИРОВАНИЯ ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ  
С УЧЁТОМ ЗАВИСИМОСТИ ДЕСОРБЦИОННОГО ЧЛЕНА ОТ ТОЛЩИНЫ**

В.П. Винарский

Научный руководитель: к.ф.-м.н. К.А. Лозовой

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: vinarskiy2017@gmail.com

Графен, силицен и германен – три представителя двумерных материалов IV группы, имеющие различную структуру, различные свойства и физические характеристики. Например, графен не обладает запрещённой зоной, а потому не является полупроводником в отличие от силицена и германена, которые, таким образом, являются более перспективными материалами для различных приборных применений. Поэтому выращивание некоторых видов двумерных материалов является актуальным направлением в развитии нанотехнологий и наноэлектроники. Целью же данной работы является определение параметров осаждаемого материала и подложки, при которых реализуются процессы роста силицена и германена по двумерному механизму.

В данной работе исследуется рост двумерных и нульмерных наноструктур. В процессе выращивания наноструктур методом молекулярно-лучевой эпитаксии происходит фазовый переход из газообразного состояния в твёрдое.

В данной работе рассматривается режим полной конденсации, реализуемый в методе молекулярно-лучевой эпитаксии, где подавляющее большинство атомов, осаждённых на поверхность из газообразной фазы, встраивается в растущую твердотельную плёнку. [1]

Для расчётов дальнейших параметров были использованы следующие значения:  $T_c = 2\,200$  К,  $T = 853$  К,  $\nu_a = 1012$  Гц,  $\nu_d = 3\,109$  Гц,  $k_e = 8.617 \cdot 10^{-5}$  эВ/К,  $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К,  $E_d = 0.8$  эВ,  $E_a = 2.1$  эВ,  $\varepsilon = 5.7 \cdot 10^{-6}$  Дж/м,  $V = 0.1$  МС/с,  $\sigma = 16 \cdot 10^{-20}$  м<sup>2</sup>,  $\Gamma = 9.442$ . Были получены следующие значения параметров:  $t_r = 0.162$  с и  $\Delta t = 0.011$  с соответственно. Используя данные значения, выяснилось, что  $\Phi_r$  и  $\Phi_{max}$  аге равны 1.727 ед. и 43,475 ед. соответственно, следовательно, данные значения математически описывают режим полной конденсации в методе МЛЭ.

Известно [2], что десорбционный член рассчитывается следующим образом:

$$\gamma_{des} = \frac{\theta_{eq}}{V \cdot \tau_a} = 0,022$$

Однако, как следует из работы [3], была обнаружена экспоненциальная зависимость поверхностной энергии от толщины слоя плёнки либо островка. Предположим, что десорбционный член имеет эту экспоненциальную зависимость и влияет на поверхностную энергию:

$$\gamma_d(t) = \gamma_{des} \cdot e^{k \cdot V \cdot t}$$

Где  $\gamma_{des}$  – десорбционный член-константа,  $k$  – некий коэффициент,  $\gamma_d(t)$  – десорбционный член как функция от времени, представленный на рисунке 1.

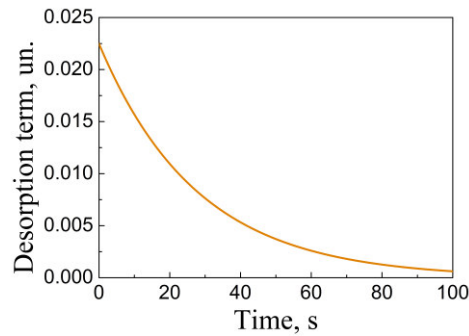


Рис. 1. Зависимость десорбционного члена от времени

Из графика, представленного на рисунке 1 следует, что при больших изменениях значения десорбционного члена как функция от времени шероховатость должна сильно изменяться, в особенности при значениях времени более 20 с. При данных условиях такой вывод справедлив для шероховатости поверхности при послойном росте, что можно увидеть на рисунке 2.

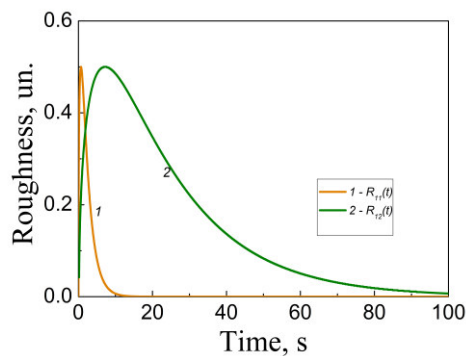


Рис. 2. Зависимость шероховатости от времени при послойном росте;

кривая 1 – шероховатость поверхности при послойном росте при постоянном десорбционном члене;  
кривая 2 – шероховатость поверхности при послойном росте при десорбционном члене как функции от времени

Из рисунка 2 видно, что при толщине в один или два монослоя шероховатость при наличии десорбционного члена как функции от времени увеличивается с меньшей скоростью в первые секунды, что представляет большой интерес.

Однако заметим, что в данных условиях при полислойном росте значения шероховатости приблизительно одинаковы, что видно на рисунке 3:

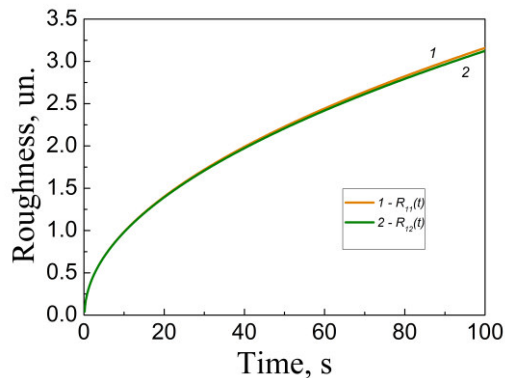


Рис. 3. Зависимость шероховатости от времени при полислоном росте;  
кривая 1 – шероховатость при постоянном десорбционном члене;  
кривая 2 – шероховатость при десорбционном члене как функции от времени

Таким образом, показано влияние десорбционного члена на формирование двумерных структур по послойному механизму. Исходя из работы [3], была предположена экспоненциальная зависимость десорбционного члена от времени, что в свою очередь влияет на зависимость поверхностной энергии от толщины слоя плёнки либо островка. Было обнаружено, что при данной поправке наибольший интерес представляет зависимость шероховатости от времени при послойном росте, где шероховатость с данной поправкой на первых порах изменяется медленнее, чем без неё. При полислоном росте при данных условиях изменения в значениях шероховатости незначительны.

Научное исследование выполнено в рамках Госзадания (проект № 0721-2020-0048).

#### Литература

1. Vinarskiy V P. Modelling of epitaxial growth of two-dimensional film // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 2140. – P. 012001 (1–5).
2. Дубровский В. Г. Теоретические основы технологии полупроводниковых наноструктур. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 352 с.
3. Zhou Y. Molecular dynamics simulations of the growth of Ge on Si // Surface Science. – 2020. – V. 696 – P. 121594-121603.

**ВЛИЯНИЕ АТОМОВ ЗАМЕЩЕНИЯ В МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ НА ТВЕРДОРАСТВОРНОЕ  
И ДЕФОРМАЦИОННОЕ УПРОЧНЕНИЕ [001]- МОНОКРИСТАЛЛОВ СИСТЕМЫ COCRFENI**

А.В. Выродова

Научный руководитель: д.ф.-м.н. И.В. Киреева

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: wirodowa@mail.ru

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) отличаются от обычных сплавов своим сложным, многоэлементным химическим составом элементов. Согласно первоначальному определению, они состоят как минимум из 5 основных элементов, взятых в почти эквипроцентных пропорциях (5–35 ат.%) [1]. Считается, что ВЭС могут обладать уникальными структурными свойствами, недоступными в обычных сплавах, и поэтому могут быть привлекательными материалами для современных применений [2]. Одним из перспективных классов ВЭС являются гранцентрированные кубические (ГЦК) структурированные сплавы системы Co-Cr-Fe-Ni-Mn. Хотя однофазный эквипроцентный ГЦК сплав CoCrFeNiMn (также известный как сплав Кантора) обладает высокой пластичностью и ударной вязкостью, его прочность слишком мала для прикладных задач при  $T > 296$  К. Значительные усилия были направлены на упрочнение данной системы сплавов. Легирование атомами замещения большего атомного радиуса, по сравнению с атомами, составляющими основу системы, например, атомами Al, Mo, является одним из эффективных способов повышения механических свойств.

В настоящей работе на [001]- монокристаллах представлены исследования влияния легирования атомами Mo концентрацией 4 ат.% и Al концентрацией 7 ат.% на температурную зависимость критических скалывающих напряжений  $\tau_{кр}$ , стадийность кривых течения, дислокационную структуру, механизм деформации – скольжение/двойникование и разрушение при деформации растяжением при температуре 296 К. Легирование атомами Mo до 4 ат.% и Al до 7 ат.% проводили за счет уменьшения каждого элемента системы CoCrFeNi в равных атомных долях. Полученный  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$  (ат.%) ВЭС характеризовался величиной энергии дефекта упаковки  $\gamma_0$  равной  $0.03$  Дж/м<sup>2</sup>,  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  (ат.%) ВЭС  $\gamma_0 = 0.05$  Дж/м<sup>2</sup> и CoCrFeNiMn ВЭС  $\gamma_0 = 0.018 - 0.022$  Дж/м<sup>2</sup>.

Монокристаллы CoCrFeNiMn,  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$ ,  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  были получены методом Бриджмена в атмосфере аргона из заготовок, выплавленных в печи сопротивления. Кристаллы гомогенизировали в атмосфере гелия при 1470 К в течение 48 часов и затем закаливали в воду. Механические испытания при 296 К проводили на испытательной машине Instron 5969. Критические скалывающие напряжения для скольжения определяли, используя выражение  $\tau_{кр}^{СК} = \sigma_{0.1} * m_{СК}$  ( $\sigma_{0.1}$  – осевые напряжения на пределе текучести,  $m_{СК}$  – фактор Шмида для скольжения). Для вычисления коэффициента деформационного упрочнения на стадии линейного упрочнения использовали формулу  $\theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$ .

Температурная зависимость критических скалывающих напряжений  $\tau_{кр}(T)$  в интервале  $T = 77 - 973$  К [001]-кристаллов эквипроцентного CoCrFeNiMn ВЭС, а также  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$  и  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  ВЭСов при деформации растяжением представлены на рисунке 1. Видно, что температурная зависимость  $\tau_{кр}(T)$  для монокристаллов исследованных сплавов состоит из двух температурных интервалов, характерных для ГЦК чистых металлов и сплавов замещения при развитии деформации скольжением (рис. 1).

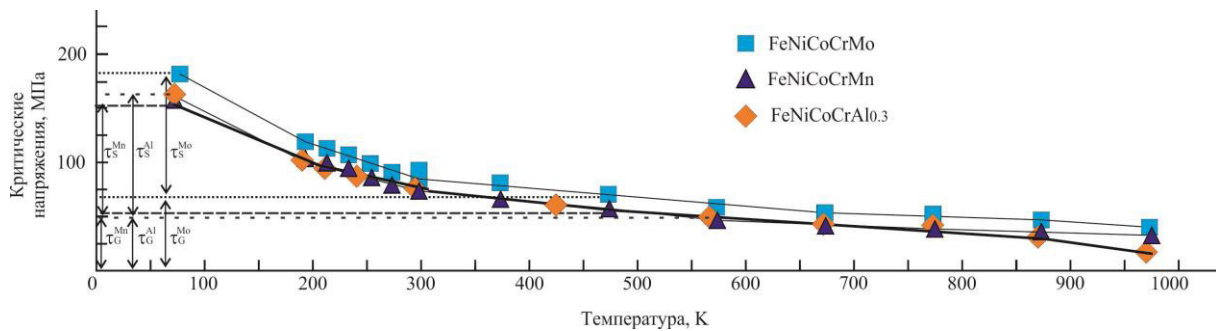


Рис. 1. Температурная зависимость критических скалывающих напряжений в монокристаллах ГЦК высокоэнтропийных сплавов при растяжении.  $\tau_S^{Mo}$ ,  $\tau_S^{Mn}$ ,  $\tau_S^{Al}$ ,  $\tau_G^{Mo}$ ,  $\tau_G^{Mn}$ ,  $\tau_G^{Al}$  – термоактивируемая и атермическая компоненты  $\tau_{кр}(T)$  для  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$ ,  $CoCrFeNiMn$  и  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  ВЭСов, соответственно

Анализ данных, представленных на рис. 1, показывает, что легирование атомами Mo концентрацией 4 ат.% системы  $CoCrFeNi$  приводит к росту  $\tau_{кр}$  во всем температурном интервале по сравнению с эквиатомным  $CoCrFeNiMn$  ВЭС: при  $T = 77$  К  $\Delta\tau_{кр} = \tau_{кр}^{Mo} - \tau_{кр}^{Mn} = 25$  МПа ( $\tau_{кр}^{Mo}$  и  $\tau_{кр}^{Mn}$  – критические скалывающие напряжения  $\tau_{кр}$  для  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$  ВЭС и  $CoCrFeNiMn$  ВЭС, соответственно); при  $T = 296$  К  $\Delta\tau_{кр} = 11$  МПа. При твердорастворном упрочнении атомами Mo наблюдается увеличение как термически-активируемой  $\Delta\tau_S = \tau_S^{Mo} - \tau_S^{Mn}$ , так и атермической компоненты  $\Delta\tau_G = \tau_G^{Mo} - \tau_G^{Mn}$  на 12 МПа). Не смотря на то, что величина эффективного атомного радиуса Al (143 пм)  $>$  Mo (139 пм), легирование атомами Al концентрацией 7 ат.% системы  $CoCrFeNi$  не приводит к значительному росту  $\tau_{кр}$ . Критические скалывающие напряжения  $\tau_{кр}$   $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  ВЭС оказываются близкими к  $\tau_{кр}$   $CoCrFeNiMn$  ВЭС во всем исследованном интервале температур (рис. 1). Различие в  $\Delta\tau_{кр}$  при добавлении атомов Al к системе  $CoCrFeNi$  концентрацией 7 ат.% во всем исследованном интервале температур составляет 2 – 5 МПа относительно  $CoCrFeNiMn$  ВЭС.

Исследования дислокационной структуры показывают, что начало пластической деформации во всех исследованных ВЭСах связано со скольжением. В [001]- кристаллах  $CoCrFeNiMn$  ВЭС дислокационная структура представляет собой однородное распределение дислокаций в нескольких системах, тогда как в кристаллах этой ориентации  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$  и  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  ВЭС структура планарная с плоскими скоплениями дислокаций. Физическая причина, приводящая к различию в типе дислокационной структуры, связана с формированием ближнего порядка в расположении атомов Mo в  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$  ВЭС, атомов Al - Cr, Al – Al и образованием кластеров в  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  и отсутствием ближнего порядка в эквиатомном  $CoCrFeNiMn$  ВЭС.

На рис. 2 представлены  $\sigma(\epsilon)$ - кривые течения и соответствующие им изменения коэффициента деформационного упрочнения  $\theta = d\sigma/d\epsilon$  от степени деформации [001]- кристаллов  $CoCrFeNiMn$ ,  $Co_{24}Cr_{24}Fe_{24}Ni_{24}Mo_4$ ,  $Co_{23.26}Cr_{23.39}Fe_{23.80}Ni_{22.88}Al_{7.67}$  ВЭСов при деформации растяжением при  $T = 296$  К. Видно, что в [001]- кристаллах, ориентированных для деформации скольжением в нескольких системах, пластическое течение развивается со стадии II линейного упрочнения. При достижении деформации 25 – 27 % наблюдается отклонение от линейного развития деформации, коэффициент деформационного упрочнения  $\theta$  уменьшается и происходит переход к стадии III динамического возврата (рис. 26).

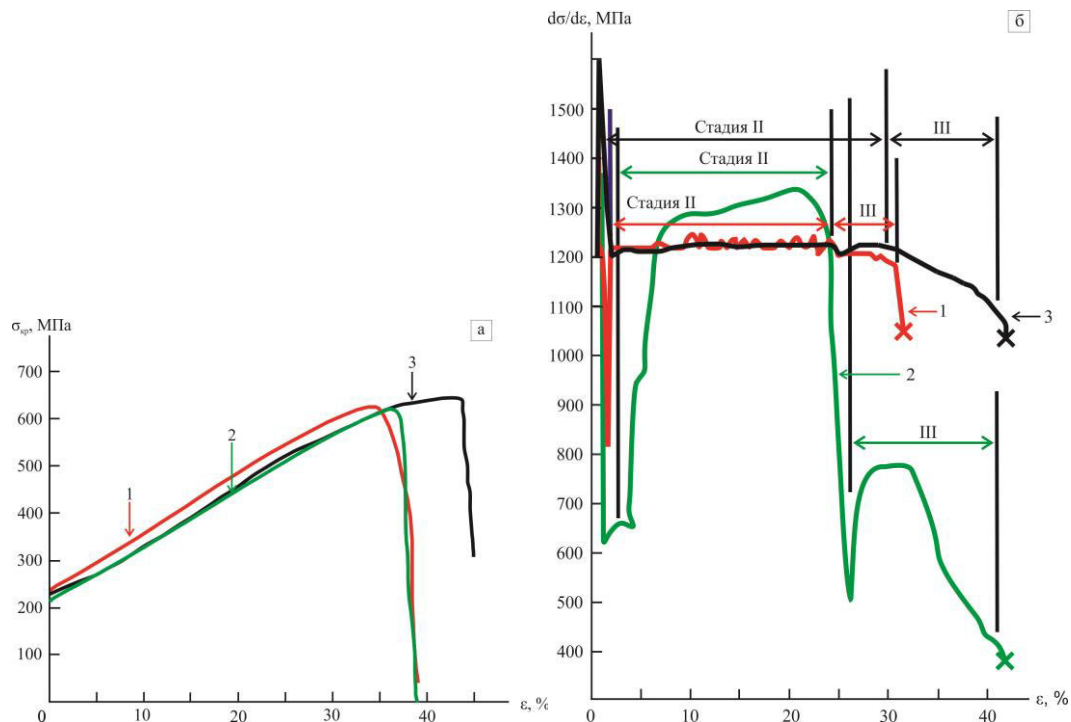


Рис. 2. а – Кривые «напряжение–деформация»; б – изменение коэффициента деформационного упрочнения с деформацией в [001]-монокристаллах высокоэнтропийных сплавов при растяжении; кривая 1 –  $\text{Co}_{24}\text{Cr}_{24}\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{24}\text{Mo}_4$ ; кривая 2 –  $\text{Co}_{23.26}\text{Cr}_{23.39}\text{Fe}_{23.80}\text{Ni}_{22.88}\text{Al}_{7.67}$ ; кривая 3 –  $\text{CoCrFeNiMn}$

В [001]- кристаллах исследованных сплавов в интервале деформации  $\epsilon = 5 - 20$  % на линейной стадии коэффициент деформационного упрочнения  $\theta_{II}$  оказывается близким:  $\theta_{II} = 1273$  МПа в  $\text{Co}_{24}\text{Cr}_{24}\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{24}\text{Mo}_4$ , и  $\theta_{II} = 1253$  МПа в  $\text{CoCrFeNiMn}$  и  $\theta_{II} = 1250$  МПа в  $\text{Co}_{23.26}\text{Cr}_{23.39}\text{Fe}_{23.80}\text{Ni}_{22.88}\text{Al}_{7.67}$ . При  $\epsilon > 20$  % в [001]- кристаллах  $\text{CoCrFeNiMn}$  ВЭС, в отличие от двух других исследуемых ВЭСов, наблюдается увеличение  $\theta$  до 1320 МПа. Другие параметры, характеризующие механическое поведение исследуемых кристаллов ВЭСов, такие как максимальный уровень напряжений до разрушения  $\sigma_{\max}$  (610 – 630 МПа) и пластичность (39 – 45 %) оказываются близкими, что определяется развитием деформации скольжением в нескольких системах.

При развитии скольжения одновременно в нескольких системах [001]- кристаллы  $\text{Co}_{24}\text{Cr}_{24}\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{24}\text{Mo}_4$ , и  $\text{CoCrFeNiMn}$  и  $\text{Co}_{23.26}\text{Cr}_{23.39}\text{Fe}_{23.80}\text{Ni}_{22.88}\text{Al}_{7.67}$  ВЭСов при 296 К разрушаются вязко при близком уровне напряжений. Фрактографические картины поверхности разрушенных образцов демонстрируют типичный для вязкого разрушения чашечный узор.

Работа выполнена при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).

### Литература

1. Microstructures and properties of high-entropy alloys / Y. Zhang [et al.] // Progress in Materials Science. – 2014. – V. 61. – P. 1–93.
2. The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy / F. Otto [et al.]. // Acta Mater. – 2013. – V. 61. – P. 5743 – 5755.

**ОСОБЕННОСТИ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ  
НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ  
СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

А.Ю. Вязовская<sup>1,2</sup>

Научный руководитель: к.ф.-м.н. М.М. Отроков

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

E-mail: alex\_vyaz93@mail.ru

Кремниевая поверхность (001) семейства соединений  $REX_2Si_2$  (RE – редкоземельный элемент, X – переходный металл) на протяжении последних лет привлекает значительное внимание в контексте систематического исследования влияния эффектов магнетизма и спин-орбитальных эффектов (включая эффект Бычкова-Рашбы) на электронную структуру поверхности. Данные системы позволяют изменять силу спин-орбитального взаимодействия (COB) посредством изменения компонентного состава. Так, спин-орбитальные эффекты будут усиливаться при переходе от соединений с Co, к соединениям с Rh и, далее, с Ir.

Ожидается, что столь же привлекательными с точки зрения исследования спин-орбитальных эффектов будут родственные указанным выше соединения системы с благородными металлами  $GdX_2Si_2$  (X = Cu, Ag, Au). Эти соединения изоструктурны интерметаллидам  $REX_2Si_2$  (RE – редкоземельный элемент, X – переходный металл). Возможность изменять благородный металл в составе соединения в рамках одной группы позволит исследовать влияние усиления COB на электронную структуру. Однако, электронная структура этих соединений не изучена, а магнитная структура экспериментально изучена не для всех этих соединений.

В связи с вышесказанным в настоящей работе проведено исследование в рамках теории функционала электронной плотности магнитной и электронной структуры систем  $GdX_2Si_2$  (X = Cu, Ag, Au) с акцентом на спин-орбитальные эффекты на поверхности (001).

Расчеты проводились в рамках метода проекционных плоских волн, реализованного в комплексе программ VASP. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение в форме Пердью-Бурка-Эрнцерхофа. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а COB учитывалось по методу второй вариации. 4f состояния Gd описывались методом GGA+U (U = 6.7 эВ и J = 0.7 эВ). Для моделирования электронной структуры поверхности использовалась асимметричная 32-слойная пленка, оканчивающаяся слоем атомов Gd с одной стороны и слоем атомов Si с другой.

Для установления магнитного порядка в рассматриваемых соединениях были проведены расчеты полных энергий для трех реализуемых в рассматриваемом классе материалов магнитных конфигураций – ферромагнитной (ФМ), антиферромагнитной четвертого типа (АФМIV) и межслоевой антиферромагнитной конфигурации (АФМИ) [1]. Таким образом установлено, что для всех рассматриваемых систем энергетически выгодно АФМIV упорядочение. Для  $GdCu_2Si_2$  и  $GdAu_2Si_2$  полученный результат качественно согласуется с экспериментальными данными [1].

При исследовании электронной структуры рассматриваемых соединений установлено, что величина спиновых расщеплений поверхностных состояний увеличивается по мере возрастания



атомного номера благородного металла, входящего в состав интерметаллида. В качестве показателя силы спин-орбитального взаимодействия в данных соединениях было выбрано собственное спин-орбитальное расщепление поверхностных резонансных состояний в центре зоны Бриллюэна, которое составляет 0,44 эВ, 0,07 эВ и 0,04 эВ для соединений с Au, Ag и Cu соответственно. В результате анализа электронной структуры, рассчитанной для парамагнитного случая и случая АФМIV магнитного упорядочения установлено, что магнитное упорядочение оказывает лишь незначительное влияние на электронную структуру поверхности вблизи уровня Ферми. В связи с вышесказанным далее рассмотрение влияния спин-орбитальных эффектов на электронную структуру приведено для парамагнитного случая.

На кремниевой поверхности рассматриваемых соединений наблюдаются три двукратно вырожденных поверхностных состояния в локальной запрещенной щели в окрестности точки  $\bar{M}$  и два поверхностных резонансных состояния (электронное и дырочное, вырожденные при энергии  $\sim -1.6$  эВ) в точке  $\bar{\Gamma}$ . При включении в рассмотрение СОВ, возникает собственное спин-орбитальное расщепление указанных состояний ( $\sim 0,44$  эВ). На некотором удалении от центра зоны Бриллюэна для каждого из этих состояний наблюдается снятие двукратного вырождения по спину расщепления по типу Бычкова-Рашбы.

Собственное спин-орбитальное расщепление в чистом виде было продемонстрировано электронным спектром нестехиометрической трехслойной пленки Si-Au-Si, являющейся минимальной структурной единицей, необходимой для образования состояний в центре зоны Бриллюэна. Увеличение толщины пленки до четырех атомных слоев приводит к нарушению инверсионной симметрии и, следовательно, к появлению расщепления по типу Бычкова-Рашбы.

Аналогичный анализ спин-орбитальных расщеплений поверхностных состояний может быть применен к состояниям в окрестности точки  $\bar{M}$ .

Таким образом, в рамках первопринципных расчетов исследованы магнитная и электронная структуры соединений  $GdX_2Si_2$  ( $X = Cu, Ag, Au$ ) с акцентом на влияние спин-орбитальных эффектов на электронную структуру кремниевой поверхности (001). Показано, что в данных соединениях реализуется внутрислойное антиферромагнитное упорядочение, оказывающее слабое влияние на поверхностную электронную структуру вблизи уровня Ферми. Спин-орбитальное расщепление состояний на кремниевой поверхности  $GdX_2Si_2(001)$  характеризуется сочетанием собственного спин-орбитального с расщеплением по типу Бычкова-Рашбы, а его величина возрастает по мере увеличения атомного номера благородного металла в составе интерметаллида. Для резонансного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$ , формирующегося в трехслойной нестехиометрической пленке в чистом виде показано собственное спин-орбитальное расщепление этих состояний. Переход к толстым стехиометрическим пленкам приводит к нарушению инверсионной симметрии и, следовательно, появлению расщепления по типу Бычкова-Рашбы.

#### Литература

1. Rotter M. et al. Dipole interaction and magnetic anisotropy in gadolinium compounds // Physical Review B. – 2003. – V. 68, №. 14. – P. 144418.

**ВЛИЯНИЕ MORFOЛОГИИ ПОРОШКОВ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ  
СПЕЧЕННЫХ ПОРИСТЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ TiNi**

А.С. Гарин, К.М. Дубовиков, А.А. Шишелова

Научный руководитель: к.ф.-м.н Е.С. Марченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: stik-020@mail.ru

Пористые сплавы на основе никелида титана (TiNi) являются перспективными имплантационными материалами для замещения костных дефектов за счёт высокого уровня биосовместимости и коррозионной стойкости. Благодаря развитой пористой структуре, схожей с анатомическим строением костной ткани, достигается высокий уровень интеграции пористого имплантата с организмом человека [1, 2].

На свойства получаемого пористого материала в первую очередь влияет сам порошок. Гранулометрический состав порошка определяет режим спекания, при котором будет получен пористый материал. Так, если основу гранулометрического состава определяют частицы порошка небольшого размера (1 – 10 мкм), то для достижения приемлемого результата температуру спекания необходимо понизить, так как за счёт большей площади контакта между частицами эффект контактного плавления будет вносить серьёзный вклад [3] на появление легкоплавкой фазы  $Ti_2Ni$ . Поэтому главной целью работы является исследование влияния структурно-фазового и гранулометрического состава порошков на свойства спеченных пористых сплавов TiNi.

В качестве исследуемого материала использовались порошки марки ПВ-Н55Т45 двух разных гранулометрических составов (рис. 1) и спеченные на их основе пористые материалы. Спекание проводилось в электровакуумной печи марки СНВЭ – 1.31/16-И4.

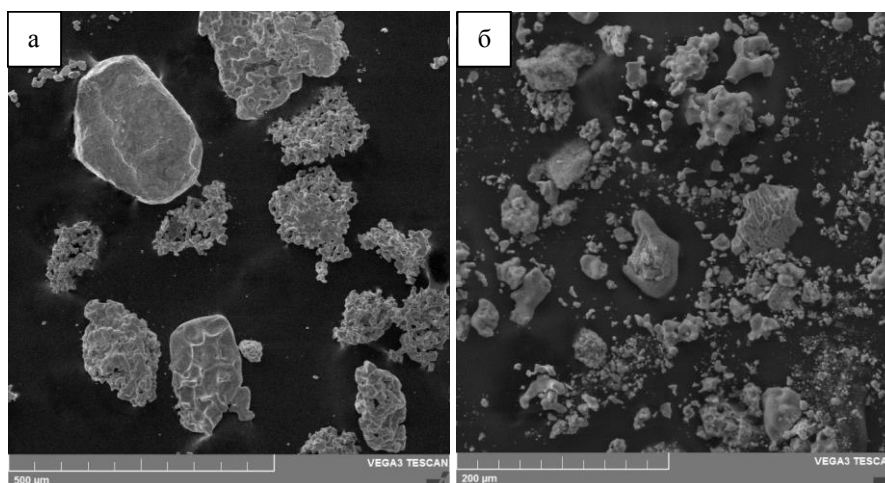


Рис.1. РЭМ порошков TiNi марки ПВ-Н55Т45 крупной (а) и мелкой (б) фракций

Порошки и полученные пористые материалы исследовались на растровом электронном микроскопе Teskan Mira 3 LM. Концентрационный состав фаз определяли с помощью энергодисперсионного микроанализатора EDAX ECON IV, а рентгеноструктурные исследования проводились на дифрактометре Shimadzu XRD 6000.

Установлено, что порошок TiNi крупной фракции (рис. 1 а) имеет типичную структуру, состоящую из частиц компактной и губчатой морфологии. В порошке мелкой фракции (рис. 1 б) затруднено выявление определённых типов частиц, а их размер варьируется в широком интервале. Методом энергодисперсионного микроанализа в порошке мелкой фракции, помимо Ti и Ni, установлено наличие O, N, Ca и Fe. Рентгеноструктурный анализ показал наличие фаз TiNi(B2), TiNi(B19'), Ti<sub>4</sub>Ni<sub>2</sub>O и Ti<sub>3</sub>Ni<sub>4</sub>. Фазы, содержащие Fe и Ca, не обнаружены, что говорит о их незначительном содержании в порошке. В порошке крупной фракции установлено наличие Ti, Ni и небольшой доли O. В результате рентгеноструктурного анализа обнаружены фазы TiNi(B2), TiNi(B19'), Ti<sub>3</sub>Ni<sub>4</sub> и Ti<sub>2</sub>Ni.

В процессе диффузионного спекания порошков происходит выравнивание химического состава. Рентгеноструктурный анализ показал (рис. 2) сходство структурно-фазового состава полученных пористых сплавов. Объемная доля фаз для сплава, полученного из порошка крупной фракции, составило: TiNi(B2) – 58,4 %, Ti<sub>2</sub>Ni – 12,3 %, Ti<sub>3</sub>Ni<sub>4</sub> – 29,3 %. Для сплава, полученного из порошка мелкой фракции, объемная доля фаз: TiNi(B2) – 56,7 %, Ti<sub>2</sub>Ni – 14,1 %, Ti<sub>3</sub>Ni<sub>4</sub> – 29,2.

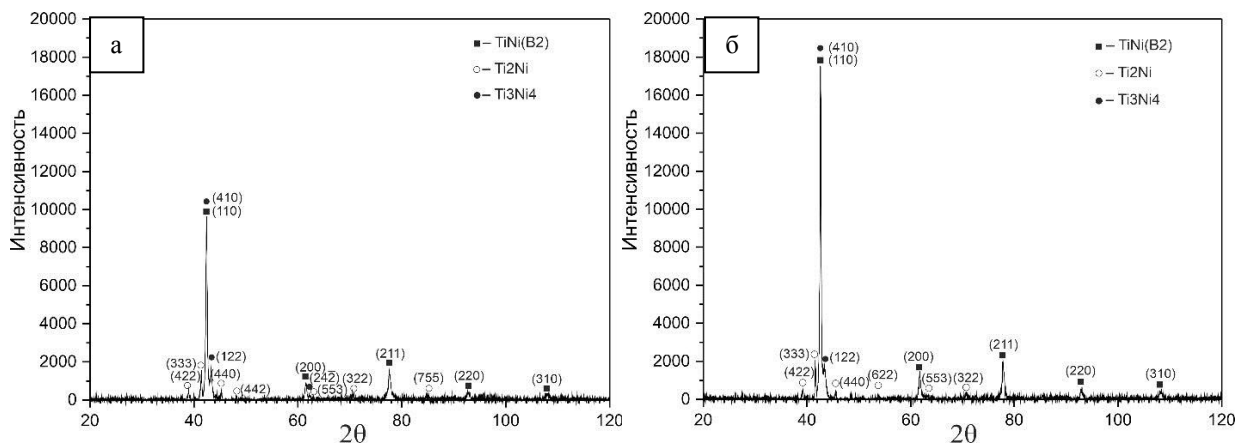


Рис. 2. Рентгенограммы пористых сплавов, полученных из порошков крупной (а) и мелкой (б) фракций

Несмотря на некоторую химическую неоднородность порошка мелкой фракции и на морфологические различия с порошком крупной фракции, рентгеноструктурный анализ показал сходство структурно-фазового состава полученных пористых сплавов. Таким образом, процесс диффузионного спекания порошка TiNi разных гранулометрических составов позволяет получать одинаковые образцы по качеству спекания и структурно-фазовому составу.

*Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0022.*

### Литература

1. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Том 1 / В.Э. Гюнтер и др. – Томск, Изд-во МИЦ. – 2011. – 534 с.
2. Особенности пористого никелида титана полученного методом СВС / Ю. Ф. Ясенчук, Е.С. Марченко, С.В. Гюнтер и др. – Томск, Изд-во Томского государственного университета. – 2020. – 114 с.
3. Контактное плавление металлов и наноструктур на их основе / А.А. Ахкубеков, Т.А. Орквасов, В.А. Созаев. – Москва. Изд-во Физматлит. – 2008. – 152 с.

**ОСОБЕННОСТИ ВОДОРОДНОГО ОХРУПЧИВАНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ  
СИСТЕМЫ FeMnCrNiCo(N)**

Д.Ю. Гуртова<sup>1</sup>, Д.О. Астапов<sup>1</sup>, М.Ю. Панченко<sup>2</sup>

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н., Е.Г. Астафурова

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

E-mail: [dasha\\_gurtova@mail.ru](mailto:dasha_gurtova@mail.ru)

Термин «высокоэнтропийные сплавы» (ВЭС) относят к сплавам, состоящим из большого количества компонентов (часто не менее пяти), причем количество каждого из них не должно превышать 35 ат. % и не должно быть меньше 5 ат. % [1]. Данный класс материалов привлек значительное внимание исследователей в последнее десятилетие, поскольку высокоэнтропийные сплавы, в особенности, сплавы с гранцентрированной кубической решеткой на базе системы CoCrFeNiMn (сплав Кантора), демонстрируют исключительные механические свойства, в частности сочетание высокой прочности и пластичности при криогенных температурах [2]. Тем не менее изучение данного класса материалов не должно ограничиваться получением только простых структур твердого раствора замещения, а может получить развитие в области разработки сплавов с более высокими эксплуатационными характеристиками на основе комплексных твердых растворов замещения и внедрения. Введение атомов внедрения, например, азота, является одним из эффективных методов улучшения механических свойств ВЭС. Поэтому исследование вопроса по влиянию атомов азота на высокоэнтропийные сплавы остается актуальным. Несмотря на повышенный интерес к ВЭС, их восприимчивость к разрушительному действию водорода, открытому в 1870-х годах (водородному охрупчиванию [3]), подробно не изучалась. Будущие элементы конструкций, изготовленные из высокоэнтропийных сплавов, несомненно будут подвергаться воздействию водорода в потенциальных рабочих средах, например, в среде водяных реакторов атомных электростанций с высоким содержанием водорода [4]. Принимая данный факт во внимание, становится ясно, что важно изучать влияние водорода на механическое поведение сплавов этого класса. Целью данной работы является установить влияние азота на закономерности водородного охрупчивания высокоэнтропийного сплава FeMnCrNiCo(N).

Объектом исследования были выбраны два высокоэнтропийных сплава с ГЦК решеткой: сплав без азота 20,0Fe-20,0Mn-20,0Cr-20,0Ni-20,0Co (ВЭС) и легированный азотом 20,0Fe-20,0Mn-20,0Cr-20,0Ni-18,6Co-1,4N (ВЭС-1,4N) (ат. %). Для формирования однофазного твердого раствора образцы исследуемых сплавов были подвержены термомеханической обработке (ТМО). Электролитическое наводороживание проводилось в 3 % водном растворе NaCl, содержащем 3 г/л NH<sub>4</sub>SCN, при плотности тока 10 мА/см<sup>2</sup> в течение 50 ч. Одноосное растяжение с начальной скоростью 5×10<sup>-4</sup> с<sup>-1</sup> проводили при комнатной температуре на установке LFM 125 (Walter+Bai AG). Методами рентгеноструктурного анализа, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии было установлено, что образцы обоих сплавов после ТМО имеют однофазную крупнокристаллическую аустенитную структуру со средним размером зерна около 200 мкм. Анализ результатов испытаний на одноосное растяжение при комнатной температуре показывает, что предел текучести  $\sigma_{0,2}$ , предел прочности  $\sigma_b$  и пластичность образцов  $\delta$  увеличиваются при легировании сплавов атомами азота (табл. 1).

# XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

После насыщения водородом наблюдается небольшое повышение предела текучести обоих исследуемых сплавов, что является следствием твердорастворного упрочнения атомами водорода. Коэффициент водородной хрупкости  $I_H$ , который характеризует вызванное водородом уменьшение удлинения до разрушения, для образцов с азотом практически в два раза меньше, чем для образцов без азота (табл.1).

Таблица 1. Механические свойства при растяжении до и после наводороживания.

	$\delta$ , %	$\sigma_{0,2}$ , МПа	$\sigma_B$ , МПа	$I_H$ , %
ВЭС	64	184	521	25
ВЭС+Н	48	189	473	
ВЭС-1,4N	71	290	702	14
ВЭС-1,4N+Н	61	311	693	

С помощью электронно-микроскопического исследования деформированных образцов до и после наводороживания были выявлены единые закономерности влияния водорода на дислокационную структуру изучаемых сплавов – усиление планарности скольжения, что может быть спровоцировано уменьшением энергии дефекта упаковки после насыщения водородом. Во всех образцах после наводороживания появляется хрупкий поверхностный слой, толщина которого в образцах ВЭС намного шире  $W_H = 70 \pm 21$  мкм, чем в образцах ВЭС-1,4N  $W_H = 45 \pm 14$  мкм. Хрупкий наводороженный слой разрушается в основном интеркристаллитно, но наблюдаются и транскристаллитные фасетки, доля которых увеличивается при легировании ВЭС азотом (рис. 1).

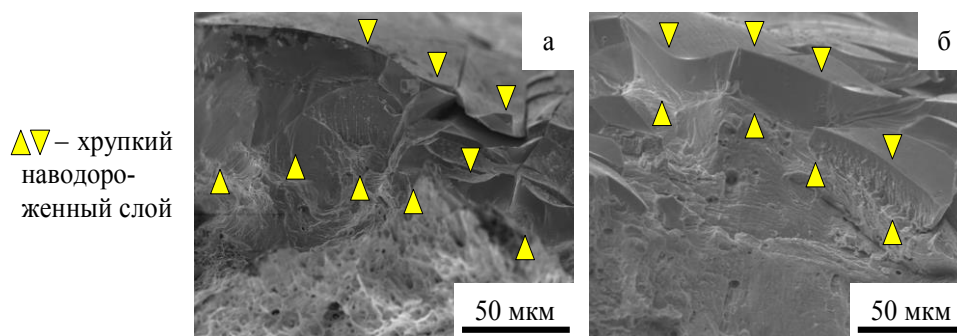


Рис. 1 – Изображения поверхности разрушения образцов после насыщения водородом, полученные методом сканирующей электронной микроскопии: а – ВЭС, б – ВЭС-1,4N

Таким образом, легирование азотом способствует уменьшению толщины хрупкого наводороженного слоя и повышению устойчивости образцов высокоэнтропийных сплавов к водородному охрупчиванию.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00261).

## Литература

1. Ремпель А.А., Гельчинский Б.Р. Высокоэнтропийные сплавы: получение, свойства, практическое применение // Изв. Вуз. Черная Металлургия. – 2020. – № 63 (3-4). – С. 248-253.
2. Cantor B. Multicomponent high-entropy Cantor alloys // Prog. Mater Sci.. – 2021. – № 120.
3. Lynch S. Hydrogen embrittlement phenomena and mechanisms // Corros. Rev. – 2012. – № 3-4. – P. 105-123.
4. Zhao Y., et. al. Resistance of CoCrFeMnNi high-entropy alloy to gaseous hydrogen embrittlement // Scripta Materialia. – 2017. – № 135. – P. 54-58.

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
ПОВЕРХНОСТНЫХ Ti-Ni-Nb СПЛАВОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА TiNi-ПОДЛОЖКЕ  
ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВЫМ СПОСОБОМ**

Ф.А. Дьяченко<sup>1</sup>, А.А. Атовуллаева<sup>2</sup>

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Л.Л. Мейснер

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: frozennetroll@mail.ru

Использование сплавов на основе TiNi с эффектами памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ) в качестве материалов для медицины обусловлено их способностью обратимо возвращать значительную заранее заданную деформацию (8–12%) при нагревании до температуры человеческого тела [1]. Главными ограничениями для включения этих материалов в группу биосовместимых металлических материалов являются: (1) – их химический состав (высокая концентрация токсичных ионов Ni<sup>+</sup> в составе сплавов и, соответственно, высокий риск его попадания в смежные ткани), (2) – недостаточный уровень их рентгеноконтрастности.

Тонкие металлические покрытия субмикронной толщины используют для функционализации поверхности металлических материалов с целью повышения их биосовместимости, коррозионной стойкости, рентгеноконтрастности. Однако, основными недостатками сформированных покрытий на поверхности TiNi сплавов являются: (1) наличие текстуры в кристаллических покрытиях, что снижает их прочность; (2) слабая адгезионная прочность покрытий и (3) их термомеханическая несовместимость с TiNi-подложкой. Эти факторы могут приводить к отслоению покрытий от подложек из TiNi сплавов при эксплуатации медицинских изделий [2].

В исследованиях [3] показано, что понижение концентрации Ni вблизи поверхности, повышение коррозионных свойств и рентгеноконтрастности TiNi сплава можно достигнуть с помощью аддитивного тонкопленочного электронно-пучкового (АТП-ЭП) способа синтеза поверхностных сплавов (ПС). Суть этого способа, заключается в многократном чередовании операций осаждения легирующей пленки заданного состава и определенной толщины (~50 – 100 нм) и последующего жидкофазного перемешивания компонентов пленки и подложки с помощью импульсного низкоэнергетического ( $\leq 30$  кэВ) высокоточного (до ~25 кА) электронного пучка (НСЭП) микросекундной длительности (~2 – 4 мкс).

В [3] описаны результаты исследований поперечной структуры ПС на основе Ti-Ni-Nb, синтезированных на подложке TiNi с использованием легирующих пленок Ti<sub>85</sub>Nb<sub>15</sub> и Ti<sub>70</sub>Nb<sub>30</sub> (ат. %) толщиной ~100 нм. Однако, детальная характеристика физико-механических свойств синтезированных ПС, включая анализ их зависимости от структуры ПС в [3] отсутствует.

В соответствии со сказанным, *цель работы* – изучить физико-механические свойства ПС на основе Ti-Ni-Nb, различающихся структурой, включая толщину подслоев, фазовые составы, соотношением объёмных долей аморфной и кристаллической фаз в подслоях, изучить влияние этих характеристик на прочностные и упруго-пластические параметры ПС и их механическую совместимость с подложкой TiNi.

Исследования проводили на образцах TiNi сплава. Подробное описание материала и этапы предварительных поверхностных обработок TiNi-образцов приведено в работе [3]. Формирование [Ti-Ni-Nb]ПС на TiNi-подложке осуществляли в едином вакуумном цикле на модифицированной автоматизированной установке «РИТМ-СП» (ООО «Микросплав», Россия). Приготовлены [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС и [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС на основе систем: 1) [пленка Ti<sub>85</sub>Nb<sub>15</sub>, толщина 100 нм/TiNi-подложка] и 2) [пленка Ti<sub>70</sub>Nb<sub>30</sub>, толщина 100 нм/TiNi-подложка]. Подробное описание синтеза [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС и [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС приведено в [3]. Описание условий эксперимента по оценке физико-механических свойств методом инструментального индентирования приведено в [4].

Основные выводы, полученные в результате исследований, заключаются в следующем: 1) в приповерхностной области [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС изменение ветвей нагружения носит более монотонный характер, чем у [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС, что говорит о большей однородности физико-механических свойств [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС вблизи поверхности; 2) различие физико-механических свойств [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС и [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС обусловлено различиями их слоевого строения, включая толщину подслоев, фазовые составы, структурные состояния фаз (аморфной и кристаллической) в подслоях. Изменение прочностных и упруго-пластических параметров более монотонно в [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС с меньшей объемной долей аморфной фазы, чем в [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС с большим содержанием аморфной фазы; 3) переходы от ПС к подложке TiNi сопровождаются монотонным изменением основных физико-механических характеристик в переходных слоях и завершаются небольшими скачками своих значений на глубине более ~2,3 мкм. При этом в образце с [TiNi-Nb<sub>15</sub>]ПС скачки прочностных и упруго-пластических параметров меньше, чем в образце с [TiNi-Nb<sub>30</sub>]ПС.

Авторы благодарят м.н.с. ЛВЭ ИСЭ СО РАН Яковлева Е.В. – за проведение электронно-пучкового синтеза; д.ф.-м.н., с.н.с. ЛФПЯ ИФПМ СО РАН Шугурова А.Р – за проведение испытаний по оценке физико-механических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-33-90034.

#### Литература

1. Mohd J.J., Leary M., Subic A., Gibson A.M. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities // Mater. Des. – 2014. – Vol. 56. – P. 1078–1113.
2. Jia. H., Liu F., An Z., Li W., Wang G., Chu P.J., Jang J.S.C., Gao Y., Liaw P.K. Thin-film metallic glasses for substrate fatigue-property improvements // Thin solid films. – 2014. – Vol. 561. – P. 2–27.
3. Meisner L.L. Rotshtein V.P., Semin V.O., Markov A.B., Yakovlev E.V., Meisner S.N., Shepel D.A., Neiman A.A., Gudimova E.Yu., D'yachenko F.A., Mukhamedova R.R. Microstructural characterization and mechanical behavior of nanocomposite Ti-Ni-Nb surface alloys synthesized on TiNi SMA substrate by additive thin-film electron-beam mixing // Materials characterization. – 2020. – Vol. 166. – P. 110455(1-15).
4. D'yachenko F.A., Meisner S.N., Yakovlev E.A., Atovullaeva A.A., Meisner L.L. Modification of physical-mechanical properties of NiTi alloy by electron beam in surface melting mode // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 597. – P. 012044(1-5).

**STRAIN GLASS ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ С ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ**

М.В. Жердева

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко, к.ф.-м.н. Е.Е. Тимофеева

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: zhmv98@mail.ru

Сплавы с памятью формы (ЭПФ) на основе TiNi являются одним из наиболее изученных функциональных материалов, поскольку они обладают превосходными физическими свойствами, такими как тепловая и механическая память [1]. Например, сплав Ti<sub>50</sub>Ni<sub>50</sub> подвергается мартенситному переходу (МП) первого порядка из кубической аустенитной фазы (B2) в моноклинную мартенситную фазу (B19') в процессе охлаждения. Хорошо известно, что введение точечных дефектов играет важную роль в изменении и контроле свойств кристаллов [2]. В сплавах TiNi увеличение содержания никеля приводит к большому количеству точечных дефектов, что ведет к возникновению появления аномального состояния strain glass [1]. Состояние strain glass известно как «замороженное» неупорядоченное деформационное состояние, вызванное флуктуациями случайно распределенных точечных дефектов [3]. В таком случае мартенсит при охлаждении не возникает, однако может появляться под нагрузкой, что приводит к развитию ЭПФ и СЭ в данных материалах. На сегодняшний день, ЭПФ и сверхэластичность (СЭ) в сплавах TiNi при strain glass превращении, исследовано очень слабо, что определяет актуальность данной работы.

В данной работе объектом исследования являются [001]-монокристаллы Ti-51,7ат. %Ni. После роста их подвергали высокотемпературному отжигу при 1253 К, 1 ч с последующей закалкой в воду для получения однофазной структуры. Далее на монокристаллах Ti-51,7ат. %Ni проводили старение при 823 К, 1 ч с последующей закалкой.

В закаленных монокристаллах из-за пересыщения по никелю при охлаждении/нагреве термоупругие МП не наблюдаются (рис. 1 а) [3, 4]. На графике электросопротивление-температура для этих монокристаллов наблюдается отрицательная температурная зависимость, что характерно для B2-R превращения в TiNi. Однако пика, свидетельствующего о начале R-превращения, на графике не нет. Согласно работам [2, 4] охлаждение до 20 К не приводит к образованию мартенсита в данных сплавах. Образуется нанодоменная структура, которая носит название frozen strain glass.

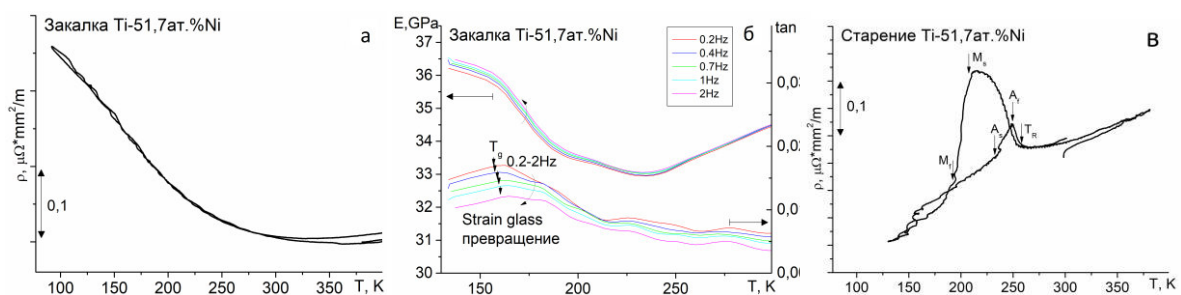


Рис. 1. Температурные зависимости для закаленных монокристаллов Ti-51,7ат. %Ni; а, в – зависимость электросопротивления для закаленных и состаренных кристаллов; б – частотно-температурные зависимости модуля упругости E и внутреннего трения tan δ



Наличие провала на температурной зависимости модуля свидетельствует о фазовом переходе (рис. 1 б). Величина пика внутреннего трения (рис. 1 б) составляет 0,017, что на порядок меньше, чем в закаленных сплавах с содержанием никеля  $C_{Ni} < 51,2$  ат.%, где образуется мартенсит охлаждения [1 – 4]. Температура пика внутреннего трения  $T_g$  сильно зависит от частоты. Перечисленное свидетельствует о наличии strain glass перехода в закаленных монокристаллах Ti-51,7ат. %Ni.

С целью получения МП при охлаждении/нагреве высоконикелевые сплавы TiNi подвергают термической обработке 773 – 873 К, которая приводит к выделению крупных дисперсных частиц  $Ti_3Ni_4$  ( $d \sim 100 - 600$  нм) [5]. Частицы способствуют снижению никеля в матрице, приводят к эффектам дисперсионного упрочнения, появлению термоупругих B2-R-B19' МП при охлаждении/нагреве и уменьшению минимальных критических напряжений. На кривой зависимости электросопротивления от температуры наблюдаются двустадийные превращения  $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$  (рис. 1 в).

Индуктировать B2-B19' МП в закаленных монокристаллах Ti-51,7ат. %Ni возможно за счет приложения нагрузки в циклах охлаждение/нагрев (рис. 2 а). Основная особенность закаленных монокристаллов заключается в отсутствии самоаккомодирующей структуры мартенсита охлаждения. При достижении критического уровня напряжений 750 МПа при охлаждении возникает большая объемная доля ориентированного B19'-мартенсита, с чем связана деформация образца при прямом МП,  $\epsilon_{for}$ . Нагрев приводит к развитию обратного МП, исчезновению мартенсита и возврату (частично или полностью) первоначальных размеров образца.

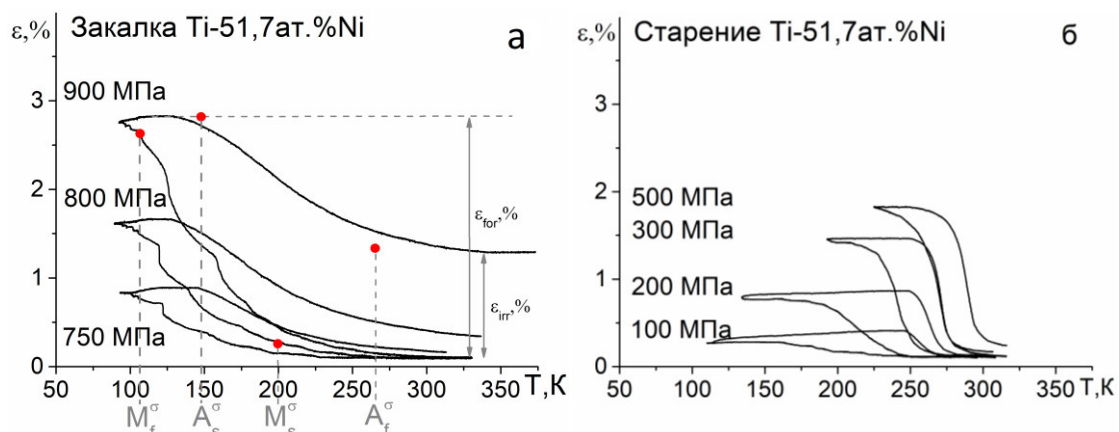


Рис. 2. Кривые  $\epsilon(T)$  для монокристаллов Ti-51,7ат. %Ni;  
 а – закаленные монокристаллы; б – состаренные монокристаллы

В состаренных монокристаллах при прямом МП при охлаждении в матрице исходной B2-фазы зарождаются и растут несколько вариантов мартенсита с различной ориентацией, формирующие самоаккомодирующую структуру с минимальной упругой деформацией вариантов [5]. Если проводить охлаждение под нагрузкой, то в материале начинают расти кристаллы мартенсита с благоприятной ориентацией относительно внешней нагрузки. При малых напряжениях происходит рост, как ориентированного мартенсита, так и самоаккомодирующей структуры. В состаренных монокристаллах Ti-51,7ат. %Ni (рис. 2 б) минимальные напряжения, необходимые для получения ориентированного мартенсита и наблюдения обратимой деформации уменьшаются в 7 раз, до 100 МПа, по сравнению с

закаленными кристаллами Ti-51,7 ат. %Ni. Это связано выделением частиц  $Ti_3Ni_4$ , которые уменьшают содержание никеля в матрице и являются источниками зарождения мартенсита.

Увеличение обратимой деформации в монокристаллах тоже происходит по-разному. В закаленных кристаллах увеличение внешних напряжений всего на 150 МПа (до 900 МПа) ведет к максимальным значениям деформации  $\epsilon_{for} = 2,73 \%$ . В состаренных кристаллах напротив, нужно приложить 400 МПа к минимальным критическим напряжениям для получения максимальной деформации  $\epsilon_{for} = 1,7 \%$ . Максимальная деформация при прямом МП  $\epsilon_{for}$  сильно зависит от состояния и в состаренных монокристаллах меньше на 1 %, чем в закаленных. Это происходит за счет частиц  $Ti_3Ni_4$ , которые выделяются при старении монокристаллов. Известно, что частицы не испытывают МП, поэтому превращение R-B19' развивается между частицами [5]. Значит, объёмная доля матрицы, которая может испытывать МП в состаренных монокристаллах меньше, чем в закаленных кристаллах, что и приводит к сокращению величины деформации.

Экспериментально показано, что благодаря старению [001]-монокристаллов Ti-51,7 ат. % Ni возможно управлять проявлением термоиндуцированных B2-B19' МП и особенностями развития ЭПФ. Закаленные монокристаллы не испытывают термоиндуцированного МП, требуют высоких приложенных сжимающих напряжений (750 МПа) для формирования ориентированного B19'-мартенсита. Старение высоконикелевых [001]-монокристаллов Ti-51,7 ат. % Ni приводит к появлению термоупругих B2-R-B19' МП при охлаждении/нагреве, уменьшению сжимающих напряжений (до 100 МПа), необходимых для наблюдения минимальной деформации при развитии ЭПФ в термоциклах и уменьшению величины максимальной деформации.

Автор выражает благодарность Тимофеевой Е.Е., Панченко Е.Ю. и Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование выполнено при поддержке гранта в соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации № 220 (Соглашение № 075-15-2021-612 от 04 июня 2021 года).

#### Литература

1. Chang Liu / Strain Glass and Novel Properties // Shape Memory and Superelasticity. – 2019. – V. 5. – P. 1–4.
2. Y. Wang / Strain Glass: Glassy Martensite // Materials Science Forum. – 2008. – V. 583. – P. 67–84.
3. Shampa Sarkar / Evidence for Strain Glass in the Ferroelastic-Martensitic System  $Ti_{50-x}Ni_{50+x}$  // Physical review letters. – 2005. – V. 95 (20). – P. 205702 (1–4).
4. Xiaobing Ren / Strain glass and ferroic glass – Unusual properties from glassy nano-domains // Physica Status Solidi (B). – 2014. – V. 251 (10). – P. 1982–1992.
5. Отцука К. Сплавы с эффектом памяти формы – М.: Metallurgia, 1990. – 224 с.

**МОДЕЛЬ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСИ ПРИ ЛЕГИРОВАНИИ В СИСТЕМАХ  
МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ**

А.Д. Ишков

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ю. Эрвье

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: peniturum@gmail.com

При молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) рост кристалла происходит в существенно неравновесных условиях. Возможность резкого изменения потоков основных и примесных атомов, поступающих на поверхность подложки из молекулярного пучка (низкая инерционность системы), позволяет получать резкие концентрационные профили легирования и дельта-легированные слои. Однако легирование полупроводников часто сопровождается сильной поверхностной сегрегацией примеси с ростом температуры, которая приводит к существенному размытию профилей легирования. В данном случае поверхностная сегрегация означает, что в поверхностных слоях образуется резервуар из частиц примеси, который перемещается вместе с поверхностью растущего кристалла. Примесь встраивается в кристалл не мгновенно, а по мере накопления в резервуаре. При современных масштабах активных областей полупроводниковых структур в десятки и единицы нанометров искажение профиля распределения примесей, вызванное поверхностной сегрегацией, становится совершенно неприемлемым.

В качестве количественной характеристики поверхностной сегрегации используется коэффициент поверхностной сегрегации,  $r$ , определяемый как отношение концентрации примеси на поверхности к концентрации в объеме, нормированное на толщину кристаллического слоя. Наиболее важная донорная примесь, используемая при легировании кремния, сурьма, характеризуется очень сильной (суперэкспоненциальной) поверхностной сегрегацией при повышении температуры подложки. Так, при легировании кремния, растущего на подложках ориентации (001), коэффициент сегрегации меняется на четыре порядка при изменении температуры в пределах ста градусов [1,2]. Подобное поведение  $r(T)$  наблюдалось и в случае эпитаксии на подложках ориентации (111) [2]. Однако количественно полученные зависимости  $r(T)$  для этих двух кристаллографических ориентаций имеют существенные различия. В частности, температура перехода начала резкого возрастания  $r(T)$  смещена для Si(111) примерно на 150-170 градусов в сторону более высоких температур по сравнению с Si(001).

Целью данной работы является теоретическое исследование возможных причин наблюдаемого в эксперименте “сдвига” зависимостей  $r(T)$  при переходе от поверхности Si(001) к поверхности Si(111). Для описания захвата примеси растущим кристаллом и поверхностной сегрегации примеси использовалась модель, предложенная в работе [3]. В соответствии с моделью полагалось, что энергетически наиболее выгодным является положение примеси в состоянии адсорбции на поверхности (в адсорбционном слое). Переход примеси в поверхностный слой возможен за счет прямого обмена адатома примеси с атомом основного вещества и за счет блокирования адатомов примеси в изломах адатомами основного вещества. Атом примеси, оказавшийся в приповерхностном слое в результате “замуровывания” движущейся ступенью, считался захваченным кристаллом. Полагалось, что рост кристалла происходит по механизму перемещения вицинальных ступеней. Образование двумерных островков на террасах не учитывалось, что оправдано в случае относительно высоких температур, при

которых наблюдается резкое увеличение  $r(T)$ . В данной работе для получения зависимости коэффициента сегрегации от температуры использовалось следующее выражение:

$$r = \frac{1}{K_d e^{\frac{k_{dex}}{F}} + \frac{k_{ex}}{k_{dex}} (1 - e^{-\frac{k_{dex}}{F}})} \quad (1)$$

В выражении (1)  $k_{ex}$  и  $k_{dex}$  – константы скоростей перехода из адсорбционного слоя в поверхностный слой и перехода из поверхностного слоя в адсорбционный слой, соответственно;  $K_d$  – коэффициент захвата примеси изломом на ступени;  $F$  – скорость роста (поток атомов основного вещества). Полагается, что для констант скоростей справедливы аррениусовские выражения  $k = \nu \exp(-\frac{E}{k_B T})$ , где  $\nu$  – частотный множитель и  $E$  – соответствующая энергия активации.

Коэффициент захвата примеси  $K_d$  зависит от температуры и потока атомов основного вещества. Соответствующие выражения приведены в работе [4].

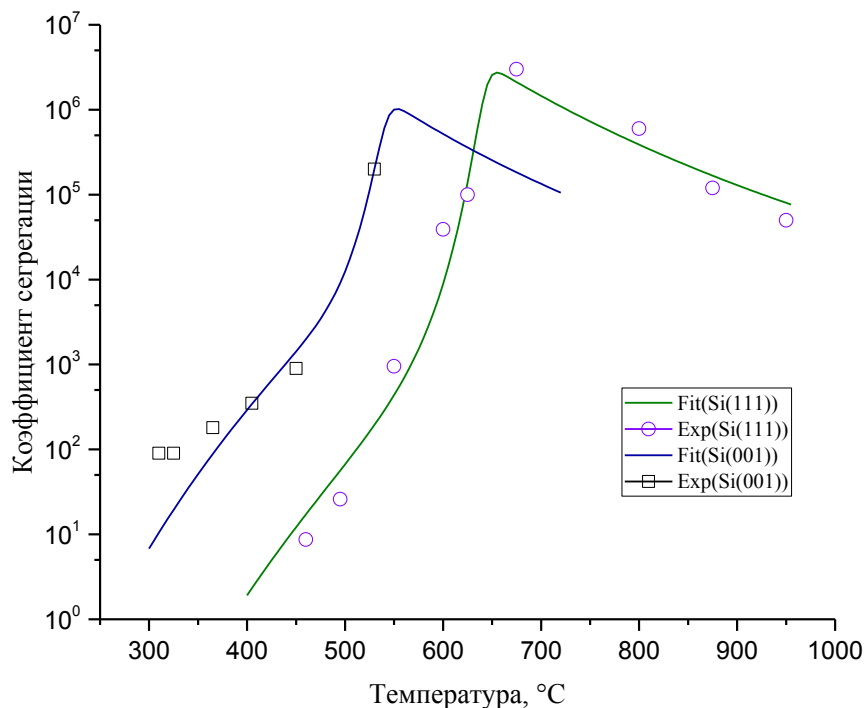


Рис 1. Теоретические зависимости коэффициента сегрегации от температуры (сплошные линии) и экспериментальные значения для Si(001) (квадраты) и для Si(111) (круги).

Рассчитанные зависимости  $r(T)$  представлены на Рис. 1 в сопоставлении с экспериментальными данными, полученными в работе [2]. Для построения зависимостей использовались следующие значения параметров модели:  $E_{eq} = 0.5$  эВ,  $\nu = 10^{10} \text{ c}^{-1}$ ,  $\nu_{Si} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ,  $E_{SiSi} = 1.34$  эВ для Si(001),  $E_{SiSi} = 1.63$  эВ для Si(111),  $E_{ex} = 2.49$  эВ для Si(001),  $E_{ex} = 2.86$  эВ для Si(111),  $E_{dex} = 1.5$  эВ для Si(001),

$E_{dex} = 1.67$  эВ для Si(111). Здесь:  $E_{eq}$  – энергия примеси в изломе,  $E_{SiSi}$  – энергия активации отрыва атома Si из излома.

Как видно на Рис1., данные зависимости демонстрируют два характерных температурных режима сегрегации: режим кинетических ограничений ( $r$  растёт с ростом  $T$ ) и так называемый равновесный режим ( $r$  убывает с ростом  $T$ ). При этом температура перехода между режимами сегрегации смещена для Si(111) примерно на 150-170 °С в сторону более высоких температур по сравнению с Si(001).

Увеличение по отдельности энергий активации прямых переходов примеси из адсорбционного слоя в поверхностный слой и обратно ( $E_{ex}$  и  $E_{dex}$ ) приводит к увеличению  $r(T)$  в отсутствие смещения и к смещению в сторону высоких температур с понижением  $r(T)$ , соответственно. При одновременном увеличении энергий  $E_{ex}$  и  $E_{dex}$  и корректировке коэффициента  $K_d$  за счёт увеличения энергии активации отрыва атома Si из «чистого» излома на террасу имеется сдвиг зависимости  $r(T)$ , представленный на рис.1.

Таким образом, сдвиг зависимости  $r(T)$  при переходе от Si(001) к Si(111) может быть связан с различной структурой этих поверхностей, обуславливающей различие барьеров переходов атомов примеси из адсорбционного слоя в поверхностный слой, барьеров перехода примеси из поверхностного слоя в адсорбционный слой и энергий активации отрыва атома Si из излома.

#### Литература

1. Jorke H. Surface segregation of Sb on Si(100) during molecular beam epitaxy growth // Surf. Sci. – 1988. –V.193. - №3. – P.569–578.
2. Юрасов Д.В., Дроздов М.Н., Шмагин В.Б., Новиков А.В. Исследование сегрегации сурьмы при эпитаксиальном росте на подложках Si с различной кристаллографической ориентацией // Физика и техника полупроводников. – 2017. – Т.51. – №12. – С.1611.
3. Эрвье Ю.Ю. О накоплении примеси в адсорбированном слое в процессе легирования при молекулярно-лучевой эпитаксии // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники. – 2013. - №2. – с. 4 – 10.

**Синтез лигатуры Al-Er и ее влияние на структуру и физико-механические свойства сплава  
AMg5**

Кахидзе Н. И., Синкина И. Л., Селиховкин М. А.

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А. Б. Ворожцов

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: kakhidze.n@yandex.ru

Алюминиевые сплавы лидируют по объемам производства среди цветных металлов за счет сочетания высокой прочности и низкого удельного веса [1]. Сплавы на основе системы алюминий-магний получили широкое распространение в авиакосмической отрасли, повышенные прочностные характеристики которых обеспечиваются за счёт микролегирования скандием. Механизм упрочнения скандием сплавов Al основывается на образовании первичных интерметаллидов  $Al_3Sc$  размером 1–2 мкм или вторичных интерметаллидов размером 20–30 нм. Первичные интерметаллиды образуются в расплаве и способствуют измельчению зёрненной структуры, вторичные интерметаллиды выделяются из твёрдого раствора при термической обработке сплава или при деформационной обработке, что приводит к упрочнению за счёт дислокационных механизмов. Повышение прочностных свойств скандийсодержащих алюминиевых сплавов достигается при содержании в сплаве до 0.3 мас. % Sc, что приводит к увеличению себестоимости сплава в 5 раз [2]. Кратное увеличение себестоимости скандийсодержащих сплавов ограничивает сферы их применения, в связи с чем проводятся научные исследования по частичному или полному замещению скандия на близкие редкоземельные металлы (РЗМ), например, эрбий. Эрбий образует с алюминием фазы  $Al_3Er$ , которые аналогично могут влиять на прочностные свойства алюминиевых сплавов [3], рыночная стоимость эрбия практически в 30 раз ниже цены скандия, что делает эрбий перспективным элементом в качестве легирующего компонента алюминиевых сплавов.

В связи с разностью температур плавления алюминия (660 °С) и эрбия (1529 °С) для легирования необходимо предварительно синтезировать лигатуру Al-Er. Одним из способов получения лигатур Al-РЗМ может выступать технология гидрирования РЗМ. Перспективность гидридного метода заключается в экологичности синтеза и способности образования частиц с развитой не окисленной поверхностью, что значительно увеличивает реакционную способность частиц РЗМ. Цель данной работы заключалась в определении закономерностей влияния эрбия на структуру и физико-механические свойства алюминий-магниевого сплава марки AMg5.

Получение лигатуры Al-Er производилось в несколько этапов: получение гидрида эрбия из металлического эрбия марки ЭрМ-1 (99.99 % Er), дробление гидрида эрбия в планетарной мельнице, смешивание порошков алюминия марки АСД-0 (99.7 % Al, средний размер частиц 105 мкм) и гидрида эрбия, их прессование в пресс-форме диаметром 13 мм при давлении 390 МПа и спекание в вакуумной печи при давлении 0.5 Па со скоростью нагрева 2 град/мин до температуры 650 °С.

Сплавы AMg5 и AMg5 + Er были получены методом литья в стальной кокиль с последующей термообработкой, исследовались в литом и деформированном состоянии. В качестве исходного материала использовали сплав AMg5 (Al 91.9–94.68, Mg 4.8–5.8, Mn 0.3–0.8 и др.), сплав помещался в графитово-шамотный тигель и расплавлялся в муфельной печи при температуре 780 °С. Для получения сплава AMg5 с концентрацией эрбия в 0.3 мас. % в зеркало расплава вводилась лигатура Al-Er с

одновременным перемешиванием расплава специальным [4] смешивающим устройством в течение 2-х минут. При температуре 710 °С расплав разливался в цилиндрический стальной кокиль. Полученные отливки отжигались при 200 °С с выдержкой 14 часов и охлаждением вместе с печью. Методика получения исходного сплава без эрбия была аналогична. Деформационную обработку полученных сплавов проводилась на лабораторном прокатном стане до утоньшения образцов с 11 до 2 мм.

Структурные исследования производились методами растровой и оптической микроскопии. Элементный состав изучался методами рентгенофлуоресцентного анализа. Плотность сплавов измерялась методом гидростатического взвешивания. Прочностные параметры полученных сплавов были получены измерением твёрдости по методу Бринелля и по результатам одноосного растяжения плоских образцов. Результаты получены с использованием оборудования ТМЦКП ТГУ

Полученная лигатура имеет композитную структуру, состоящую из монолитной алюминиевой матрицы и включений частиц Al-Er неправильной формы. Средний размер зерна алюминия в лигатуре составил  $212 \pm 93$  мкм. Средний размер включений имеет бимодальное распределение: 39.3 и 1.4 мкм.

Установлено, что в лигатурах Al-Er, полученных по гидридной технологии, содержатся частицы крупного размера (~ 39.3 мкм), переходящие в объём получаемых сплавов. Выявлено, что введение эрбия в составе полученной лигатуры не привело к измельчению зёрновой структуры. Также выявлено, что введение 0.3 мас. % эрбия не влияет на значения предела текучести и приводит к повышению значений предела прочности со 151 до 187 МПа и максимальных деформаций до разрушения с 6.4 до 9.6 %. Деформационная обработка методом продольного проката сплава АМг5 приводит к повышению значений предела текучести с 65 до 100 МПа, предела прочности со 151 до 271 МПа и максимальных деформаций до разрушения с 6.4 до 39.6 %. Также деформационная обработка сплава АМг5 + Er приводит к повышению значений предела текучести с 64 до 107 МПа, предела прочности со 187 до 281 МПа и максимальных деформаций до разрушения с 9.6 до 45.2 %.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-00060). Работа выполнена с использованием оборудования Томского регионального центра коллективного пользования ТГУ.

#### Литература

1. Ciner C., Lucey B., Yarovaya L. Spillovers, integration and causality in LME non-ferrous metal markets // *Journal of Commodity Markets*. – 2020. – V. 17. – P. 100079.
2. Lin S., Nie Z., Huang H., Li B. Annealing behavior of a modified 5083 aluminum alloy // *Materials & Design*. – 2010. – V. 31. – № 3. – P. 1607–1612.
3. Vorozhtsov S., Minkov L., Dammer V., Khrustalyov A., Zhukov I. et al. Ex situ introduction and distribution of nonmetallic particles in aluminum melt: modeling and experiment // *JOM*. – 2017. – V. 69. – № 12. – P. 2653–2657.
4. Пат. 2758953 РФ. В01F 7/18. Устройство для смешивания расплавов легких металлов с микропорошками тугоплавких частиц и волокон / А.Б. Ворожцов, В.Х. Даммер, В.А. Архипов, И.А. Жуков, М.Г. Хмелева, Н.И. Кахидзе; Заявлено 10.03.2021; Опубл. 03.11.2021, Бюл. № 31. – 12 с.

**СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В РЕАКТОРНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ЭК-164 В  
РЕЗУЛЬТАТЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК**

А.В. Ким

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. И.Ю. Литовченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: aneeta.2001@list.ru

Аустенитная коррозионноустойчивая сталь ЭК-164 в настоящее время применяется в качестве материала для оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов) реакторов на быстрых нейтронах. Для этих целей сталь используют в холоднокатанном состоянии, особенности микроструктуры и механические свойства которого изучены в [1]. Термомеханические обработки являются одним из способов модификации микроструктуры и повышения прочностных свойств сталей. В настоящей работе в продолжение исследований влияния высокотемпературных термомеханических обработок (ВТМО) на микроструктуру и механические свойства стали ЭК-164 [2], изучаются особенности дислокационной субструктуры и карбидной подсистемы стали после ВТМО.

Объектом исследования является хромоникелевая стабильная аустенитная сталь ЭК-164 (07X16H19M2Г2БТР). Исходное состояние получено закалкой от  $T = 1100$  °С с выдержкой 1 час. ВТМО проводили по двум режимам: пластическая деформация прокаткой с нагревом до 1100 °С со степенью деформации  $\approx 50$  % за 1 проход (ВТМО-1); ВТМО-1 с последующей деформацией прокаткой с нагревом до 900 °С с общей степенью деформации  $\approx 50\%$  за 1 проход (ВТМО-2). Особенности гетерофазной микроструктуры стали изучали на просвечивающем электронном микроскопе Philips CM-12.

На основании анализа не менее 5 электронно-микроскопических изображений в исходном состоянии и после ВТМО были проведены оценки плотности дислокаций методом секущих [3]. Согласно этим оценкам, плотность дислокаций в исходном состоянии составляет  $\rho \approx 1.5 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup>, после ВТМО-1 она возрастает до  $\rho \approx 2.1 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup>, после ВТМО-2 увеличивается до  $\rho \approx 4.6 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup> (Рис.1).

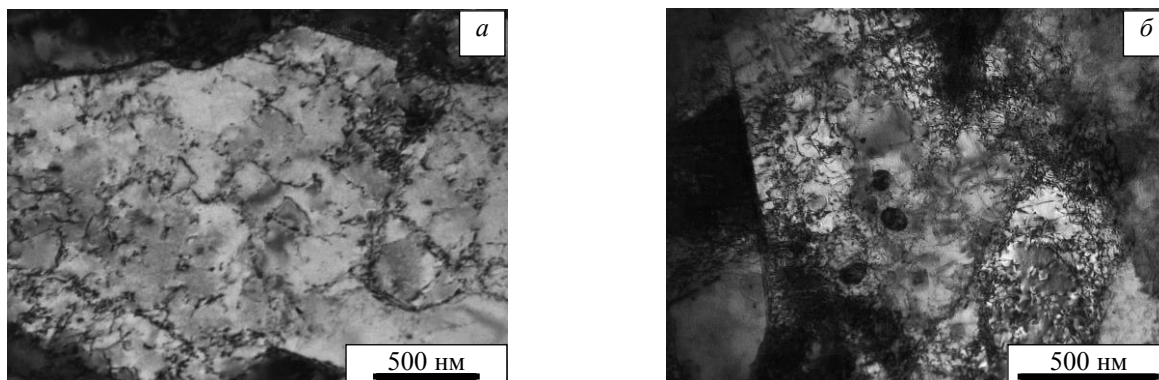


Рис. 1. Микроструктура стали: а – ВТМО-1; б – ВТМО-2.

Проведенные ранее исследования [2] показали, что в стали ЭК-164 наблюдаются мелко- и грубодисперсные карбиды типа MX (где М – V, Ti или Nb, X – C или N). На основании анализа электронно-микроскопических изображений (не менее 5 участков) были проведены оценки объемных долей грубодисперсных (размерами более 50 нм) и мелкодисперсных (размерами менее 50 нм) карбидных фаз после ВТМО (Рис.2). Объемная доля частиц рассчитана по формуле (1).



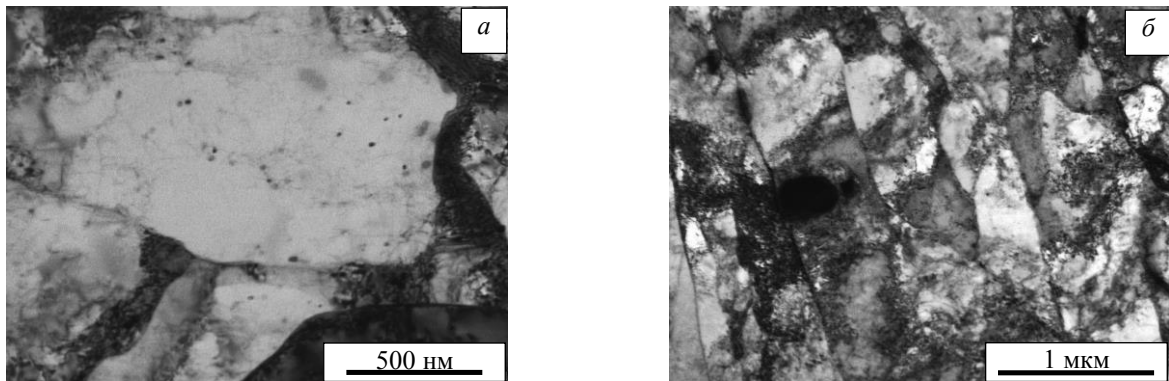


Рис. 2. Микроструктура стали: а – VTMO-1; б – VTMO-2.

$$f = \frac{V_{д.ф.}}{V_{д.с.}} (100\%) \quad (1),$$

где  $V_{д.ф.}$  – объем дисперсной фазы, как сумма объемов всех наноразмерных частиц (для упрощения оценок частицы считали сферическими),  $V_{д.с.}$  – общий объем дисперсной системы в исследованном участке фольги как площадь участка, умноженная на толщину фольги (упрощенно принята  $\approx 0,1$  мкм).

Следует отметить, что карбидные фазы распределены неоднородно в объеме тонких фольг, встречаются участки с относительно высокой их плотностью и участки, где частицы практически отсутствуют. Согласно [4], объемная доля грубодисперсных карбидных частиц в результате VTMO не изменяется по сравнению с исходным состоянием. Оценки, проведенные в настоящей работе, показали, что объемная доля грубодисперсных частиц составляет  $f \approx 1.9\%$ , при этом объемная доля мелкодисперсных частиц после VTMO составляет 0.1-0.3%. Мелкодисперсные карбидные частицы вносят вклад в упрочнение стали по механизму Орована.

Таким образом, проведенные высокотемпературные термомеханические обработки обеспечивают повышение плотности дислокаций в  $\approx 1.4$  раза (после VTMO-1) и в  $\approx 3$  раза (после VTMO-2) по сравнению с исходным состоянием. Показано, что объемная доля мелкодисперсных частиц после VTMO составляет 0.1-0.3%. Повышенная плотность дислокаций и мелкодисперсные частицы типа MX способствуют повышению прочностных свойств аустенитной стали ЭК-164 после VTMO.

### Литература

1. Аккузин С.А., Литовченко И.Ю. Влияние температуры пластической деформации на микроструктуру и механические свойства аустенитной стали ЭК-164 // Вектор науки Тольяттинского государственного университета. 2020. №2. С. 7–14.
2. Akkuzin S.A., Litovchenko I.Yu., Polekhina N.A., Almaeva K.V., Kim A.V., Moskvichev E.N., Chernov V.M. Effect of multistage high temperature thermomechanical treatment on the microstructure and mechanical properties of austenitic reactor steel // Metals. 2022. Vol. 12, № 1. P. 63-1-63-16.
3. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения / И.И. Новиков – М.: Металлургия, 1975. – 208 с.
4. Аккузин С.А. Влияние деформации и кратковременных высокотемпературных отжигов на микроструктуру и механические свойства аустенитной стали 02X17H14M3 / С.А. Аккузин, И.Ю. Литовченко // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т. 62. – № 8. – С. 190 – 195.

**ОСОБЕННОСТИ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ПРИ  
ЭПИТАКСИИ Si/Si(100) И Ge/Si(100)**

О.И. Кукунов, В.В. Дирко

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.П. Коханенко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: kukenov1999@gmail.com

Полупроводниковые наноструктуры играют ключевую роль в развитии современной наноэлектроники. Поскольку кремний является наиболее распространённым полупроводником, особое внимание уделяется структурам на его основе. При молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в условиях сверхвысокого вакуума можно получать бездефектные тонкие эпитаксиальные слои высокой чистоты, которые имеют резкое изменение состава на границе и сложный профиль легирования [1]. Сверхвысоковакуумная установка МЛЭ «Катунь-100» обладает следующим набором устройств: система вакуумных насосов для поддержания сверхвысокого вакуума на уровне  $10^{-10}$  торр в процессе роста материалов; электронно-лучевыми испарителями; управляемым высокотемпературным нагревателем подложки; кварцевый измеритель толщины (КИТ) для определения скорости синтеза; ИК пирометр для определения температуры подложки; масс-спектрометр для определения давления остаточных газов в камере; система дифракции быстрых электронов (ДБЭ).

Метод дифракции быстрых электронов (ДБЭ) дает информацию об атомной структуре поверхности и используется в процессе эпитаксиального роста [2]. Электронная пушка ДБЭ посылает поток электронов на подложку под малым скользящим углом. Поскольку длина волны электрона соизмерима с параметрами кристаллической решётки синтезируемой структуры, в результате отражения электронов от поверхности на люминесцентном экране формируется картина дифракции. С помощью компьютерных программ строятся зависимости интенсивности от времени, как это показано на рис. 1.

Выполнен ряд экспериментов по синтезу Si/Si(100) и Ge/Si(100). Исследовался ступенчатый характер роста монослоёв кремния и германия. На рисунке 1 приведена зависимость интенсивности от времени при направлении [110] электронного потока пушки ДБЭ к подложке. Эпитаксия происходила при температуре 440 °С.

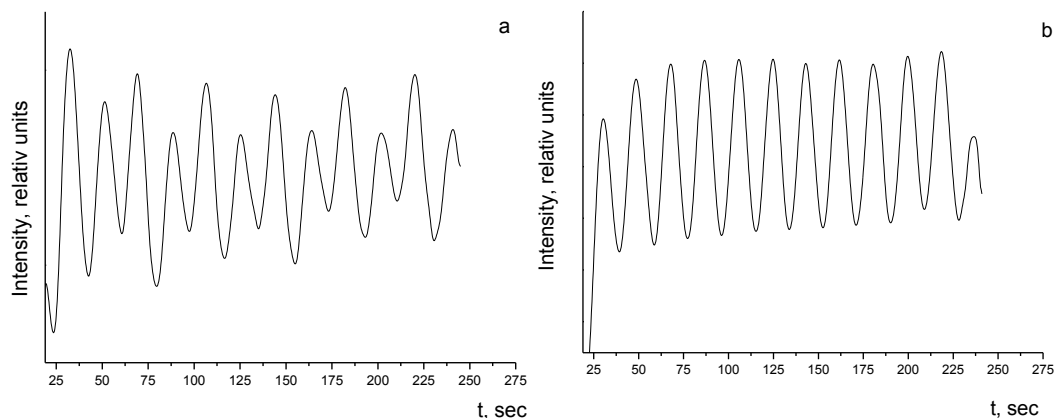


Рис. 1. Изменение интенсивности дифракционной картины во времени, вблизи центрального рефлекса «00» при синтезе Si/Si(100) в направлении электронного пучка: а – [110]; б – [100]

На рисунке 1а распределение интенсивности представлено в виде бимодального характера осцилляций. Величина максимума соответствует виду формирования сверхструктуры на поверхности. Меньший максимум отвечает росту сверхструктур  $2 \times 1$  (перпендикулярное направление к электронному пучку). Увеличение локальных максимумов интенсивности дифракционных картин происходит при росте сверхструктур  $1 \times 2$ . График объясняется последовательным, или ступенчатым, ростом разных типов димеров на террасе подложки при росте Si/Si(100) [3].

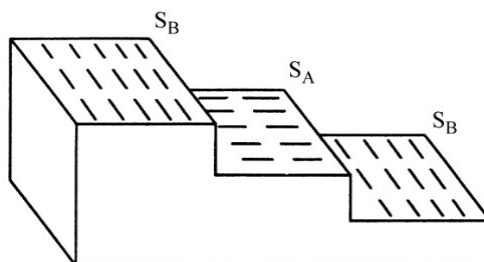


Рис.2. Принципиальная схема структуры поверхности в процессе роста.  $S_B$  - сверхструктура  $1 \times 2$ ,  $S_A$  - сверхструктура  $2 \times 1$  [3]

При переходе от большего максимума к меньшему происходит рост по сдвигу ступеней. Формируются сверхструктуры  $1 \times 2$ . Такую ступень принято называть  $S_A$ . При переходе от меньшего к большему рост происходит в виде образования 2D островков. На ступени  $S_B$  формируются сверхструктуры  $2 \times 1$ . Причём, островковый рост происходит быстрее, чем рост по сдвигу ступеней. Полученная в результате анализа поверхности методом ДБЭ скорость роста составила  $0,053 \pm 4,7\%$  МС/сек.

По рисунку 1b можно заметить, что интенсивность локальных максимумов дифракционной картины находится на одном уровне. В данном направлении дифракции невозможно различить максимумы пиков при росте различных димеров, поскольку они все повёрнуты под углом 45 градусов к электронному пучку и рассеивание электронов на сверхструктурах одинаково. Скорость роста эпитаксиальной пленки составила  $0,053 \pm 1,5\%$  МС/сек. Можно заметить, что скорость роста определяется с меньшей погрешностью. Следовательно, для создания, например, твёрдого раствора, лучше использовать это направление.

Следующим шагом в изучении ступенчатого роста стал эксперимент по синтезу Ge/Si(100) при температуре 290 °С. Изменения интенсивности вблизи рефлекса «00» были неинформативными, поэтому анализ производился по рефлексу «01» (рисунок 3).

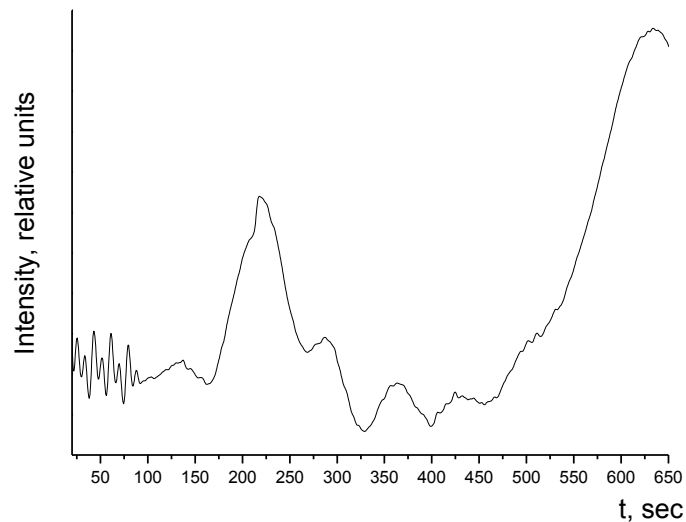


Рис. 3. Изменение интенсивности дифракционной картины во времени, вблизи рефлекса «01» при синтезе Si/Si и Ge/Si(100) в направлении [110]

Осцилляции до 95 секунды на рисунке 3 соответствуют росту Si/Si(100). Как в случае с рисунком 1а, здесь наблюдается бимодальный характер осцилляций интенсивности. На 140 секунде эксперимента началось напыление чистого германия. По размерам максимумов судить о бимодальном характере затруднительно, поскольку в исследуемый участок вносят вклад наложение других особенностей дифракционных картин. Анализ графика показал, что присутствует два чередующихся периода при росте Ge/Si(100) как в случае с эпитаксией Si/Si(100). Следовательно, имеем бимодальный характер осцилляций. Скорость роста германия составила  $0,014 \pm 5,2$  % МС/сек. После формирования четвёртого монослоя германия на 475 секунде эксперимента начался переход от 2D к 3D поверхности.

Таким образом, в ходе исследования роста эпитаксиальных плёнок кремния методом дифракции быстрых электронов, определён принципиально разный характер колебаний интенсивности дифракции при различных направлениях. Зависимость интенсивности от времени при эпитаксии в направлении [100] позволяет определить скорость роста с высокой точностью ( $0,053 \pm 1,5$ % МС/сек). Анализируя рост эпитаксиальных плёнок в направлении [110] можно не только рассчитать скорость синтеза ( $0,053 \pm 4,7$ % МС/сек), но и увидеть чередующееся формирование димеров. Однако, возрастает погрешность измерений. При анализе роста германия на подложке из кремния в направлении [110] также удалось определить ступенчатый рост димеров. Скорость роста Ge/Si(100) составила  $0,014 \pm 5,2$  % МС/сек. Переход к 3D поверхности начался после зарастания 4 монослоёв Ge.

#### Литература

1. Izhin I.I., Fitsych O.I., Voitsekhovskii A.V., et al. Interaction between islands in kinetic models of epitaxial growth of quantum dots // *Applied Nanoscience*. – 2019. P. 1-7.
2. Lozovoy K.A., Korotaev A.G. Kokhanenko A.P., et al. Kinetics of epitaxial formation of nanostructures by Frank–van der Merwe Volmer–Weber and Stranski–Krastanow growth modes // *Surface and Coatings Technology*. – 2020. – V. 384. – P. 125289 (1–5).
3. Berrie C.L., Leone S.R. Observation of monolayer and bilayer period RHEED oscillations during epitaxial growth of Ge on Ge(100) // *Journal of Crystal Growth*, - 2000. - V. 216. - P. 159-170.

**МОДЕЛЬ ВСТРАИВАНИЯ АТОМОВ В ИЗЛОМ ПРИ РОСТЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ  
 СОЕДИНЕНИЙ  $A_xB_{1-x}D$  ИЗ ЧЕТВЕРНОГО РАСТВОРА**

Курдюков Р.В.

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Эрвье Ю. Ю.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: romank997@mail.ru

В последние годы большой интерес вызывает синтез нитевидных нанокристаллов тройных полупроводниковых соединений  $A_xB_{1-x}D$  ( $Al_xGa_{1-x}As$ ,  $In_xGa_{1-x}As$ ,  $In_xAl_{1-x}Sb$  и др.), позволяющий создавать квазиодномерные наноструктуры с заданной шириной запрещённой зоны на кремниевых подложках. Для выращивания таких нанокристаллов необходимо знание связи состава нанокристалла с составом жидкой капли-катализатора. Существующие предположения о виде зависимостей потоков элементов III группы в кристалл и их отношения от состава капли:  $\bar{G}_A = K_A c_D c_A$ ,  $\bar{G}_B = K_B c_D c_B$  и  $\bar{G}_A/\bar{G}_B \sim c_A/c_B$ , где  $c_\beta$  - концентрация растворенных в капле атомов сорта  $\beta$  ( $\beta = A, B, D$ ) [1], могут быть неверны в случае роста кристаллов химических соединений, в том числе тройных полупроводников  $A_xB_{1-x}D$ . Структурная единица такого кристалла – это пара атомов A (или B) и D и, соответственно, рост кристалла предполагает формирование пар. Однако нужно иметь в виду, что согласно основным принципам теории послойного роста формирование структурных единиц в основном происходит в изломах на ступенях. Излом на ступени кристалла химического соединения имеет несколько мест для присоединения атомов. Поступательное движение излома представляет собой процесс последовательного необратимого заполнения мест в изломе атомами, в результате случайного процесса присоединения атомов из жидкой фазы к излому и отрыву от него.

Рассмотрим излом, имеющий два места для встраивания атомов: 1 – место для атомов III группы (A и B), 2 – место для атомов V группы (D), в соответствии с решёткой кристалла III-V. Движение излома происходит путём заполнения этих мест в циклической последовательности 1-2-1-2-... . В этом случае, движение излома подобно росту цепочки сополимера, в которой все четные узлы заняты строго атомами D, а нечетные – атомами A или B, или наоборот. При постоянной концентрации изломов,  $N_k$ , полные потоки кристаллизующихся атомов A и B равны  $\bar{G}_A = N_k G_A$  и  $\bar{G}_B = N_k G_B$ , соответственно, где  $G_A = \theta_2 \omega_{DA}^+ U_{DA}$  и  $G_B = \theta_2 \omega_{DB}^+ U_{DB}$  - потоки в расчете на один излом. Здесь  $\theta_2$  - доля изломов с заполненными местами типа 2 (по предположению, их могут занимать только атомы D и к следующим за ними местами типа 1 присоединяются атомы A или B),  $\omega_{D\alpha}^+$  - элементарная частота присоединения атома сорта  $\alpha$  ( $\alpha = A, B$ ) к такому излому,  $U_{D\alpha}$  - вероятность сохранения пары атомов Da в процессе роста [2,3]. Вероятности сохранения  $U_{D\alpha}$  удовлетворяют нелинейной системе уравнений:

$$U_{DA} = p_{DAD} [U_{AD} + (1 - U_{AD}) U_{DA}]$$

$$U_{DB} = p_{DBD} [U_{BD} + (1 - U_{BD}) U_{DB}]$$

$$U_{AD} = p_{ADA} [U_{DA} + (1 - U_{DA}) U_{AD}] + p_{ADB} [U_{DB} + (1 - U_{DB}) U_{AD}]$$

$$U_{BD} = p_{BDA} [U_{DA} + (1 - U_{DA}) U_{BD}] + p_{BDB} [U_{DB} + (1 - U_{DB}) U_{BD}]. \quad (1)$$

Здесь  $p_{\alpha\beta\gamma} = \omega_{\beta\gamma}^+ / (\omega_{\alpha\beta}^- + \sum_{\gamma} \omega_{\beta\gamma}^+)$  - вероятность того, что первым событием в изломе, оканчивающимся парой  $\alpha\beta$ , будет присоединение атома сорта  $\gamma$  ( $\omega_{\alpha\beta}^-$  - частота отрыва атома сорта  $\beta$ ). При заданных элементарных частотах присоединения и отрыва решение уравнений (1) позволяет найти вероятности  $U_{D\alpha}$ . Элементарные частоты связаны с концентрациями компонентов в маточной среде. В случае достаточно разбавленного раствора компонентов А, В и D, для элементарных частот можно записать  $\omega_{\alpha\beta}^+ = k_{\alpha\beta}^+ c_{\beta}$ , где  $k_{\alpha\beta}^+$  - константы скоростей присоединения атомов к изломам. Рассмотрим два частных случая, в которых уравнения (1) линейны и решаются аналитически:

А) Допустим, что атомы А и В могут как присоединяться к излому, так и отрываться от него, в то время как отрыв атома D от излома невозможен. Тогда  $U_{AD} = U_{BD} = 1$  и движение излома в целом происходит необратимо, за исключением отступления на одну позицию при отрыве атома А или В. В этом случае использование уравнений (1) и формализма работы [3] позволяет выразить необратимые потоки атомов А и В в излом через элементарные частоты:

$$G_A = \frac{\omega_{AD}^+ \omega_{DA}^+}{\omega_{DA}^- + \omega_{AD}^+ + \omega_{DA}^+ + \frac{(\omega_{DA}^- + \omega_{AD}^+) \omega_{DB}^+}{\omega_{DB}^- + \omega_{BD}^+}},$$

$$G_B = \frac{\omega_{BD}^+ \omega_{DB}^+}{\omega_{DB}^- + \omega_{BD}^+ + \omega_{DB}^+ + \frac{(\omega_{DB}^- + \omega_{BD}^+) \omega_{DA}^+}{\omega_{DA}^- + \omega_{AD}^+}}. \quad (2)$$

При этом отношение полных потоков равно:

$$\frac{\bar{G}_A}{\bar{G}_B} = \frac{\omega_{DA}^+ \omega_{AD}^+ (\omega_{BD}^+ + \omega_{DB}^-)}{\omega_{DB}^+ \omega_{BD}^+ (\omega_{AD}^+ + \omega_{DA}^-)} \quad (3)$$

Из (3) следует, что в случае эффективного блокирования атомов А и В в изломе атомами D, когда  $\omega_{AD}^+ \gg \omega_{DA}^-$  и  $\omega_{BD}^+ \gg \omega_{DB}^-$ , отношение потоков А и В в кристалл пропорционально отношению концентраций элементов III группы и не зависит от концентрации элемента V группы,  $c_D$ . Здесь атомы А и В непосредственно конкурируют за место в изломе. При плохом блокировании отношение  $\bar{G}_A / \bar{G}_B$  зависит от  $c_D$ . Данная зависимость существенна, если один из этих компонентов гораздо лучше блокируется в изломе атомами D, чем другой компонент. Например, если  $\omega_{AD}^+ \geq \omega_{DA}^-$  и  $\omega_{BD}^+ \ll \omega_{DB}^-$ , то  $\bar{G}_A / \bar{G}_B \sim c_A / (c_B c_D)$ . Здесь увеличение концентрации элемента V группы не влияет на сохранение в изломе атомов А, но способствует сохранению атомов В, и, тем самым, уменьшает конкурентные преимущества атомов А. Кроме того, из выражений (2) следует, что соотношения  $\bar{G}_A = K_A c_D c_A$  и  $\bar{G}_B = K_B c_D c_B$  возможны лишь при больших частотах отрыва атомов А и В из излома. При больших частотах присоединения атомов А и В к атому D, указанные соотношения не выполняются. Это связано с тем, что увеличение данных частот приводит к уменьшению доли изломов типа 2. В случае  $\omega_{AD}^+ \geq \omega_{DA}^-$  и  $\omega_{BD}^+ \ll \omega_{DB}^-$  при больших частотах присоединения атомов А имеем  $\bar{G}_A \sim c_D$  и  $\bar{G}_B \sim c_D c_B / c_A$ .

Б) Пусть присоединение атомов А и В к излому происходит необратимо ( $U_{DA} = U_{DB} = 1$ ), а атомы D могут как присоединяться к излому, так и отрываться от него. Здесь, как и в предыдущем случае, движение излома происходит необратимо с отступлением на одну позицию при отрыве атома D. Вычисления дают следующие выражения для потоков атомов А и В в излом:

$$G_A = \frac{\omega_{AD}^+ \omega_{DA}^+}{\omega_{AD}^+ \left(1 + \frac{\omega_{DB}^+}{\omega_{BD}^+} + \frac{\omega_{BD}^- \omega_{DB}^+}{\omega_{BD}^+ (\omega_{DA}^+ + \omega_{DB}^+)}\right) + \omega_{DA}^+ \left(1 + \frac{\omega_{AD}^-}{\omega_{DA}^+ + \omega_{DB}^+}\right)},$$

$$G_B = \frac{\omega_{BD}^+ \omega_{DB}^+}{\omega_{BD}^+ \left(1 + \frac{\omega_{DA}^+}{\omega_{AD}^+} + \frac{\omega_{AD}^- \omega_{DA}^+}{\omega_{AD}^+ (\omega_{DA}^+ + \omega_{DB}^+)}\right) + \omega_{DB}^+ \left(1 + \frac{\omega_{BD}^-}{\omega_{DA}^+ + \omega_{DB}^+}\right)}. \quad (4)$$

В данном случае отношение потоков всегда пропорционально отношению концентраций атомов А и В и не зависит от концентрации атомов D:  $\overline{G_A}/\overline{G_B} \sim c_A/c_B$ . Однако, из выражений (4) следует, что соотношения  $\overline{G_A} = K_A c_D c_A$  и  $\overline{G_B} = K_B c_D c_B$  выполняются лишь при следующих условиях:

а)  $\omega_{DA}^+ \gg \omega_{DB}^+$  и  $\omega_{AD}^- \gg \omega_{DA}^+ + \omega_{AD}^+ \left(1 + \frac{\omega_{DB}^+}{\omega_{BD}^+} + \frac{\omega_{DB}^+ \omega_{BD}^-}{\omega_{DA}^+ \omega_{BD}^+}\right)$ . Тогда  $\overline{G_A} \approx N_k (\omega_{AD}^-)^{-1} k_{AD}^+ k_{DA}^+ c_D c_A$  и  $\overline{G_B} \approx N_k (\omega_{AD}^-)^{-1} k_{AD}^+ k_{DB}^+ c_D c_B$  (при этом  $\overline{G_B} \ll \overline{G_A}$ ).

б)  $\omega_{DB}^+ \gg \omega_{AD}^+$  и  $\omega_{BD}^- \gg \omega_{DB}^+ + \omega_{BD}^+ \left(1 + \frac{\omega_{DA}^+}{\omega_{AD}^+} + \frac{\omega_{DA}^+ \omega_{AD}^-}{\omega_{DB}^+ \omega_{AD}^+}\right)$ . Здесь  $\overline{G_A} \approx N_k (\omega_{BD}^-)^{-1} k_{BD}^+ k_{DA}^+ c_D c_A$  и  $\overline{G_B} \approx N_k (\omega_{BD}^-)^{-1} k_{BD}^+ k_{DB}^+ c_D c_B$  (при этом  $\overline{G_B} \gg \overline{G_A}$ ).

По сравнению с предыдущим случаям, условия более жёсткие, так как здесь атомы А и В непосредственно конкурируют за место в изломе, независимо от интенсивности отрыва атома D.

Таким образом, одновременное выполнение соотношений  $\overline{G_A} = K_A c_D c_A$ ,  $\overline{G_B} = K_B c_D c_B$  и  $\overline{G_A}/\overline{G_B} \sim c_A/c_B$  возможно лишь при определённых ограничениях на значения элементарных частот присоединения и отрыва. В приведённых примерах необходимым (но не достаточным) условием является интенсивный отрыв атома от излома. При необратимом встраивании атомов в излом соотношение  $\overline{G_A}/\overline{G_B} \sim c_A/c_B$  выполняется, а соотношения  $\overline{G_A} = K_A c_D c_A$  и  $\overline{G_B} = K_B c_D c_B$  не выполняются. Это связано с тем, что встраивание атомов данного сорта влияет на долю мест в изломах, пригодных для встраивания атомов другого сорта, и с конкуренцией атомов А и В за место в изломе.

### Литература

1. Dubrovskii V.G. Understanding the vapor-liquid-solid growth and composition of ternary III-V nanowires and nanowire heterostructures // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2017. – V.50. – P.453001.
2. Чернов А.А. Рост цепей сополимеров и смешанных кристаллов – статистика проб и ошибок // УФН. – 1970. - Т.100, N2. – С.277-328.
3. Hervieu Yu.Yu., Ruzaiкин M.P. Growth and doping of semiconductor compounds: kinetics of incorporation processes at kink sites // Growth of Crystals / Eds. E.I.Givargizov, A.M.Melnikova. – Kluwer Academic (Consultant Bureau), NY, Boston, London, Moscow, 2002. – V.21. – P.1-9.

**ВЛИЯНИЕ СТАРЕНИЯ В МАРТЕНСИТЕ ПОД НАГРУЗКОЙ НА ПРОЯВЛЕНИЯ  
ДВУСТОРОННЕГО ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ И ФЕРРОЭЛАСТИЧНОСТИ В  
ГЕТЕРОФАЗНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА  $\text{Ni}_{48}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$**

И.Д. Курлевская, А.Б. Тохметова

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: kurl.irina@yandex.ru

Сплавы Гейслера представляют собой семейство уникальных материалов, в которых за счёт термоупругих мартенситных превращений (МП) возможно получение значительных обратимых деформаций при проявлении эффекта памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичности (СЭ). Для сплавов NiFeGaCo, испытывающих последовательность  $L2_1(B2)$ -10M/14M- $L1_0$  МП, максимально возможные теоретически рассчитанные деформации составляют до -6,2 % при сжатии и +13,5 % при растяжении, что делает данные сплавы перспективными для широкого применения в качестве актуаторов, датчиков и исполнительных устройств [1]. В последнее время ведутся активные поиски методик, позволяющих расширить функциональные свойства и навести двусторонний эффект памяти формы (ДЭПФ) и ферроэластичность (ФЭ). ДЭПФ заключается в проявлении обратимых деформации лишь при охлаждении/нагреве без приложения внешних напряжений, что может позволить значительно упростить механизм устройств, в основе работы которых лежит ЭПФ. Получение обратимой деформации при ФЭ связано с процессами обратимой переориентации мартенситных вариантов за счет движения двойниковых границ в циклах нагрузка/разгрузка. В ряде исследований, проведённых на однофазных материалах, показано, что одним из наиболее эффективных способов наведения ДЭПФ и ФЭ является старение в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой (СМН), основанное на эффекте стабилизации мартенсита за счёт происходящих в материале диффузионных процессов [2-5]. Актуальным вопросом является изучение влияния СМН на проявление ДЭПФ и ФЭ на гетерофазных материалах, демонстрирующих за счёт наличия частиц лучшую прочность, пластичность и циклическую стабильность свойств. Поэтому целью данной работы является выбор режима СМН и исследование его влияния на проявление ДЭПФ и ФЭ в гетерофазных монокристаллах сплава  $\text{Ni}_{48}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ .

Монокристаллы  $\text{Ni}_{48}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$  выращены методом Бриджмена в атмосфере инертного газа. В результате высокотемпературного отжига при  $T = 1373$  К с выдержкой 0,5 ч. с последующей закалкой в воду получено гетерофазное состояние с объёмной долей частиц  $\gamma$ -фазы (ГЦК-решётка)  $f \approx 23 (\pm 0,3)$  % и размерами до  $\approx 73$  мкм. Основываясь на предыдущих исследованиях, для проведения СМН была выбрана [110]-ориентация ( $\epsilon_{cr} = -6,2$  %), старение вдоль которой способствует наблюдению растягивающих деформаций при ДЭПФ вдоль [001]-направления ( $\epsilon_{cr} = +13,5$  %). Погрешность измерений при изучении ДЭПФ и ФЭ составляет  $\pm 0,3$  %.

Экспериментально показано, что в исходных монокристаллах ДЭПФ при охлаждении/нагреве в свободном состоянии не наблюдается. Навести ДЭПФ возможно путём СМН, при котором происходит стабилизация определённого ориентированного варианта  $L1_0$ -мартенсита в результате перераспределения атомов разного сорта и дефектов в соответствие с симметрией кристаллической структуры мартенсита. Выбор режима СМН осуществлён исходя из температурного интервала



проявления СЭ таким образом, чтобы исключить накопление необратимой деформации при максимально эффективном процессе диффузии. В работе рассмотрено 2 режима старения вдоль  $[110]_{B2}$ -ориентации:

- при температуре 398 К в течение 1 часа под нагрузкой 405 МПа при общей заданной деформации 7 % (режим I) (рис. 1 а, пунктирная линия);
- при температуре 398 К в течение 2 часов под нагрузкой 425 МПа при общей заданной деформации 8 % (режим II) (рис. 1 а, сплошная линия).

Показано, что после I режима СМН величина ДЭПФ вдоль  $[110]_{B2}$ -направления составила -2,7 % с термическим гистерезисом  $\Delta T = 52$  К. Для II режима ДЭПФ наблюдается после перегрева до 406 К в первом термоцикле, что может быть обусловлено процессами механической стабилизации в дополнение к химической, которая является основным механизмом стабилизации при I режиме. Таким образом, после II режима старения при проявлении ДЭПФ величина сжимающей обратимой деформации образца равна  $\varepsilon = -3,1$  % и сопровождается  $\Delta T = 54$  К (рис. 1 б). Экспериментально показано, что увеличение продолжительности старения в мартенсите и уровня внешних напряжений слабо влияет на характеристики ДЭПФ во втором термоцикле.

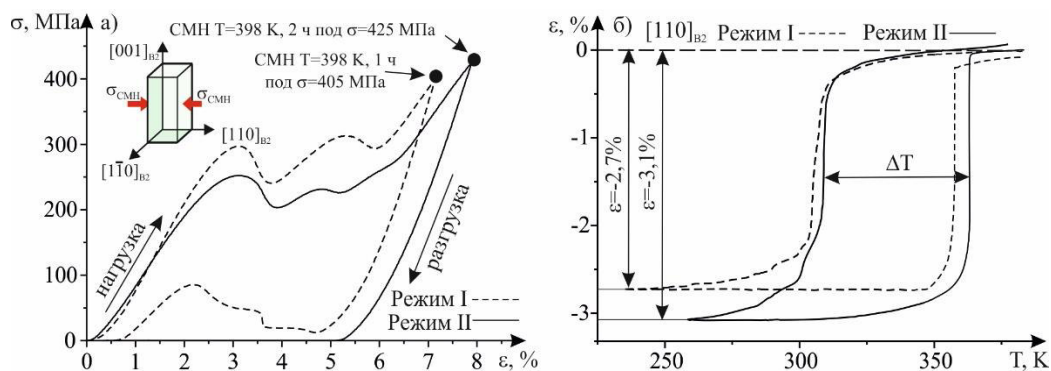


Рис. 1. Кривые, полученные на гетерофазных монокристаллах  $Ni_{48}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$  вдоль  $[110]_{B2}$ -направления в двух режимах в результате: а – СМН; б – исследования ДЭПФ

Экспериментально показано, что вдоль  $[110]_{B2}$ -направления ДЭПФ с величиной  $\varepsilon = -3,1$  % сопровождается узкими интервалами температур прямого  $\Delta_1 = 8$  К и обратного  $\Delta_2 \approx 0$  К МП, где  $A_f$  совпадает с  $A_s$  ( $\Delta_1 = M_s - M_f$ ,  $\Delta_2 = A_f - A_s$ ). Вдоль перпендикулярного старению  $[001]_{B2}$ -направления наблюдается ДЭПФ с величиной растягивающей обратимой деформации  $\varepsilon = +5,4$  % (рис. 2 а), характеризующейся термическим гистерезисом  $\Delta T = 52$  К и узкими температурными интервалами МП  $\Delta_1 = 6$  К,  $\Delta_2 \approx 0$  К, что близко к взрывному превращению.

Исследование эффекта ФЭ проводилось вдоль  $[001]_{B2}$ -направления при деформации сжатием при температурах ниже температуры мартенситного перехода  $T = 300$  К  $< M_f$ . Из полученных кривых зависимости  $\sigma(\varepsilon)$  (рис. 2 б) видно, что эффект ФЭ характеризуется низким уровнем напряжений и является не полностью обратимым ( $\varepsilon_{обр} = -3$  %). Полная обратимая деформация величиной  $\approx 9$  %, что больше максимального теоретического ресурса деформации при сжатии при ЭПФ примерно в 1,5 раза, будет реализовываться лишь в результате нагрева выше температуры  $A_f$ . Ранее на однофазных монокристаллах сплава  $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$  в результате СМН были получены эффект ФЭ вдоль  $[001]_{B2}$ -направления с обратимой деформацией до -16 % и ДЭПФ величиной +9 % [5]. Поэтому малое значение величины обратимой деформации, полученной при ДЭПФ, и необратимость эффекта ФЭ на

монокристаллах в гетерофазном состоянии могут быть связаны с наличием частиц  $\gamma$ -фазы, в отличие от однофазных материалов, и их влиянием на процессы стабилизации мартенсита при СМН, что требует проведения дальнейших исследований.

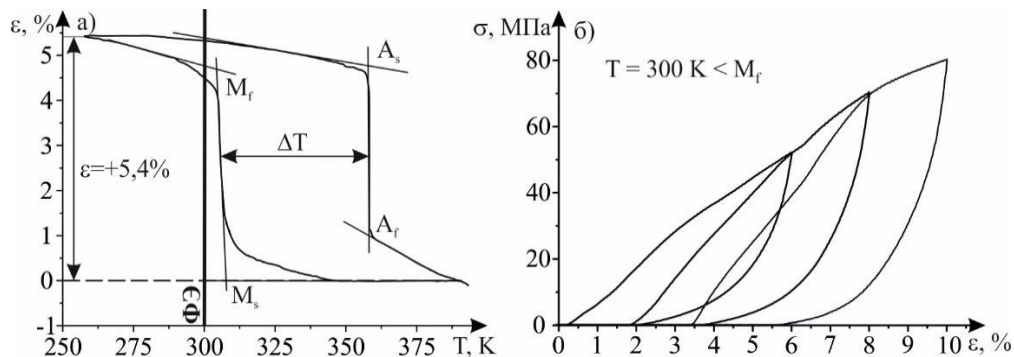


Рис. 2. Кривые зависимости вдоль  $[001]_{B2}$ -направления, полученные на гетерофазных монокристаллах  $Ni_{48}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$  после проведения СМН при проявлении: а – ДЭПФ; б – ФЭ при  $T = 300\text{ K}$

Таким образом, экспериментально получено, что в гетерофазных монокристаллах сплава  $Ni_{48}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$  возможна стабилизация мартенсита за счёт проведения СМН. Показано, что СМН вдоль  $[110]_{B2}$ -направления при  $T = 398\text{ K}$  в течение 2 часов под нагрузкой  $\sigma = 425\text{ МПа}$  является эффективным для наведения ДЭПФ с растягивающей обратимой деформацией  $+5,4\%$  вдоль перпендикулярного старению  $[001]_{B2}$ -направления. Полученный ДЭПФ характеризуется узкими температурными интервалами МП, что делает возможным применение исследуемого сплава при разработке исполнительных устройств для повышения эффективности и скорости срабатывания механизмов.

Авторы выражают благодарность Панченко Е.Ю. и Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-19-00153.

#### Литература

1. R. F. Hamilton. Inter-martensitic transitions in Ni-Fe-Ga single crystals // *Acta Mater.* 2007. – V. 55. – № 14. – P. 4867–4876.
2. Otsuka K. Mechanism of martensite aging effects and new aspects // *Mater. Sci. Eng., A.* – 2001. – V. 312. – P. 207–218.
3. Niendorf T. Martensite aging – avenue to new high temperature shape memory alloys // *Acta Mater.* – 2015. – V. 89. – P. 298–304.
4. Panchenko E. Effect of Stress-Induced Martensite Aging on Martensite Variant Reorientation Strain in NiMnGa Single Crystals // *Shape Memory and Superelasticity.* – 2020. – V. 6. – P. 29–34.
5. Panchenko E. Temperature dependence of martensite variant reorientation in stress-induced martensite aged  $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$  single crystals // *Scripta Materialia.* – 2021 – V. 194. – P. 113618.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ УСТРОЙСТВ  
НА ОСНОВЕ ПЕНТАЦЕНА.**

К.Н. Курчин

Научный руководитель: к.ф.-м.н. В.А. Новиков

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: kurchin.konstantin@yandex.ru

Использование органических плёнок в полупроводниковых устройствах представляет особый интерес ввиду того, что в подобных структурах сочетаются свойства органических и неорганических материалов. Это открывает широкий спектр возможностей для их применения, например, в транзисторных и диодных [1,2] структурах, гибких солнечных элементах и приборах, работающих в агрессивной среде (например, в космосе), где характеристики более распространённых полупроводников (например, кремния) сильно ухудшаются. В данной работе проводилось исследование влияния толщины пленки пентацена на электрофизические свойства транзисторной структуры с изолированным затвором. Для решения поставленной задачи проводилось численное моделирование выходных характеристик IGFET на базе пентацена в программной среде Sentaurus TCAD. Данный пакет позволяет проводить моделирование субмикронных приборов и симуляцию техпроцессов с целью определения их характеристик.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить ряд задач:

1. построить 2D модель МДП-транзистора с разной толщиной слоя пентацена;
2. провести численное моделирование выходных ВАХ готовой структуры;
3. провести анализ влияния толщины слоя пентацена на выходные ВАХ.

Схематическое изображение плоского МДП-транзистора приведено на рисунке 1. В качестве подложки был выбран высоколегированный кремний n-типа проводимости с концентрацией легирующей примеси  $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и геометрическими размерами  $10 \times 2 \text{ мкм}$ . Толщина слоя пентацена варьировалась в диапазоне от 25 нм до 400 нм с шагом 25 нм. Электрические контактные стока и истока были выполнены из золота толщиной 100 нм. Размеры контактов составили 1 мкм. Расстояние между стоком и истоком составило 8 мкм. Затвор был выполнен из диэлектрика  $\text{SiO}_2$  толщиной 100 нм и шириной 1 мкм независимо от толщины пленки пентацена.

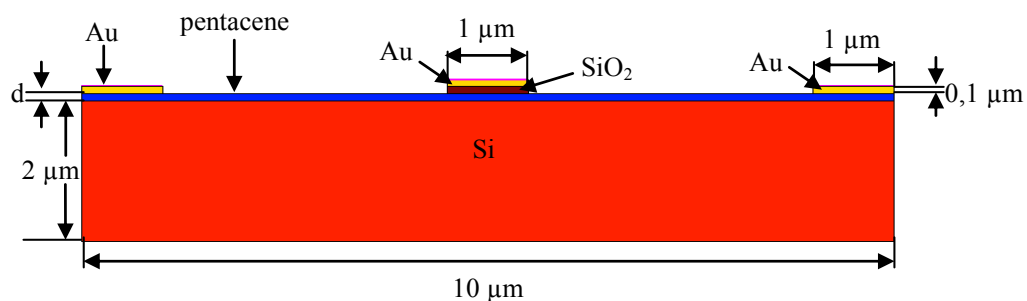


Рис. 1. Структура МДП-транзистора со слоем пентацена.

На рис.2 приведен типичный вид выходных ВАХ моделируемого транзистора. Видно, что кривая вольт-амперной характеристики смещается в сторону увеличения силы дырочного тока и имеет

типичный вид для МДП-транзистора. В области напряжений между стоком и истоком от 0 до -20 В происходит резкое изменение силы тока до области насыщения, и при дальнейшем росте напряжения сила тока практически не меняется. На рис.2 приведены ВАХ МДП-транзистора на базе пентацена при фиксированном напряжении на затворе, а на рис.3 - ВАХ при различных толщинах слоя пентацена. Видно, что при увеличении толщины слоя пентацена наблюдается резкое увеличение силы дырочного тока в области насыщения.

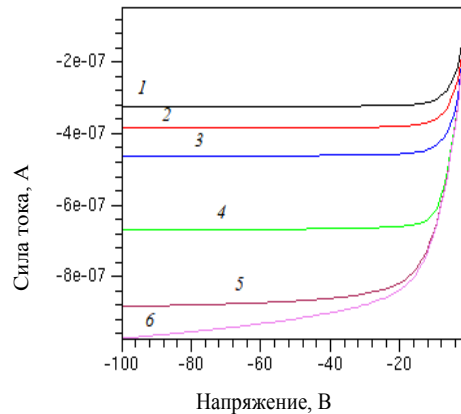


Рис. 2. Семейство выходных ВАХ МДП-транзистора на базе пентацена при различных значениях напряжения на затворе, В; кр. 1 – -1; кр. 2 – -2; кр. 3 – -3; кр. 4 – -5; кр. 5 – -7; кр. 6 – -9;

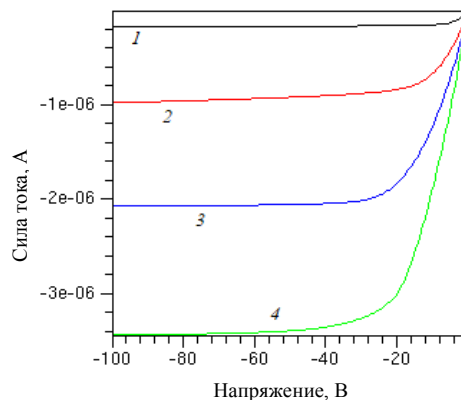


Рис. 3. ВАХ МДП-структуры с SiO<sub>2</sub> и пентаценом при фиксированном напряжении на затворе -10 В при различных значениях толщины плёнки, нм; кр. 1 – 75; кр. 2 – 100; кр. 3 – 125; кр. 4 – 150;

Анализ изменения тока насыщения (рисунок 4а) и дифференциального сопротивления (рисунок 4б) в области линейного роста выходного тока в зависимости от разности потенциалов между стоком и истоком показал нелинейный характер изменения данных параметров с толщиной слоя пентацена. Зависимость тока насыщения от толщины слоя пентацена показывает, что с увеличением толщины плёнки наблюдается увеличение тока по параболическому закону:

$$I = 1,39 \cdot 10^{-12} \cdot d^{2,95} \quad (1)$$

т.е., ток насыщения пропорционален толщине слоя пентацена в третьей степени. Показатель  $1.39 \cdot 10^{-12}$  соответствует току утечки в транзисторной структуре такого типа.

Зависимость дифференциального сопротивления от толщины плёнки имеет следующий вид:

$$R_{\text{диф}} = 5 \cdot 10^{11} \cdot e^{\frac{-d}{7}} + 10^7 \cdot e^{\frac{-d}{200}} \quad (2)$$

Из выражения (2) видно, что данная зависимость имеет более сложный характер и состоит из суммы двух сопротивлений. Первое слагаемое соответствует сопротивлению утечки, второе - сопротивлению слоя пентацена.

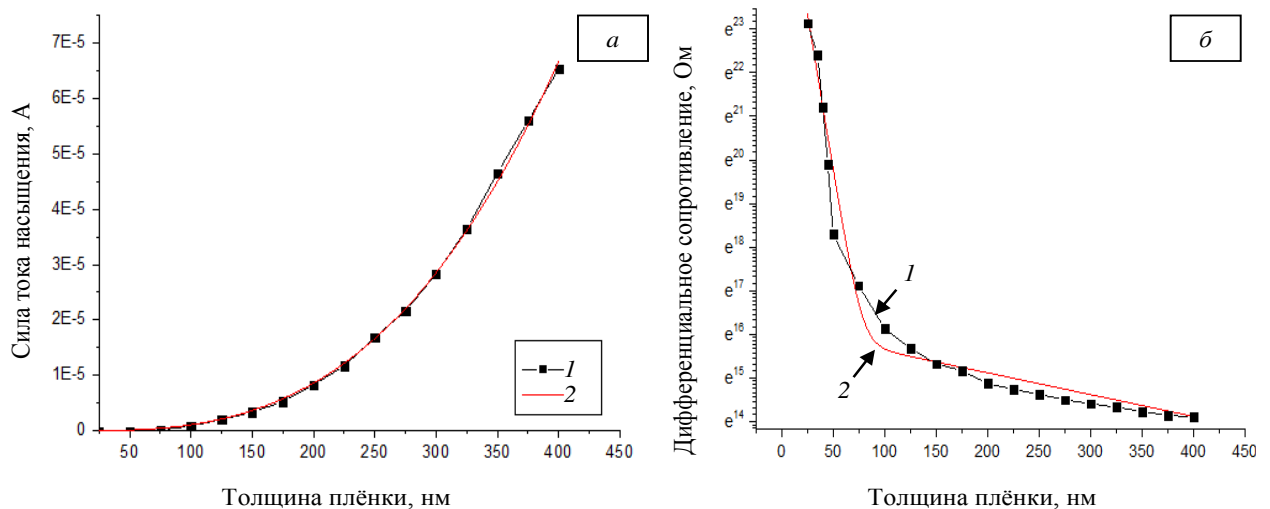


Рис. 4. Зависимость от толщины слоя пентацена: а – силы тока насыщения, б – дифференциального сопротивления: кр. 1 – расчётные данные; кр. 2 – аппроксимация.

Таким образом, в ходе выполнения работы были построены двумерные модели полупроводникового МДП-транзистора на базе пентацена с разной толщиной рабочего слоя. Получены выходные статические характеристики для моделируемых структур. На основе анализа изменения тока насыщения и дифференциального сопротивления в области линейного роста выходного тока в зависимости от разности потенциалов между стоком и истоком было показано, что

- ток насыщения МДП-транзистора на базе пентацена пропорционален  $d^3$ ;
- ток утечек составляет величину порядка  $1.39 \cdot 10^{-12}$  А для моделируемой структуры;
- дифференциальное сопротивление МДП-транзистора в области линейного роста выходного тока состоит из двух последовательных сопротивлений, каждое из которых пропорционально  $\exp(-d)$ .

#### Литература

1. Sun S. S., Dalton L. R. Introduction to Organic Electronic and Optoelectronic Materials and Devices. – Boca Raton: Taylor & Francis, CRC Press, 2016. – 963 p.
2. Shi, W., Zheng, Y., Yu, J. Polymer Dielectric in Organic Field-Effect Transistor // Properties and Applications of Polymer Dielectrics. – 2017.

**ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ОБРАБОТКИ НА КАРБИДНУЮ ПОДСИСТЕМУ  
ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭП-823**

В.В. Линник

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. И.Ю. Литовченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: lera.linnik.1999@mail.ru

Стали ферритно-мартенситного класса с содержанием хрома 12 вес. % рассматриваются как перспективные для использования в качестве конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов нового поколения благодаря высокому уровню их теплопроводности и коррозионной стойкости, низкой склонности к радиационному распуханию [1 – 4]. Для расширения рабочего температурного диапазона активной зоны ядерного реактора необходимо добиться повышения длительной высокотемпературной прочности сталей. Для этого используются различные термические и термомеханические обработки [1 – 4].

Одним из наиболее перспективных российских представителей реакторных сталей ферритно-мартенситного класса является 12 %-ная хромистая дисперсно-упрочненная сталь ЭП-823, элементный состав которой представлен в таблице 1.

Как показано ранее [2], эффективным методом модификации ее микроструктуры и повышения механических свойств является высокотемпературная термомеханическая обработка (ВТМО) с деформацией в аустенитной области. Однако, в настоящее время влияние такой обработки на карбидную подсистему стали ЭП-823 исследовано мало.

В связи с вышесказанным, в данной работе проведено подробное сравнительное электронно-микроскопическое исследование карбидной подсистемы стали ЭП-823 после перспективной ВТМО и после традиционной термической обработки (ТТО). Исследуемый режим ВТМО включает в себя нагрев до 1100 °С с выдержкой 1 ч., горячую пластическую деформацию прокаткой до величины  $\epsilon \approx 50\%$  и последующий отпуск при  $T = 720$  °С в течение 1 ч. ТТО состоит из закалки от температуры 1100 °С с выдержкой 1 ч. и отпуска при 720 °С в течение 3 ч.

Таблица 1. Элементный состав стали ЭП-823 (вес. %, основа Fe)

C	Cr	Mn	Mo	Nb	V	W	Ni	N	Si	Ce	Ti	B	Al
0.14	11.56	0.58	0.74	0.40	0.34	0.68	0.68	0.03	1.09	0.10	0.01	0.006	0.02

Структурные исследования частиц вторых фаз проводили на углеродных репликах с помощью просвечивающего электронного микроскопа JEM-2100 (ускоряющее напряжение 200 кВ) (JEOL, Япония) оснащенного приставкой для энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (energy dispersive X-ray microanalysis – EDX) (INCA Energy, Великобритания). Погрешность метода EDX анализа составляет не более 5 %.

При изготовлении реплик образцы стали предварительно травили в реактиве Вивелла (1 г. пикриновой кислоты + 5 мл соляной кислоты + 100 мл этанола). Состав и тип частиц вторых фаз были определены сочетанием анализа EDX и дифракционных картин. Размер частиц был измерен по их светлопольным и темнопольным электронно-микроскопическим изображениям.

XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО  
ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

Анализ изображений, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии после высокотемпературной термомеханической и традиционной термической обработок показал, что карбидная подсистема представлена преимущественно частицами типа  $M_{23}C_6$ , имеющими неравноосную форму. Объемная доля частиц  $M_{23}C_6$  после ТТО составляет примерно 5.5 %, в то время как после ВТМО ее значение составляет около 4 %.

Электронно-микроскопическое изображение частиц вторых фаз ферритно-мартенситной стали ЭП-823 после ВТМО и соответствующие дифракционные картины представлены на рисунке 1 (а). На рисунке 1 (б – д) представлены карты локального элементного рентгеновского микроанализа. На изображениях видны карбиды  $M_{23}C_6$  на основе Cr и Fe, а также крупная частица типа MX, где М – Nb, Мо и V, X – С.

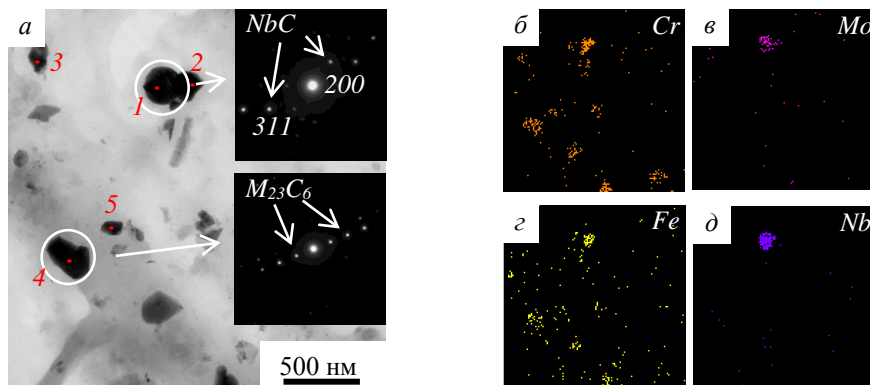


Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения частиц вторых фаз: а – светлопольное изображение и дифракционные картины; б – д – карты локального элементного рентгеновского микроанализа

В таблице 2 представлен элементный состав частиц вторых фаз после ВТМО, изображенных на рисунке 1. Состав частиц стали ЭП-823 после традиционной обработки близок составу частиц после высокотемпературной термомеханической обработки.

Таблица 2. Элементный состав частиц ферритно-мартенситной стали ЭП-823 после ВТМО в точках 1 – 5 на рис. 1 (вес. %)

Номер точки	Элемент									
	N	Si	V	Cr	Mn	Fe	Ni	Nb	Mo	W
1	1.59	0.32	2.14	0.85	0	0.21	0	71.73	0	2.15
2	0.97	0.16	0.52	49.92	1.68	24.29	0.49	0.44	4.39	6.03
3	2.29	0.20	0.32	33.32	0.81	16.78	0	0.14	2.85	10.73
4	2.25	0.10	0.76	38.54	0.66	20.79	0.44	0.20	3.24	6.76
5	1.96	0.38	0.76	31.97	1.05	18.89	0.29	0.08	1.62	4.59

На рисунке 2 изображено распределение частиц вторых фаз по размерам. Из рисунка видно, что ВТМО приводит к измельчению грубодисперсных карбидов  $M_{23}C_6$ . Анализ показал, что средний размер частиц после ТТО составляет около 220 нм, в то время как после ВТМО – 170 нм. Также после ВТМО значительно возрастает содержание мелких частиц  $M_{23}C_6$  размерами до 100 нм.

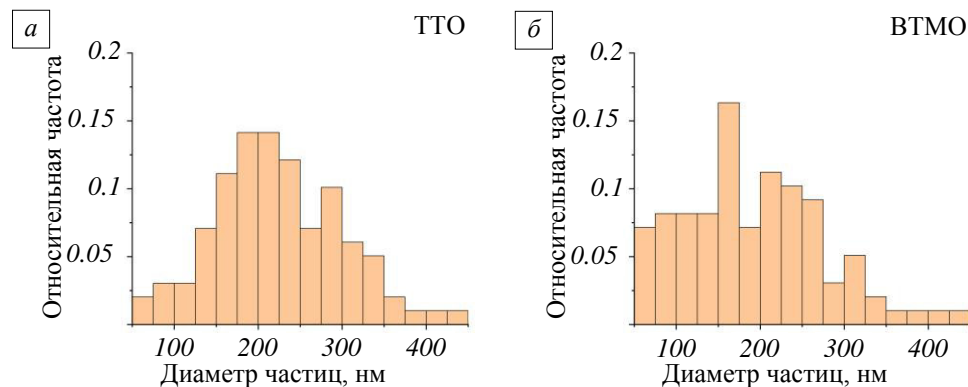


Рис. 2. Распределение частиц  $M_{23}C_6$  по размерам: а – после ТТО; б после ВТМО

В работе [2] при исследовании тонких фольг стали ЭП-823 после ТТО и ВТМО показано, что помимо крупных частиц  $M_{23}C_6$  в ней присутствуют мелкодисперсные (размерами до 20 нм) частицы типа МХ, закрепляющие дислокационную субструктуру стали. Обнаружить эти частицы на репликах в настоящей работе не удалось. При этом, как отмечают авторы [1 – 4], высокотемпературная термомеханическая обработка ферритно-мартенситных сталей приводит к повышению плотности дислокаций и увеличению объемной доли указанных выше наноразмерных частиц, по сравнению с состоянием после традиционной термообработки.

Таким образом, проведенные исследования показали, что карбидная подсистема стали ЭП-823 представлена преимущественно частицами  $M_{23}C_6$  на основе Cr и Fe. Высокотемпературная термомеханическая обработка приводит к уменьшению объемной доли и средних размеров грубодисперсных карбидов  $M_{23}C_6$ , по сравнению с состоянием после традиционной термической обработки. Это может быть связано с увеличением мест зародышеобразования в связи с ростом плотности дислокаций, а также с обеднением твердого раствора углеродом при выделении большого количества мелкодисперсных частиц типа МХ.

#### Литература

1. Yin S. et al. Effect of thermomechanical treatment on MX phase precipitation behavior in CLAM steel // Fusion Engineering and Design. – 2021. – V.173. – P. 112785-1 – 112785-10.
2. Almaeva K.V. et al. Microstructure and mechanical properties ferritic-martensitic steel EP-823 after high-temperature thermomechanical treatment // AIP Conference Proceedings. – 2019. – V. 2167. – P. 020013-1 – 020013-4.
3. Shruti P. et al. The Role of Thermomechanical Processing in Creep Deformation Behavior of Modified 9Cr-1Mo Steel // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2019. – V. 50. – P. 13002-1 – 13002-12.
4. Tan L. et al. Effect of thermomechanical treatment on 9Cr ferritic–martensitic steels // Journal of Nuclear Materials. – 2013. – № 441. – P. 713 –717.



**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ TiNi ПРОВОЛОК  
СУБМИЛЛИМЕТРОВЫХ ДИАМЕТРОВ С ПОВЕРХНОСТНЫМ  
Ti-Ni-Ta СПЛАВОМ**

В.В. Лобань

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Л.Л. Мейснер, к.т.н. А.А. Нейман

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: slavalob357@gmail.com

Никелид титана – это полиморфный интерметаллид, обладающий эффектами памяти формы сверхпластичности и сверхэластичности. Целенаправленная модификация поверхности позволяет расширить область применимости данного материала, однако приводит к изменению его интегральных физико-химических характеристик [1]. Поверхностное легирование танталом способствует повышению биоинертности и рентгеноконтрастности сплава, но может снизить механические характеристики, что сделает непригодным для применения. Поэтому целью работы является изучение механических свойств и деформационного поведения при испытании кручением проволок субмиллиметровых диаметров из сплава никелида титана с поверхностным Ti-Ni-Ta сплавом.

Исследованы проволочные образцы круглого сечения длиной 50 мм из сплава TiNi двух диаметров: 0.95 мм и 0.65 мм. Химический состав сплава Ni – 50.29, Ti – 49.25, C – 0.22, O – 0.15, N – 0.03, H – 0.05 (ат.%). В исследовании использована проволока промышленного производства, поверхность которой очищена электролитической полировкой. Модификация поверхности осуществлена на установке «РИТМ-СП» (ООО «Микросплав», ИСЭ СО РАН, Томск). Создание поверхностных сплавов происходило путем чередования магнетронного осаждения атомов титана и тантала (в пропорциях Ti<sub>70</sub>Ta<sub>30</sub> ат.% и Ti<sub>60</sub>Ta<sub>40</sub> ат.%) толщиной 50 нм и их электронно-пучкового переплава. Таким образом приготовлены две группы образцов TiNi с поверхностными сплавами разного химического состава: Ti<sub>70</sub>Ta<sub>30</sub>/TiNi и Ti<sub>60</sub>Ta<sub>40</sub>/TiNi. Поскольку в процессе обработки расплавляется покрытие (Ti и Ta) и подложка (Ti и Ni), при затвердевании формируется Ti-Ni-Ta поверхностный сплав. Испытания прочностных и упругопластических свойств проведены на установке кручения НДВ-100 (ООО «Метротест», Россия, ИФПМ СО РАН, Томск) в режиме циклирования до 20 циклов нагружения-разгрузки при комнатной температуре.

Экспериментальные диаграммы деформирования кручением проволок диаметрами 0.95 мм и 0.65 мм приведены на рисунке 1 а, б. Видно, что в образцах диаметра 0,95 мм состав поверхностного сплава незначительно влияет на величину развиваемых напряжений, тогда как в образцах диаметром 0,65 мм наблюдаются значительные расхождения кривых по напряжению. Характер кривых и флагообразная форма петель сохраняется вне зависимости диаметра проволок и наличия поверхностного сплава. Наиболее чувствительные к наличию поверхностного сплава проволоки диаметром 0.65 мм. На протяжении всего испытания они демонстрируют значительное повышение напряжения. При деформации 4% напряжения в образцах Ti<sub>70</sub>Ta<sub>30</sub>/TiNi на 25%, Ti<sub>60</sub>Ta<sub>40</sub>/TiNi на 19% больше по сравнению с проволокой того же диаметра в исходном состоянии.

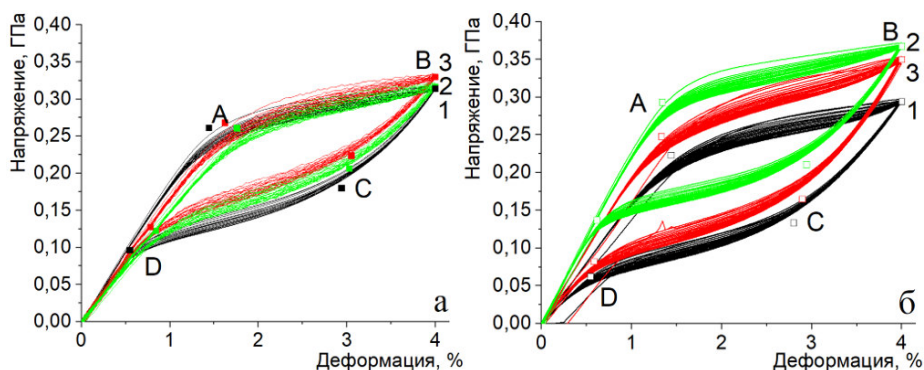


Рисунок 1. Диаграммы накопления и возврата деформации в образцах сплава TiNi (1) и с поверхностным сплавом  $Ti_{70}Ta_{30}/TiNi$  (2) и  $Ti_{60}Ta_{40}/TiNi$  (3) диаметром 0.95 мм (а) и 0.65 мм (б)

При циклических испытаниях для всех образцов характерно линейное снижение значения напряжения начала площадки мартенситного сдвига при увеличении количества циклов (рис. 2 а). При этом для образцов диаметром 0,95 мм расхождения с исходной проволокой являются минимальными (практически отсутствуют), тогда как для образцов с диаметром 0,65 мм расхождения значительны ( $Ti_{70}Ta_{30}/TiNi$  на 31%,  $Ti_{60}Ta_{30}/TiNi$  на 11%). Независимо от состава поверхностного сплава и диаметра проволоки значительного увеличения накопления остаточной деформации не наблюдается (рисунок 2 б). Таким образом, значительной деградации функциональных свойств в условиях повторяющихся внешних воздействий на образцах с Ti-Ta-Ni поверхностным сплавом (ТТНПС) не установлено.

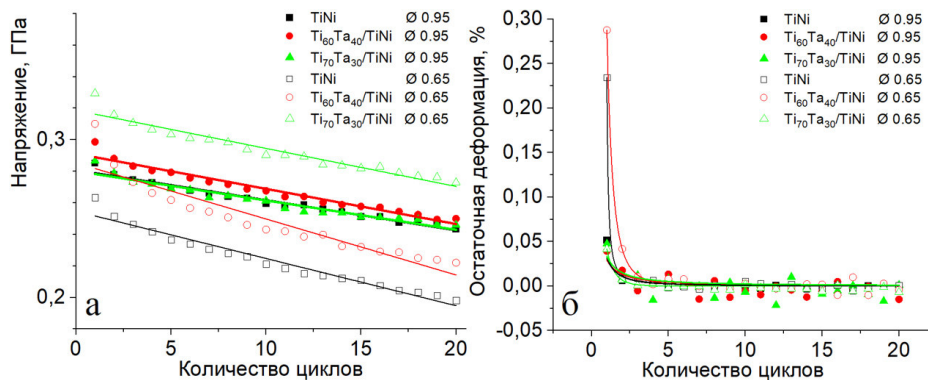


Рисунок 2. Зависимость напряжения начала площадки мартенситного сдвига (точка А на рис. 1 а, б) (а) и остаточной деформации (б) в образцах сплава TiNi и с поверхностным сплавом  $Ti_{70}Ta_{30}/TiNi$  и  $Ti_{60}Ta_{40}/TiNi$  диаметром 0.95 мм и 0.65 мм от количества циклов

Таким образом, модификация поверхности TiNi проволок путем формирования ТТНПС не приводит к снижению в значительной степени функциональной способности и прочностных характеристик при циклической деформации до 4 %.

#### Литература

- 1 Чернов Д.Б. Принципы конструкционного применения материалов с термомеханической памятью / Д.Б. Чернов. - М.: НИИСУ, 1984. - 150 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОГО НИКЕЛИДА ТИТАНА,  
ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ДИФФУЗИОННОГО СПЕКАНИЯ**

О. Мамазакиров

Научный руководитель: к.ф.-м.н. С. Г. Аникеев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: oubek55@gmail.com

В настоящее время сплавы на основе никелида титана, в том числе пористые, являются наиболее яркими представителями класса материалов с памятью формы. Они имеют высокие физико-механические и электрохимические свойства, биохимическую и биомеханическую совместимость с живыми тканями организма и находят широкое применение в различных областях медицины [1]. Структурные особенности пористого никелида титана определяют его функциональные и физико-механические свойства [2, 3].

В перспективе использования пористых сплавов на основе TiNi в качестве материала для создания имплантируемых конструкций особое значение имеют параметры взаимодействия пористого каркаса с биологическими жидкостями организма. В связи с этим, проницаемость является важнейшей физической характеристикой пористого материала [4]. Проницаемость характеризует взаимодействие пористого материала и пропитывающей его жидкости. Описание поведения пористой среды, пропитанной жидкостью, является одной из самых сложных физических задач. Данная работа посвящена исследованию проницаемости пористого сплава TiNi–Ti, полученного методом диффузионного спекания.

Диффузионное спекание выполнено с использованием порошков TiNi, частицы которого имеют губчатую морфологию сплюснутой формы. Процесс спекания сопровождается минимизацией свободной поверхностной энергии и химического потенциала порошковой системы TiNi. При жидкофазном диффузионном спекании путем смачивания расплавом поверхности частиц порошка образуются межчастичные контакты. В свою очередь, это приводит к сближению центров частиц порошка и уплотнению порошковой системы из-за большой поверхностной энергии расплава, что ведет к снижению пористости.

Исследована макроструктура и проницаемость пористого сплава на основе TiNi–Ti, полученного методом диффузионного спекания. Используются пористые сплавы на основе TiNi с добавками Ti (2,5 – 7,5 ат. %) в виде цилиндрических образцов длиной 70 – 80 мм, диаметром 11 – 12 мм с различными размерами пор. Структура пористого никелида титана с добавками титана, полученного методом диффузионного спекания, представляет собой трехмерное поровое пространство, морфологическое строение которого типично для высокопористых материалов, полученных с участием жидкой фазы.

Построены гистограммы распределения пор по размерам для сплавов на основе никелида титана с добавкой Ti (2,5 – 7,5 ат. %), которые имеет одномодальный вид. С увеличением концентрации добавки титана уменьшается средний размер пор (табл. 1). Это происходит за счет увеличивающегося объема расплава на основе (Ti<sub>2</sub>Ni+TiNi), который способствует образованию замкнутых пор из-за сближения центров частиц порошка, коалесценции и залечиванию пор. При этом коэффициенты пористости и проницаемости отличаются не существенно, что затрудняет интерпретацию полученных результатов для пористых сплавов, полученных методом спекания. Данную задачу можно решить, анализируя влияние

XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО  
ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

структурных особенностей на коэффициент проницаемости СВС-материалов на основе никелида титана, так как формируемое поровое пространство СВС-материалов отличается высокой долей открытых и взаимосвязанных пор.

Таблица 1 – Параметры макроструктуры модифицированного сплава на основе TiNi

Сплав TiNi	П, %	Открытая пористость ( $P_o$ ), %	Закрытая пористость ( $P_z$ ), %	$d_{пор}$ , мкм	$\sigma_{пор}$ , мкм	$K, \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$
TiNi-2,5Ti	61,5	21,4	40,1	113,9	66	$0,044 \pm 0,001$
TiNi-5Ti	62,4	19,3	43,1	60,9	71,4	$0,025 \pm 0,002$
TiNi-7,5Ti	58,8	16,9	41,9	55,9	77,7	$0,044 \pm 0,002$
СВС-TiNi	65	53	12	150	170	$0,189 \pm 0,002$

Чтобы показать влияние параметров макроструктуры порового пространства на проницаемость дополнительно были исследованы мелкопористые СВС-образцы, которые имели схожий коэффициент пористости со спеченными материалами. Данные образцы имели коэффициент проницаемости на порядок выше:  $0,189 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$  (табл. 1). СВС-материал, получаемый в режиме послойного горения, имеет регулярную взаимосвязанную пористую структуру. При диффузионном спекании порошков, состоящих из частиц сплюснутой формы, происходит уплотнение спекаемого образца в поперечном направлении и формируется структура порового пространства с менее взаимосвязанными порами в продольном направлении, что в совокупности с малым размером пор затрудняет течение жидкости в материале.

Исследована пористость образцов TiNi с добавками Ti методом взвешивания. Исследование открытой и закрытой пористости проводилось методом измерения объема вытесненной жидкости в соответствии с ГОСТ 2409-2014. Установлено, что доля открытых и тупиковых пор исследуемых образцов лежит в интервале 16,9 – 21,4 % и 40,1 – 43,1 % приходится на закрытые поры. Поэтому, несмотря на высокую пористость, коэффициент проницаемости у данных образцов на порядок ниже, чем у СВС-материалов (табл. 1).

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-10045).*

#### Литература

- 1 Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Имплантаты с памятью формы в травматологии и ортопедии / под ред. В. Э. Гюнтера. – Томск: Издательство МИЦ, 2010. – Т. 2 – 282 с.
- 2 Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Чекалкин Т.Л., и др. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Медицинские материалы с памятью формы. – Томск: Издательство МИЦ, 2006. – Т. 1. – 534 с.
- 3 Bansiddhi A., Sargeant T. D., Stupp S. I. Porous NiTi for bone implants: a review // Acta Biomater – 2008. – Vol. 4. No. 4. – P. 773-782.
- 4 Анিকেев С. Г. Структурно-фазовые особенности и свойства пористо-проницаемых сплавов на основе никелида титана, полученных методами высокотемпературного синтеза и спекания: дис. ... канд. физ.-мат. наук / С. Г. Анিকেев. – Томск, 2016. – 192 с.

**ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДНОГО НАПРЯЖЕНИЯ НА НАНЕСЕНИЕ ПОКРЫТИЙ КУБИЧЕСКОГО  
КАРБИДА ВОЛЬФРАМА НА МЕДНЫЕ ПОДЛОЖКИ ПЛАЗМОДИНАМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

А. Насырбаев

Научный руководитель: профессор, д.т.н., А.А. Сивков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

E-mail: arn1@tpu.ru

Одной из современных проблем в промышленности является увеличение срока службы технических материалов. На данный момент одними из наиболее перспективных способов увеличения характеристик промышленных изделий являются применение ультрадисперсных порошков в производстве материалов, а также создание упрочняющих покрытий. Широкое распространение в этой области получил карбид вольфрама, который обладает высокими износостойкостью, твердостью и модулем упругости [1]. Широкое применение получили покрытия из гексагональных карбидов вольфрама WC и W<sub>2</sub>C. Однако, судя по фазовой диаграмме, в системе W-C существует также и метастабильная кубическая модификация (WC<sub>1-x</sub>) [2]. Получение кубического карбида вольфрама в объемном виде затруднено ввиду особенностей его получения [3], к которым относятся существование в узком диапазоне параметров (атомарное отношение C/W и температура), а также необходимость в сверхбыстрой кристаллизации частиц. Такие параметры достигаются при использовании технологий высокоскоростного распыления материала, в числе которых выделяются плазменные и аналогичные им технологии.

В настоящей работе получение кубического карбида вольфрама в объемном виде производилось с использованием сильноточного импульсного коаксиального магнитоплазменного ускорителя с графитовыми электродами (КМПУ). Прекурсорами выступали порошок вольфрама и углерод, нарабатываемый в ходе электроэрозии с графитовых электродов. Произведена серия экспериментов по исследованию влияния зарядного напряжения емкостного накопителя энергии на процесс формирования WC<sub>1-x</sub> на медных подложках. Фазовый состав полученных покрытий исследовался методом рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре Shimadzu XRD 7000S (CuKα -излучение, счетчик-монохроматор Shimadzu CM-3121) без предварительной обработки. Идентификация фаз производилась по базе PDF4 (выпуск 2018 г.).

Экспериментальные исследования производились при одинаковой емкости накопителя энергии  $C = 6$  мФ при изменении зарядного напряжения в диапазоне  $U = 2,0 \div 3,5$  кВ. На рис.1 приведены осциллограммы рабочих тока  $i(t)$  и напряжения  $u(t)$  на электродах ускорителя, а также кривые мощности разряда  $p(t)$  и подведенной энергии  $w(t)$ . В табл.1 представлены результаты проведенной серии экспериментов с зарегистрированными значениями энергетических параметров, включая зарядное напряжение  $U$ , зарядную  $W_C$  и подведенную  $W$  энергии, максимальный ток разряда  $I_{\max}$ , рабочее напряжение между электродами  $U_0$ , максимальная  $P_{\max}$  и средняя  $P_{\text{ср}}$  величины мощности. Полученные осциллограммы и значения в табл. 1 свидетельствуют о постепенном увеличении энергетических параметров процесса плазмодинамического синтеза, которые в свою очередь влияют на скорость плазменного потока и  $p, T$ -параметров в головном скачке уплотнения плазмы. Таким образом, увеличение зарядного напряжения приводит к осуществлению более экстремальных режимов работы коаксиального

магнитоплазменного ускорителя, которые определяют возможность протекания плазмохимической реакции в плазменной струе.

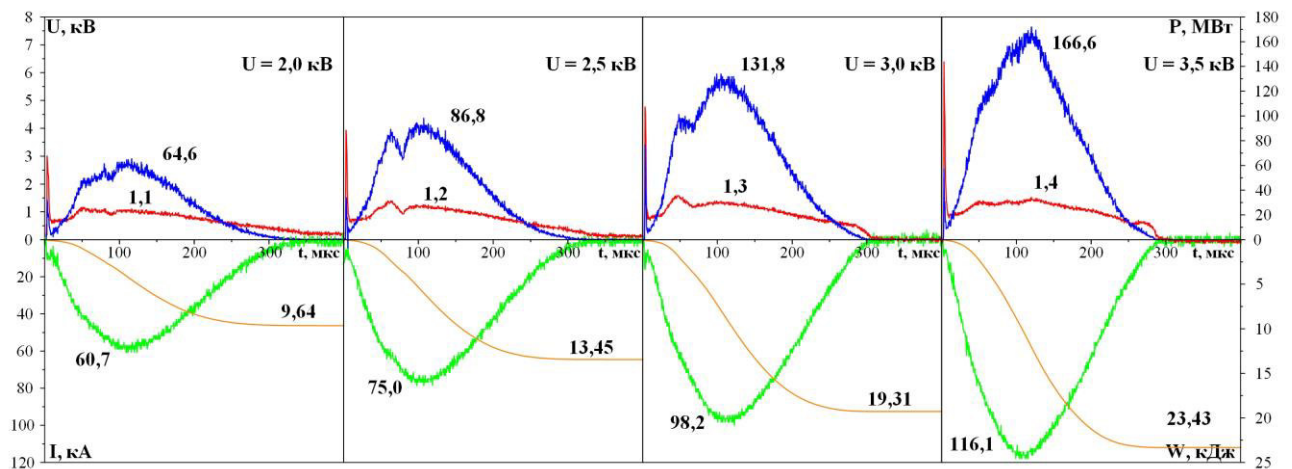


Рис.1. Типичные осциллограммы рабочего тока  $i(t)$  и напряжения  $u(t)$  на электродах ускорителя, кривые мощности  $p(t)$  и подведенной энергии  $w(t)$

Таблица 1. Энергетические параметры серии экспериментов при использовании меди в качестве материала подложки

№	$U$ , кВ	$W_C$ , кДж	$W$ , кДж	$I_{\max}$ , кА	$U_{\delta}$ , кВ	$P_{\max}$ , МВт	$P_{\text{ср}}$ , МВт
1	2,0	12,00	9,64	60,7	1,10	64,6	31,1
2	2,5	18,75	13,45	75,0	1,23	86,8	44,8
3	3,0	27,00	19,31	98,2	1,34	131,8	64,4
4	3,5	36,75	23,43	116,1	1,42	166,1	78,1

Анализ данных XRD показал, что во всей серии были получены покрытия, состоящие из фаз кубического карбида вольфрама ( $WC_{1-x}$ ), гексагональных карбидов вольфрама ( $WC$ ,  $W_2C$ ), а также непрореагировавшего вольфрама и углерода ( $W$ ,  $C$ ). По результатам количественного рентгеноструктурного анализа было определено, что наибольшее содержание  $WC_{1-x}$  (более 95%) достигается при  $W_{\text{подв}} = 27,00$  кДж.

Результатом работы является получение покрытий из  $WC_{1-x}$  плазмодинамическим методом. Исследовано влияние зарядного напряжения на получаемое покрытие. Наибольший выход фазы  $WC_{1-x}$  (более 95 %) был получен при зарядном напряжении  $U = 3,0$  кВ.

### Литература

- 1 Cardarelli F. Materials handbook. – London etc. : Springer, 2000. – P. 45-57.
- 2 Kurlov A. S., Gusev A. I. Phase equilibria in the W–C system and tungsten carbides // Russian Chemical Reviews. – 2006. – V. 75. – No. 7. – P. 617.
- 3 Gao Y., et al. On the formation of  $WC_{1-x}$  in nanocrystalline cemented carbides // Scripta Materialia. – 2013. – V. 68. – No. 2. – P. 108-110.

**ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И  
МИКРОТВЕРДОСТЬ ПРЕКУРСОРА ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ W-Ta-Mo-Nb-Zr-Cr-Ti ПОСЛЕ  
ЭНЕРГОНАПРЯЖЕННОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ**

Д.А. Осипов<sup>1,2</sup>, Толстихин В. И.<sup>2</sup>

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. И.А. Дитенберг

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: osipov\_ff\_tsu@mail.ru

На сегодняшний день предварительная механическая активация (МА) в энергонапряженных шаровых мельницах с последующей консолидацией методом искрового плазменного спекания (ИПС) применяются в качестве эффективного способа получения многокомпонентных сплавов на основе тугоплавких металлов [1, 2]. За счет предварительной обработки путем механической активации порошковой смеси, снижается температура синтеза соединений, которая способствует преодолению такой существенной металлургической проблемы традиционных технологий, как значительное различие в температурах плавления образующих компонентов. Одной из актуальных задач данного направления является выявление влияния химического состава и степени его эквивалентности на специфику формирования и трансформаций основных фаз как на стадии получения прекурсоров в условиях МА, так и при последующем деформационном, термическом и комбинированном воздействии.

Целью настоящей работы является изучение влияния термической обработки на структурно-фазовое состояние и микротвердость эквивалентной смеси порошков W-Ta-Mo-Nb-Zr-Cr-Ti после МА разной продолжительности.

Эквивалентная смесь порошков  $W_{14.3}Ta_{14.3}Mo_{14.3}Nb_{14.3}Zr_{14.3}Cr_{14.3}Ti_{14.3}$  ат. % тугоплавких металлов была подвергнута МА продолжительностью 10.5 и 20.5 минут в энергонапряженных планетарных шаровых мельницах АГО-2 с водяным охлаждением. Объем каждого из двух стальных барабанов мельницы 160 см<sup>3</sup>. Диаметр шаров 8 мм, масса шаров в каждом барабане 200 г, масса образца 10 г. Центробежное ускорение шаров составляло 400 м/с<sup>2</sup> (40g). Для предотвращения окисления обработку и выгрузку образцов осуществляли в атмосфере аргона. Полученные прекурсоры подвергали одночасовому вакуумному отжигу при температуре 1250 °С, которая является температурой ИПС при получении консолидатов подобных многокомпонентных систем неэквивалентного состава [3].

Морфология смеси порошков после механической активации и энергодисперсионный (EDX) анализ распределения элементов в полученных прекурсорах изучены с применением сканирующего электронно-ионного микроскопа FEI Quanta 200 3D (30 кВ) и сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega 3 SBH (30 кВ).

Исследования методом рентгеноструктурного анализа (РСА) выполнены на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD 6000, излучение Cu K $\alpha$ . Полнопрофильный рентгенофазовый анализ проведён модифицированным методом Ритвельда с использованием программного обеспечения Powder Cell 2.4, Origin, "Match!" и базы данных PDF-4 (The Powder Diffraction File 4).

Микротвердость (Hv) отожженной смеси порошка определяли методом Виккерса на приборе «Neophot 21». Нагрузка составляла 0.5 Н, выдержка 10 – 15 секунд.

В работе [4] показано, что увеличение продолжительности МА от 10.5 до 20.5 минут сопровождается фрагментацией частиц микронных размеров и снижением остаточной пористости в крупных конгломератах на фоне почти не меняющейся морфологии последних. При этом обнаружено, что помимо основной ОЦК фазы (ОЦК-1), с наиболее близким к эквиполному составом ( $W_{13-16}Ta_{14-17}Mo_{11-15}Nb_{11-16}Zr_{11-15}Cr_{13-18}Ti_{14-16}$ ), в прекурсор происходит формирование вторичных ОЦК фаз на основе Ta и W (ОЦК-2). Перемешивание этих фаз в процессе механической активации способствует постепенному переходу прекурсора в однофазное состояние в виде основной ОЦК фазы. Сравнение с литературными данными свидетельствует, что активация и интенсификация таких процессов в условиях энергонапряженной механической активации происходит при существенно меньшей продолжительности по сравнению с механической активацией меньшей энергонапряженности.

Изменения в морфологии и структурно-фазовом состоянии многокомпонентного прекурсора вследствие увеличения продолжительности механической активации сопровождаются более чем 20 % ростом микротвердости от 9.13 до 11.25 ГПа [4]. Кроме того, для более консолидированных конгломератов, после 20.5 минут обработки характерно снижение среднестатистического отклонения ( $\Delta H_v$ ) до 1.51. ГПа по сравнению с обработкой продолжительностью 10.5 минут ( $\Delta H_v = 1.89$  ГПа).

Предполагается, что формирование более однородного структурно-фазового состояния наряду с увеличением степени консолидации порошковой смеси обеспечивают рост значений микротвердости получаемого прекурсора.

После высокотемпературного отжига прекурсоров с МА продолжительностью 10.5 и 20.5 минут на соответствующих рентгенограммах наблюдается уменьшение ширины и снижение интенсивности пиков от фазы ОЦК-2. В частности, интенсивность основного пика  $I_{110}$  фазы ОЦК-2 снижается на 80 %, что, в совокупности с уменьшением площади пиков свидетельствуют об уменьшении объемной доли этой фазы.

Установлено, что отжиг способствует снижению значений микротвердости многокомпонентных прекурсоров. В случае предварительной МА 10.5 минут снижение  $H_v$  составляет ~ 4 % (до 8.73 ГПа), в то время как при МА 20.5 минут ~ 12 % (до 9.94 ГПа). При этом среднестатистическое отклонение ( $\Delta H_v$ ) у компактов после 10.5 минут предварительной МА уменьшается до 1.46 ГПа, а после 20.5 минут остается примерно одинаковым (1.59 ГПа).

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2021-0008. Исследования проведены с использованием оборудования ТМЦКП НИ ТГУ.

#### Литература

1. Fu Z., et al. Microstructure and mechanical behavior of a novel  $Co_{20}Ni_{20}Fe_{20}Al_{20}Ti_{20}$  alloy fabricated by mechanical alloying and spark plasma sintering // *Mater. Sci. Eng., A* – 2015. – V. 644. – P. 10-16.
2. Vaidya M., Muralikrishna G.M., Murty B.S. High-entropy alloys by mechanical alloying: A review // *J. Mater. Res.* – 2019. – V. 34. – №. 5. – P. 664-686.
3. Ditenberg I.A. et al. Structure and phase composition of a W-Ta-Mo-Nb-V-Cr-Zr-Ti alloy obtained by ball milling and spark plasma sintering // *Entropy*. – 2020. – V. 22. – №. 2. – P. 143.
4. Ditenberg I. A. et al. Structural-Phase State and Microhardness of a Precursor from Equiatomic W-Ta-Mo-Nb-Zr-Cr-Ti Powder Mixture after High-Energy Mechanical Activation // *Physical Mesomechanics*. – 2021. – V. 24. – №. 6. – P. 707-715.



**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ВИСМУТА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**

В.А. Петраков

Научный руководитель: декан, к.ф.-м.н. С.Н. Филимонов

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

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

Под воздействием внешних сил в материале могут возникнуть упругие напряжения, которые влияют на наблюдаемые свойства материала. Например, материалы с отрицательным значением коэффициента Пуассона растягиваются (или уменьшаются) в продольном направлении после растягивания (сжатия) в боковом направлении. По сравнению с материалами с положительным соотношением Пуассона, такие материалы имеют более высокое сопротивление вдавливанию, большую стойкость к удару, более высокий уровень звукопоглощения и более высокой устойчивостью к растрескиванию, поэтому такие материалы имеют большие перспективы для использования в промышленных областях и их изучение представляет практический интерес.

Другим примером явлений, возникающих под воздействием упругих напряжений, является формирование фрактальной структуры путем осаждения висмута на подложке InSb(111)B. Упругие напряжения возникают в этой системе из-за значительного несоответствия параметров решетки пленки и подложки. Осаждение висмута происходит при температуре около 400 К, и в результате осаждения на поверхности антимолибдита индия формируется пленка висмута толщиной от одного до трех монослоев, структурированная в виде известной фрактальной структуры – треугольников Серпинского. Образование участков, имеющих форму треугольников, требует необычно большого несоответствия решеток между монослоевым эпитаксиальным слоем висмута и подложкой, относительно большого сопротивления сдвигу как между монослоевыми слоями, так и между пленкой и подложкой, а также относительно слабого взаимодействия между атомами внутри слоя.

Теоретически и экспериментально было показано, что фрактальные материалы обладают особыми термическими, механическими, электрическими, электромагнитными и оптическими свойствами, которые могли бы быть предпочтительны для нанoeлектроники. В добавок ко всему, было теоретически предсказано, что ультратонкий слой висмута демонстрирует стабильные нетривиальные топологические свойства, которые делают исследования гетероэпитаксиального роста ультратонких пленок висмута перспективными.

Одним из методов изучения влияния упругих напряжений на слоистые материалы является теория функционала плотности. В рамках этой работы будут изучаться влияние упругих напряжений на кристалл висмута. Все расчеты проводятся при помощи пакета FHI-AIMS, используя приближение обобщенного градиента и коррекцию Ткаченко-Шеффлера, которая позволяет учитывать действие сил Ван-дер-Ваальса. Для того, чтобы начать работу, сначала необходимо задать начальную геометрию элементарной ячейки висмута.

Висмут – это слоистый материал, обладающий ромбоэдрической сингонией, типичной для полуметаллов V группы, к которой он принадлежит. Каждый из атомов в структуре висмута имеет трёх ближайших соседей, лежащих в одной плоскости, и трёх более удалённых, лежащих в другой плоскости. Совокупность этих плоскостей образует бислой, перпендикулярный тригональному направлению (111), в котором каждый атом ковалентно связан с тремя его ближайшими соседями. Связи внутри каждого

бислоя намного сильнее, чем межслойная связь. Именно поэтому кристаллы висмута легко раскалываются вдоль направления (111). Кристаллическую решетку висмута можно описать, используя ромбоэдрическую, гексагональную или псевдокубическую элементарные ячейки.

В данной работе мы будем использовать гексагональную ячейку для задания структуры. Гексагональная ячейка строится на трех базовых векторах, два из которых равны по длине и образуют угол  $120^\circ$ , а третий им перпендикулярен и отличается от них по длине:

$$\vec{a}_{h1} = \left(-\frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right)$$

$$\vec{a}_{h2} = (a, 0, 0)$$

$$\vec{a}_{h3} = (0, 0, c)$$

Таким образом, форма ячейки определяется длинами базовых векторов  $a$  и  $c$ . Из экспериментальных данных известно, что  $a = 4.5332 \text{ \AA}$  и  $c = 11.7967 \text{ \AA}$ .

Из-за того, что теория функционала плотности использует ряд приближений, равновесная геометрия элементарной ячейки, используемая при расчетах, может отличаться от геометрии, построенной на основе экспериментальных данных. Для того, чтобы вычислить равновесную геометрию элементарной ячейки в рамках используемого метода, мы используем итеративный подход. Для начала мы фиксируем расстояние между слоями и варьируем расстояние между атомами внутри бислоя висмута, пока не достигнем состояния с минимальной полной энергией. Затем мы фиксируем найденное расстояние между атомами в бислое и варьируем расстояние между бислоями, пока не найдем расстояние, соответствующее минимальной энергии. Затем процесс повторяется заново, пока мы не найдем равновесную геометрию.

Результаты вычислений представлены на графиках:

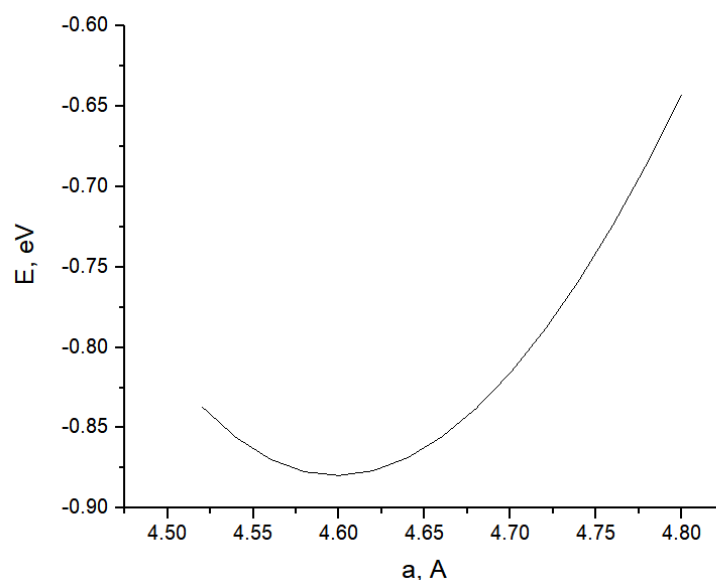


Рис. 1 Графики зависимости полной энергии от параметров решетки  $a$  и  $c$

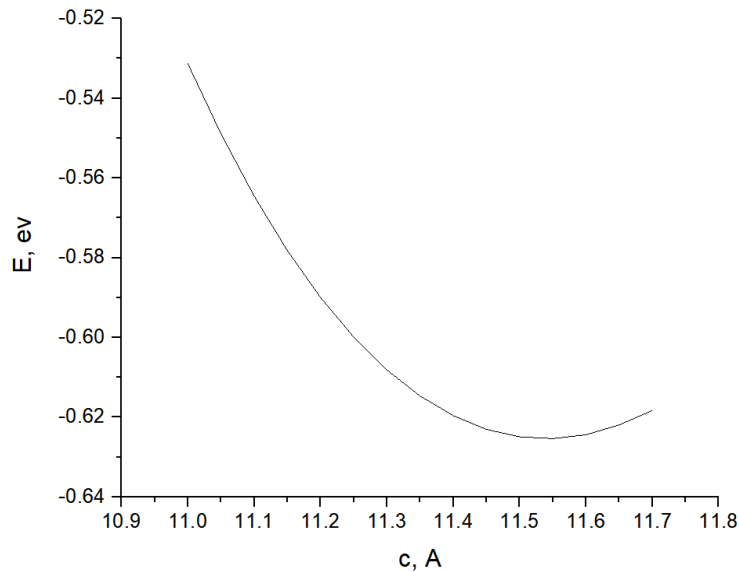


Рис. 1 Графики зависимости полной энергии от параметров решетки a и c

Из полученных в ходе работы значений полной энергии следует, что равновесный параметр решетки  $a = 4.6 \text{ \AA}$ , а равновесный параметр  $c = 11.45 \text{ \AA}$ . Экспериментальные же параметры равны  $a = 4.5332 \text{ \AA}$  и  $c = 11.7967 \text{ \AA}$ . Полученное отклонение можно объяснить двумя причинами. Первая причина состоит в том, что в теории функционала плотности используется ряд приближений, поэтому значения равновесных параметров решетки зависят от выбранного типа приближений. Вторая причина состоит в том, что цикл, описанный в практической части, не завершен, и по окончании цикла вычислений равновесные значения параметров решетки изменятся. После того, как равновесная ячейка будет построена, можно приступить к моделированию влияний упругих напряжений на материал.

### Литература

1. David S. Sholl Density Functional Theory: a practical introduction – New Jersey: John Wiley & Sons, 2009 – 238 p.
2. Hofmann P. The surfaces of bismuth: Structural and electronic properties // Progress in surface science. – 2006. – V. 81. – №. 5. – P. 191-245.
3. Xiaowen Li. Tunable Negative Poisson's Ratio in Van der Waals Superlattice / Xiaowen Li et al. // Lang Chen Research vol. 2021 // Guangdong, 2021 – V. 1. – P. 1–9.
4. Chen Liu. Sierpiński Structure and Electronic Topology in Bi Thin Films on InSb(111)B Surfaces/ Chen Liu et al. // Physical Review Letters// Shanghai, 2021 – V. 1. – P. 1–5.

**ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТА ЯНА-ТЕЛЛЕРА НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ НА МАГНИТНУЮ И  
ЗОННУЮ СТРУКТУРУ ХРОМ-СОДЕРЖАЩИХ МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ  
ИЗОЛЯТОРОВ**

Е.К. Петров<sup>1,2</sup>

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Т.В. Меньщикова

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Петергоф

E-mail: evg.konst.petrov@gmail.com

Актуальной темой в физике конденсированного состояния последнего десятилетия является изучение материалов с нетривиальной топологией электронных зон, в частности топологических изоляторов (ТИ) [1]. Интерес к таким системам обусловлен их необычными электронными свойствами, которые возникают благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию и наличию в системе различного типа симметрий: симметрии обращения времени, кристаллической симметрии или их комбинаций [2]. Нарушение симметрии обращения времени намагничиванием позволяет наблюдать множество многообещающих физических эффектов. Наиболее яркими примерами являются фаза антиферромагнитного топологического изолятора (АФМ ТИ) [2], фаза квантового аномального эффекта Холла [3], фаза аксионного изолятора и т.д. Крайне богатой платформой для изучения этих эффектов оказалось соединение  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и гетероструктуры на его основе [4]. Фаза квантового аномального эффекта Холла также была предсказана в гетероструктурах с тонкими пленками магнитного ТИ  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$  [5]. Тем не менее, свойства объемных Cr-содержащих магнитных ТИ остаются неисследованными.

В данной работе рассматриваются электронные и магнитные свойства соединений  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$ . Показано, что в этих соединениях наблюдается эффект Яна-Теллера (ЭЯТ) — снятие орбитального вырождения, приводящее к понижению симметрии системы и структурным дисторсиям. Обнаружено, что дисторсий Яна-Теллера (ЯТ) критически важен для описания магнитной и электронной структуры данных соединений. В частности, без учета дисторсий (но с учетом снятия орбитального вырождения) данные системы обладают металлическим спектром, а с учетом — полупроводниковым. Также учет дисторсий приводит к существенным изменениям в величине энергии магнитной анизотропии.

Исследование проведено в рамках первопринципных методов расчета электронной структуры твердого тела: метода проекционных плоских волн, реализованного в программном пакете VASP [6]. Для учета поведения 3d-состояний атомов Cr был использован GGA+U-подход.

Для изучения ЭЯТ на свойства соединений  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$  ЭЯТ был разбит на две составляющие: снятие орбитального вырождения  $d$ -состояний Cr (электронная составляющая) и дисторсии (структурная составляющая). Таким образом, на первом этапе исследования рассматривались свойства соединений в идеальной кристаллической структуре, но с учетом снятия вырождения. На втором этапе рассматривались различные модели ЯТ дисторсий, был определен наиболее выгодный тип дисторсий и изучено влияние учета дисторсий на свойства соединений.

В первую очередь была рассмотрена возможность роста соединений  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$  и их статическая стабильность. Стабильность любой полиатомной системы может быть рассмотрена как состоящая из двух компонент: статической (химической) и динамической. Статическая

стабильность данных соединений была оценена исходя из выигрыша в полной энергии, возникающего при помещении бислоя CrSe (CrTe) в структурный блок ТИ ( $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$  или  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  для  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$  соответственно). Полученные результаты показывают, что такой процесс и, следовательно, образование химической связи, является энергетически выгодным. В работе [6] было показано, что семейства родственных соединений могут кристаллизоваться либо в ромбоэдрической структуре  $R\bar{3}m$ , либо в моноклинной  $C2/m$ . Результаты показывают, что в случае соединения  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$  моноклинная фаза является более предпочтительной, а в случае  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$  таковой является ромбоэдрическая. Тем не менее, в дальнейшем соединение  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$  рассматривалось в ромбоэдрической структуре, поскольку существует вероятность того, что дисторсии ЯТ способны стабилизировать ромбоэдрическую фазу. Как станет далее очевидно, в идеальной ромбоэдрической структуре все рассмотренные соединения являются динамически нестабильными.

Для того, чтобы показать, что данные в данных соединениях наблюдается ЭЯТ, были рассчитаны значения полных энергий в идеальной ромбоэдрической структуре с учетом снятия орбитального вырождения и без его учета. Полученные результаты показывают, что снятие вырождения является энергетически выгодным. В зависимости от соединения выигрыш в полной энергии составляет от  $\sim 170$  до  $\sim 300$  мэВ для изолированной ультратонкой пленки (7 атомных слоев) и от  $\sim 30$  до 270 мэВ в объеме.

Благодаря слоистой структуре в данных соединениях внутрислоевое обменное взаимодействие значительно сильнее межслоевого. Это означает, что в данных соединениях межслоевое и внутрислоевое магнитное упорядочение могут быть исследованы независимо друг от друга. Для определения типа внутрислоевого магнитного упорядочения были рассчитаны полные энергии изолированного семислойного блока в трех магнитных конфигурациях: ферромагнитной, коллинеарной антиферромагнитной и неколлинеарной антиферромагнитной. Полученные результаты показывают, наиболее выгодной является ферромагнитная. Учитывая это, было рассмотрено два типа межслоевого упорядочения – ферро- и антиферромагнитный. В данном случае ферромагнитное упорядочение также является наиболее выгодным. Расчеты полных энергий показывают, что легкая ось намагничивания направлена вдоль [0001].

Для определения вида дисторсий ЯТ, реализующихся в данных соединениях, были рассмотрены 7 моделей дисторсий, возможных в ромбоэдрической структуре: моноклинная, зиг-заг, димер, мельничная, гексагональная, тример и переменный тример [7]. В каждой модели смещения атомов в атомной плоскости (0001) были фиксированными и составляли от 0 % до 4 % параметра решетки, а межплоскостные расстояния оптимизировались, после чего рассчитывались полные энергии. Полученные результаты показывают, что наиболее выгодными являются дисторсии типа тример. Величина смещения, соответствующая минимуму энергии, составляет от  $\sim 2$  % до  $\sim 3$  % параметра решетки в зависимости от соединения.

Учет тример дисторсий оказывает значительное влияние на магнитную структуру данных соединений. Так, в соединении  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$  учет дисторсий приводит к изменению типа магнитной анизотропии с легкой оси на легкую плоскости (0001). Учет дисторсий не приводит к изменению типа магнитного упорядочения. Наиболее заметные изменения происходят в электронном спектре. Так, в идеальной ромбоэдрической структуре данные соединения являются полуметаллами, в то время как с учетом дисторсий — полупроводниками с энергетической щелью от 10 до 200 мэВ.

XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО  
ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

В данной работе в рамках расчетов из первых принципов рассмотрены электронная и магнитная структура соединений  $\text{CrBi}_2\text{Se}_4$ ,  $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  и  $\text{CrBi}_2\text{Te}_4$ . Показано, в этих соединениях наблюдается ЭЯТ. Учет дисторсий ЯТ оказывает значительное влияние на свойства данных соединений. Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта № 19-32-90250.

**Литература**

1. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators // *Reviews of modern physics*. – 2010. – V. 82, №. 4. – P. 3045.
2. Mong R. S. K., Essin A. M., Moore J. E. Antiferromagnetic topological insulators // *Physical Review B*. – 2010. – V. 81, №. 24. – P. 245209.
3. Weng H. et al. Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states // *Advances in Physics*. – 2015. – V. 64, № 3. – P. 227–282.
4. Otrokov M. M. et al. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // *Nature*. – 2019. – V. 576, № 7787. – P. 416–422.
5. Petrov E. K. et al. Cr-Containing Ferromagnetic Film–Topological Insulator Heterostructures as Promising Materials for the Quantum Anomalous Hall Effect // *JETP Letters*. – 2019. – V. 109, №. 2. – P. 121–125.
6. Eremeev S. V., Otrokov M. M., Chulkov E. V. Competing rhombohedral and monoclinic crystal structures in  $\text{MnPn}_2\text{Ch}_4$  compounds: An ab-initio study // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2017. – V. 709. – P. 172–178.
7. Chen Z. et al. First-principle investigation of Jahn–Teller distortion and topological analysis of chemical bonds in  $\text{LiNiO}_2$  // *Journal of Solid State Chemistry*. – 2011. – V. 184, №. 7. – P. 1784–1790.

**СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ TiNi СПЛАВА,  
МОДИФИЦИРОВАННЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ ВЫСОКОДОЗНОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ПУЧКАМИ  
ИОНОВ ТИТАНА**

А.Д. Плетнев<sup>1</sup>, Ф.А. Дьяченко<sup>2</sup>

Научный руководитель: к.ф.-м.н. В.О. Семин

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

E-mail: alex.pletnev2000@gmail.com

Модификация поверхностных слоев материалов пучками ионов средних энергий (до 100 кэВ) дает возможности направленного изменения их химического, фазового составов, зеренной структуры и дефектной субструктуры [1]. При этом, наблюдается повышение твердости приповерхностного имплантированного слоя, существенное улучшение коррозионных свойств и износостойкости сплавов. Ионная имплантация пучками циркония и тантала [2] сплавов на основе TiNi приводит к аморфизации тонкого поверхностного слоя, формированию безникелевых слоев толщинами до 20 нм и генерации остаточных упругих напряжений. Причины аморфизации [3, 4] TiNi сплавов в зоне каскадов атомных столкновений связаны с накоплением критического уровня дефектов и химическим разупорядочением интерметаллидов. Атомная структура аморфного слоя, формируемая в результате высокодозной ионной имплантации, как и фазовый состав оксидной пленки, до сих пор остаются малоизученными вопросами. При этом механизм перехода высокодефектной B2 структуры в более стабильную аморфную фазу не может быть объяснен с точки зрения классической термодинамики. Поэтому целью работы являлось изучение структурных особенностей строения поверхностных (оксидных) слоев TiNi сплава, модифицированных в результате высокодозной имплантации пучками ионов титана.

Материалом исследования является сплав TiNi марки TN1 (МАТЕК-СПФ, Россия). Химический состав сплава: Ti-55.08Ni-0.051C-0.03O-0.002N (вес. %), температура начала обратного мартенситного превращения  $As = 303$  К. Финишная обработка поверхности включала в себя механическую шлифовку до зеркального блеска, химическое травление в смеси кислот  $HNO_3:HF = 3:1$  и последующую электролитическую полировку в смеси  $CH_3COOH:HClO_4 = 3:1$  при  $U=30$  В. Поверхность образцов после указанных выше обработок считалась исходной. Образцы TiNi с исходной поверхностью были модифицированы пучками ионов титана в режиме имплантации на установке Mevva-5.Ru (ИСЭ СО РАН, г. Томск): доза облучения  $D=1 \cdot 10^{17}$  см<sup>-2</sup>, ускоряющее напряжение 30 кэВ, частота следования импульсов 10 Гц, плотность тока ионного пучка 5.9 мА/см<sup>2</sup>, средняя зарядовая плотность ионов 2.2. Исследования структуры поверхностного слоя TiNi проводили на оборудовании ЦКП «Нанотех» (ИФПМ СО РАН) с использованием просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) JEM-2100 (JEOL, Япония) при ускоряющем напряжении 200 кВ. Тонкие фольги были приготовлены в геометрии «cross-section» на установке EM 09100IS (JEOL, Япония). Элементный состав участков фольги исследовали с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy (Oxford Instruments, Великобритания).

Результаты исследований TiNi сплава после высокодозной имплантации пучками ионов титана приведены на рисунке 1. Электронно-микроскопический анализ показал (рис. 1 а, б), что ионно-имплантированная область состоит из трех слоев: наружный оксидный слой толщиной 15-20 нм, аморфным подслоем толщиной 75 нм и TiNi-подложка с большей плотностью дислокаций, чем в

исходном сплаве. Об этом свидетельствуют приведенные микро- и нанодифракционные картины. Нанодифракция на рис. 1 в (от области на рис. 1 б) содержит только аморфное гало без точечных рефлексов, а дифракционная картина на рис. 1 г представляет собой картину от фазы  $\text{TiO}_2$  (ICDD database card # 00-003-0380). Подложка  $\text{TiNi}$ , расположенная под аморфным слоем, является кристаллической и представлена В2 фазой.

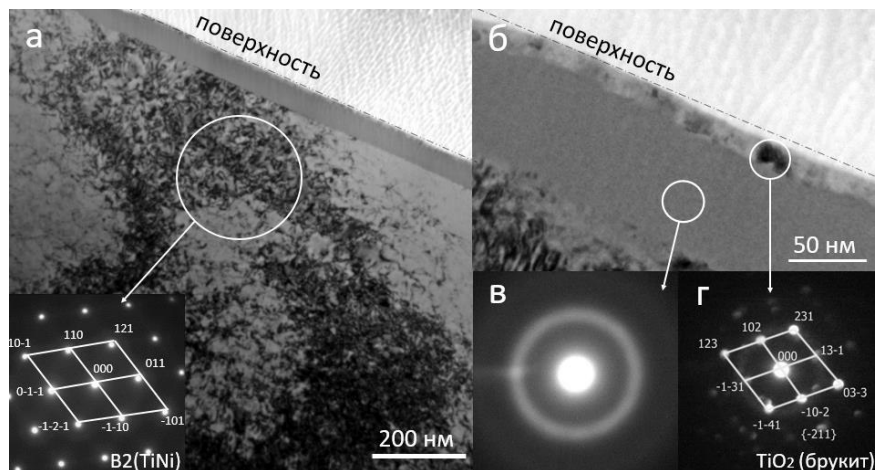


Рис. 1. а, б – светлопольные изображения структуры  $\text{TiNi}$  сплава после высокодозной имплантации пучками ионов титана; в, г – нанодифракции от аморфного слоя и оксидного слоев, соответственно

Ионная имплантация при дозе  $D=1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$  приводит к аморфизации тонкого (до 100 нм) поверхностного слоя. Обнаружено перераспределение элементного состава в зоне прямого воздействия ионного пучка. Формируется обогащенный по кислороду наружный слой толщиной 20 нм, который представляет собой слой из оксидов  $\text{TiO}_2$ . Под ним располагается область с аморфной прослойкой, обогащенная по никелю ( $\text{Ni}_{51}\text{Ti}_{49}$  ат. %). В кристаллическом подслое  $\text{TiNi}$  подложки состав сплава близок к эквиатомному, но с повышенным содержанием никеля, по сравнению с исходным  $\text{TiNi}$  сплавом. Сделано предположение, что избыточная концентрация никеля в  $\text{TiNi}$  подложке на глубину до 500 нм связана с его более высокой диффузионной подвижностью и высокой плотностью точечных и дислокационных дефектов, генерируемых ионным облучением. Авторы выражают благодарность с.н.с. ЛПИ ИСЭ СО РАН, к.т.н. К.П. Савкину за модификацию поверхности  $\text{TiNi}$  сплавов. Работы выполнены в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0003.

#### Литература

1. Диденко А.Н., Шаркеев Ю.П., Козлов Э.В., Рябчиков А.И. Эффекты дальнего действия ионно-имплантированных металлических материалах. Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 328 с.
2. L.L. Meisner, T.M. Poletika, S.L. Girsova, S.N. Meisner. The surface layers structure of differently oriented single titanium nickelide crystals subjected to ion implantation. Vacuum 2016.
3. Бойко В.И., Валяев А.Н., Погребняк А.Д.. Модификация металлических материалов импульсными мощными пучками частиц. Успехи физ. наук. – 1999. – Т. 169, № 11. – С. 1243–1271.
4. Комаров Ф.Ф. Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий. Успехи физ. наук. – 2003. – Т. 173, № 12. – С. 1288–1318.



**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ БЕСПРИМЕСНЫХ АЛМАЗОВ**

А.С. Попова

Научный руководитель: м.н.с. Рипенко В.С

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: popova\_31\_03@mail.ru

В работе представлены результаты расчетов спектров поглощения беспримесных НРНТ алмазов. Спектры получены при температурах от 12К до 460К. Рассмотрены различные методы определения ширины запрещенной зоны для синтетических образцов при температуре 12К. Проведено сравнение значений ширины запрещенной зоны пяти НРНТ алмазов для пяти методов ее определения.

Алмаз – это кристаллическая модификация чистого углерода, самое твердое вещество из всех, встречающихся в природе, и наиболее известный драгоценный камень. Алмазы относятся к полупроводникам с широкой зоной проводимости. По литературным данным ширина запрещенной зоны алмаза варьируется от 5,47 эВ до 5,5 эВ [1-3]. Значением энергии запрещенной зоны является точка перегиба в спектре поглощения. В работе использовались спектры, полученные при низкой температуре (12К), так как с уменьшением температуры мы получаем спектр с наименьшим вкладом фононов и теплового уширения в поглощение.

Целью работы является определение ширины запрещенной зоны беспримесных НРНТ алмазов различными методами, а также сравнение полученных результатов с литературными данными. В эксперименте использовались пять алмазных пластинок C73, C74, C75, C76, C91, полученных методом НРНТ. Спектры пропускания образцов были сняты на гелиевом криостате при температуре от 12К до 460К. Для регистрации спектров пропускания алмазных образцов использовался спектрометр Ocean Optics HR4000 в диапазоне 200-300 нм. В качестве источника света выступала дейтериевая лампа D2000. Расчет показателя поглощения (спектрального коэффициента пропускания) проводился по формуле (1) [4]:

$$\alpha(E) = \frac{1}{d} \ln \left( \frac{(1-R)^2}{2T} + \sqrt{\frac{(1-R)^4}{4T^2} + R^2} \right) \quad (1)$$

где  $T(\lambda)$  – коэффициент пропускания,  $R$  – коэффициент отражения от одной грани,  $\alpha(E)$  – коэффициент поглощения,  $d$  - толщина алмазной пластины

Спектры поглощения были аппроксимированы по формуле (2), предложенной в [3]:

$$\alpha(E) = \alpha_{max} + \frac{\alpha_{min} - \alpha_{max}}{1 + \exp(K(E - E_0))} \quad (2)$$

где  $\alpha_{min}$  ( $\alpha_{max}$ ) – минимальный (максимальный) показатель поглощения,  $K$  – коэффициент, связанный с наклоном сигмовидной функции,  $E_0$  – энергетическая координата, при которой коэффициент поглощения находится между  $\alpha_{min}$  и  $\alpha_{max}$ .

Ширина запрещенной зоны определялась по спектрам поглощения пятью способами:

$$\alpha(E) = \alpha_{max} + \frac{\alpha_{min} - \alpha_{max}}{1 + \exp(K(E - E_0))}, \sqrt{\alpha(E)}, \alpha(E)^2, \sqrt{\frac{\alpha(E)}{E}}, \sqrt{\alpha(E) * E}.$$

Значение ширины запрещенной зоны соответствует значению точки перегиба в спектре поглощения. Значение точки перегиба определялось численным методом Ньютона.

В ходе работы были рассчитаны спектры поглощения пяти алмазных образцов по формуле (1). Затем, по спектрам поглощения пятью способами определялся край фундаментального поглощения алмаза. На рис.1 представлен график полученных результатов.

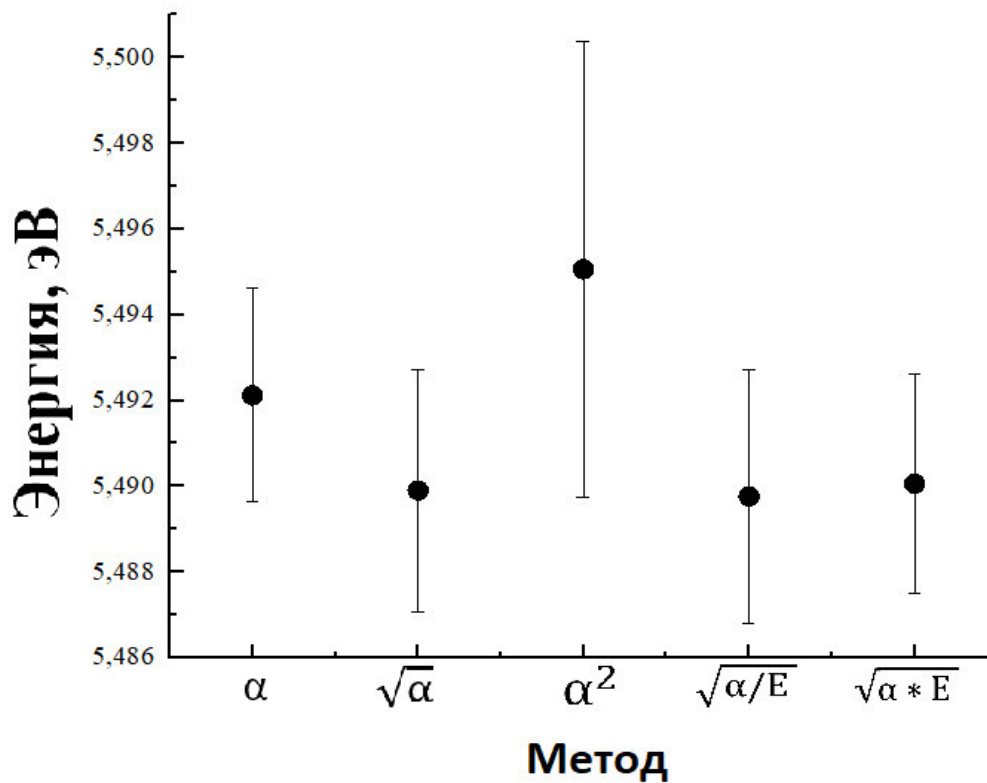


Рис. 1. График значений ширины запрещенной зоны в зависимости от метода ее определения.

В результате проведенной работы получены спектры поглощения беспримесных алмазов в температурном диапазоне от 12К до 460К; определена ширина запрещенной зоны таких алмазов, которая составляет 5,49 эВ. Полученное значение входит в диапазон литературных данных.

#### Литература

1. Clark C.D., Dean P.J., Harris P.V. Intrinsic Edge Absorption in Dimond // The Royal Society of London. – 2014. – vol. 277. – No. 1370 (Feb. 11. 1964). pp. 312-329.
2. Казючиц Н.М., Макаренко Л.Ф., Русецкий М.С., Шуленков А.С. Чувствительные элементы на основе синтетического алмаза для контрольно-измерительных приборов АЭС // Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники. – 2015. – №. 2 (88). – С. 139-143.
3. A.R. Zanatta. Revisiting the optical bandgap of semiconductors and the proposal of a unified methodology to its determination // Scientific Reports. – 2019. – Vol. 9. – P. 11225.

**ОСОБЕННОСТИ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ В  
ВЫСОКОПРОЧНОМ СОСТОЯНИИ**

А.А. Сараева

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. И.В. Киреева

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: Anastasia16-05@yandex.ru

Альтернативой традиционным сплавам стали высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), которые содержат 5 и более элементов, при этом атомная концентрация каждого элемента находится в пределах от 5 до 35 ат. % [1]. ВЭС выделили в особую группу сплавов, так как процессы структуро- и фазообразования, диффузионная подвижность атомов, механизм формирования механических свойств и термическая стабильность в них существенно отличаются от аналогичных процессов в уже известных традиционных сплавах. При таком многоэлементном составе ВЭС чаще всего кристаллизуются в виде простых ОЦК, ГЦК и ГПУ однофазных неупорядоченных твердых растворов. Такой характер фазообразования ВЭС обусловлен высоким значением энтропии смешения,  $\Delta S_{\text{смеш}} \geq 13.4$  Дж/моль·К [2].

ВЭС с ГЦК решеткой в последнее время привлекают все большее внимание исследователей из-за своих уникальных свойств: высокой скорости деформационного упрочнения в сочетании с высокой пластичностью до 60 – 70 % и вязким характером разрушения, особенно в области криогенных температур испытания [2]. Из-за низких прочностных свойств в области высоких температур их применение существенно ограничивается. Существует несколько способов повышения прочности материалов [3–5]: твердорастворный, дислокационный, дисперсионный, зернограничный и др.

В настоящей работе представлен комбинированный способ достижения высокопрочного состояния в ГЦК  $(\text{CoCrFeNi})_{96}\text{Mo}_4$  (сплав С1) и  $(\text{CoCrFeNi})_{94}\text{Al}_4\text{Ti}_2$  (сплав С2) (ат. %) ВЭС со средней энергией дефекта упаковки  $\gamma_{\text{ЭДУ}} = 30$  и  $40$  мДж/м<sup>2</sup>, соответственно, за счет введения нанодвойников и наноразмерных частиц  $\mu$ -,  $\sigma$ - и  $\gamma'$ -фаз. К высокопрочным материалам относят материалы с пределом текучести  $\sigma_{0.1} \sim G/100$ , где  $G$  – модуль сдвига. Выбор сплавов С1 и С2 обусловлен следующими обстоятельствами: 1) легирование атомами Mo, Al и Ti большего атомного радиуса по сравнению с атомами, составляющими известный сплав Кантора CoCrFeNiMn, приводит к увеличению уровня напряжений на пределе текучести  $\sigma_{0.1}$ ; 2) сплавы С1 и С2 являются неэквивалентными и в них происходит выделение частиц второй фазы при старении, что дополнительно приводит к повышению напряжений  $\sigma_{0.1}$ . Для развития деформации двойникованием были выбраны кристаллы с ориентацией  $[\bar{1}44]$  с максимальным фактором Шмида для двойникования при деформации растяжением. Нанодвойники вводили при низкотемпературной деформации растяжением до 55 % при 77 К. Некогерентные наноразмерные частицы  $\mu$ -и  $\sigma$ -фаз в сплаве С1 выделяли при старении при 1173 К в течение 24 часов, а когерентные наноразмерные частицы  $\gamma'$ -фазы в сплаве С2 при старении при 923 К в течение 4 часов.

На рис. 1 а представлены данные зависимости осевых напряжений  $\sigma_{0.1}(T)$  в широком температурном интервале от 77 до 873 К для  $[\bar{1}44]$  –кристаллов сплавов С1 и С2 после закалки и комбинированного способа упрочнения. Видно, что температурная зависимость в сплавах С1 и С2 после закалки и комбинированного способа упрочнения имеет вид типичный для ГЦК металлов и их сплавов замещения. На температурной зависимости  $\sigma_{0.1}(T)$  наблюдается два участка [6]: при  $T < 373$  К сильная

температурная зависимость  $\sigma_{0.1}(T)$  (термоактивируемая компонента  $\sigma_{0.1}$ ), а при  $T > 373\text{K}$  слабая зависимость  $\sigma_{0.1}(T)$  (атермическая компонента  $\sigma_{0.1}$ ). В закаленных кристаллах начало пластического течения во всем температурном интервале связано с деформацией скольжением. При 77K в сплаве С1  $\sigma_{0.1}$  оказались выше, чем в сплаве С2, тогда как при  $T > 373\text{K}$  наблюдается обратная картина. В результате температурная зависимость  $\sigma_{0.1}(T)$  в сплаве С1 более сильная и  $\sigma_{0.1}(77\text{ K}) / \sigma_{0.1}(296\text{ K}) = 2.38$ , чем в сплаве С2, где  $\sigma_{0.1}(77\text{ K}) / \sigma_{0.1}(296\text{ K}) = 1.77$ .

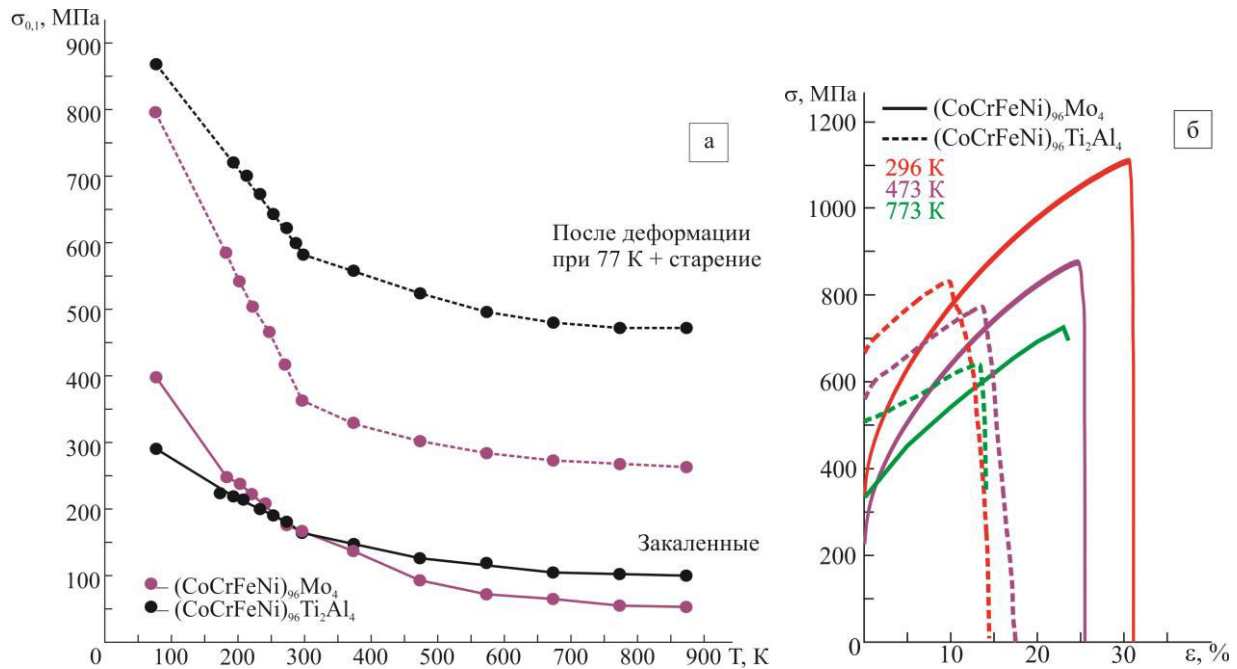


Рис. 1. а – Температурная зависимость осевых напряжений  $\sigma_{0.1}(T)$ ; б – кривые течения  $\sigma(\epsilon)$  после комбинированного способа упрочнения в ГЦК  $(\text{CoCrFeNi})_{96}\text{Mo}_4$  и  $(\text{CoCrFeNi})_{96}\text{Ti}_2\text{Al}_4$  высокоэнтропийных сплавов при деформации растяжением

Комбинированный способ упрочнения приводит к резкому увеличению свойств во всем температурном интервале. Так, в  $[\bar{1}44]$ -кристаллах сплава С1 при выделении некогерентных частиц  $\mu$ - $\sigma$ -фаз  $\sigma_{0.1}$  увеличились на 400 МПа при 77К и на 200 МПа при  $T > 373\text{K}$ . В результате,  $[\bar{1}44]$ -кристаллы сплава С1 в области низких температур стали высокопрочными, так как  $\sigma_{0.1} \approx G/100$ , а при температурах выше комнатной близкими к высокопрочным, где  $\sigma_{0.1} \approx G/220 - G/210$ . В  $[\bar{1}44]$ -кристаллах сплава С2 при выделении когерентных частиц  $\gamma'$ -фазы  $\sigma_{0.1}$  увеличились на 550 МПа при 77К и на 400 МПа при  $T > 373\text{K}$ . В результате,  $[\bar{1}44]$ -кристаллы сплава С2 оказались высокопрочными во всем температурном интервале  $\sigma_{0.1} \approx G/110 - G/100$ . Видно, что при высоких температурах упрочнение от когерентных частиц  $\gamma'$ -фазы и нанодвойников оказывается выше, чем от некогерентных частиц  $\mu$ - $\sigma$ -фаз и нанодвойников, на 200 МПа. Это обусловлено большей объемной долей частиц  $\gamma'$ -фазы и различным механизмом взаимодействия скользящих дислокаций с частицами. В случае когерентных частиц  $\gamma'$ -фазы взаимодействие с дислокациями происходит по механизму срезания, а некогерентных частиц  $\mu$ - $\sigma$ -фаз – по механизму огибания и напряжения для срезания оказываются больше, чем для огибания:  $\sigma_{0.1}(\text{срез}) > \sigma_{0.1}(\text{огиб})$ .

В высокопрочных  $[\bar{1}44]$ -кристаллах сплавов C1 и C2 с самого начала пластического течения развивается двойникование одновременно со скольжением. Это приводит к ослаблению температурной зависимости  $\sigma_{0.1}(T)$ , по сравнению с закаленными кристаллами. После комбинированного способа упрочнения  $\sigma_{0.1}(77 \text{ K}) / \sigma_{0.1}(296 \text{ K}) = 2.19$ , и  $\sigma_{0.1}(77 \text{ K}) / \sigma_{0.1}(296 \text{ K}) = 1.49$ , соответственно, в  $[\bar{1}44]$  – кристаллах сплава C1 и C2. В  $[\bar{1}44]$  – кристаллах сплавов C1 и C2 при  $T > 373 \text{ K}$   $\sigma_{0.1}$  слабо уменьшаются с увеличением температуры испытания, что объясняется медленным ростом частиц из-за замедленной диффузии и наличием двойников, границы которых являются атермическими препятствиями для скользящих дислокаций.

В высокопрочном состоянии монокристаллы сплава C1 характеризуются более высокой пластичностью до 20–30 % в температурном интервале от 77 до 873 K, в отличие от монокристаллов сплава C2, где пластичность составляет 10 – 13 %, что связано с меньшим уровнем напряжений на пределе текучести (рис. 1 б). Коэффициент деформационного упрочнения в монокристаллах сплава C1 выше, чем в монокристаллах сплава C2 (2300 и 1700 МПа при 296 K, 2400 и 1500 МПа при 473 K, 1700 и 1100 МПа при 773 K, соответственно). В монокристаллах сплава C1 из-за более низкой энергии дефекта упаковки двойникование развивается более интенсивно и дает больший вклад в упрочнение при взаимодействии со скольжением, чем в монокристаллах сплава C2. В результате большей пластичности и сильного деформационного упрочнения в кристаллах сплава C1 достигается высокий уровень напряжений перед разрушением, но при этом разрушение сохраняется преимущественно вязким во всем исследованном интервале температур, как и в кристаллах сплава C2.

Итак, исследования на монокристаллах  $(\text{CoCrFeNi})_{96}\text{Mo}_4$  и  $(\text{CoCrFeNi})_{94}\text{Al}_4\text{Ti}_2$  ВЭС показали, что комбинированный способ повышения прочности материалов за счет нанодвойников и наночастиц позволяет получить высокопрочное состояние без значительной потери пластичности и при этом сохранить вязкий характер разрушения.

Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).

#### Литература

1. Zhang Y., Zuo T.T., Tang Z., Gao M.C., et al. Microstructures and properties of high-entropy alloys // Progress in materials science. – 2014. – V. 61. – P. 1–93.
2. Yeh J.-W., Chen Y.-L., Lin S.-J., Chen S.-K. High-entropy alloys – a new era of exploration // Materials science forum. – 2007. – V. 560. – P. 1–9.
3. Киреева И.В., Чумляков Ю.И. Пластическая деформация монокристаллов аустенитных нержавеющей сталей и ГЦК-высокоэнтропийных сплавов. – Томск: Изд-во НТЛ, 2018. – С. 1–22.
4. He J.Y., Wang H., Huang H.L., Xu X.D., et al. A precipitation-hardened high-entropy alloy with outstanding tensile properties // Acta materialia. – 2016. – V. 102. – P. 187–196.
5. Zhao Y.Y., Chen H.W., Lu Z.P., Nieh T.G. Thermal stability and coarsening of coherent particles in a precipitation-hardened  $(\text{NiCoFeCr})_{94}\text{Ti}_2\text{Al}_4$  high-entropy alloy // Acta materialia. – 2018. – V. 147. – P. 184–194.
6. Бернер Р., Кронмюллер Г. Пластическая деформация монокристаллов. – М.: Мир, 1969. – 272 с.

МЕТОД ЭПИТАКСИИ Ge ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ СОЕДИНЕНИЙ III-V  
С ПОДЛОЖКАМИ КРЕМНИЙ-НА-ИЗОЛЯТОРЕ

А.А. Сушков, А.И. Андрианов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Д.А. Павлов

Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

E-mail: sushkovartem@gmail.com

Монолитная интеграция полупроводников III-V с КНИ (кремний-на-изоляторе) с использованием методов эпитаксиального осаждения актуальна в настоящее время. Использование разных материалов со своими преимуществами, расположенных в непосредственной близости друг от друга на одном кристалле, может обеспечить недоступное до сих пор сочетание различных функциональных возможностей и откроет путь для новых схем и приложений, например, сверхэффективные схемы для портативных, мобильных приложений, а также самочувствительных и самонастраивающихся схем [1]. Преимуществом подложки КНИ перед подложкой Si является наличие скрытого слоя SiO<sub>2</sub> в КНИ. Разница более чем в два раза показателя преломления Si и SiO<sub>2</sub> (3.5 и 1.45 соответственно) упрощает задачу создания волноводной связи между элементами на КНИ, а также способствует их высокой плотности интеграции [2].

Росту соединений III-V на КНИ препятствуют такие же фундаментальные проблемы, какие встречаются при формировании III-V на подложке Si и подробно описаны в обзорных публикациях [3]. Для решения фундаментальных проблем при эпитаксии материалов III-V на Si применяется комплекс различных методов [3], в том числе формирование буферных слоев Ge/Si между III-V и Si [4, 5]. Однако температурные режимы эпитаксии слоев Ge/Si на подложках КНИ и Si различаются из-за наличия скрытого слоя SiO<sub>2</sub> в КНИ. Для метода молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) с использованием режима двухстадийного роста на установке Riber SIVA-21 температурные режимы роста Ge/Si слоев на КНИ были подобраны, однако в методе газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD, hot-wire chemical vapor deposition) трудности, связанные с наличием SiO<sub>2</sub>, на данный момент не были решены.

В связи с тем, что задача интеграции III-V на КНИ через буферные слои Ge/Si актуальна, требуется поиск метода формирования слоя Ge, на котором можно было бы вырастить слои III-V, не уступающие по своему кристаллическому и оптическому качеству слоям III-V на буферных слоях Ge/Si, сформированных на подложке Si.

В данной работе был выращен слой GaAs через дислокационные фильтры AlInAs/GaAs и зародышевый слой AlGaAs на платформах Ge/Si (001) (образец А), Ge/КНИ (001) (образец В) и подложке GaAs (001) (образец С). Слой Ge в платформе Ge/Si (001) был сформирован методом HWCVD, а в платформе Ge/КНИ (001)<sup>о</sup> — методом МПЭ с применением режима двухстадийного роста и оптимизированных температурных режимов для эпитаксии на КНИ. Рост слоев III-V в образцах А, В и С осуществлялся в одном процессе методом химического осаждения металлоорганических соединений из газовой фазы.

Структурные свойства образцов оценивались методами рентгеновской дифрактометрии (РД), селективного травления дефектов и сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (СПЭМ).

Оптическое качество эпитаксиальных слоев оценивалось с помощью спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ).

Исследование структурных и оптических свойств слоев GaAs свидетельствует о преимуществе образца В перед образцом А и более существенном преимуществе образца С перед образцами А и В. Методом СПЭМ было установлено, что линейная плотность прорастающих дислокаций как в слое Ge, так и в слоях III-V в образце В на порядок меньше, чем в образце А. Данный факт подтверждается методами РД и селективного травления дефектов: FWHM пика от GaAs в образце С на кривой качания на порядок ниже, чем в образцах А и В, а в В меньше, чем в А; плотность ямок травления от дислокаций на порядок меньше в образце С, а в образце В меньше, чем в А. На спектрах ФЛ FWHM пика GaAs образца С в 1.3 раза меньше, а интенсивность в 2 с лишним раза больше, чем для образцов А и В. Средние значения по площади FWHM пика GaAs образцов А и В близки по значению, а интенсивность в 1.2 раза выше в случае образца В.

Литературный обзор позволил сделать вывод о схожих структурных и оптических свойствах слоев III-V на Ge/КНИ образца В в сравнении с подобными гетероструктурами, в которых слой Ge выращивался таким же методом, но на платформах Ge/Si, в других работах.

Проведенный анализ результатов указывает на тот факт, что метод МПЭ с применением режима двухстадийного роста может быть использован для формирования слоя Ge в платформе Ge/КНИ (001), ориентированной на эпитаксиальный рост слоев III-V со структурными и с оптическими свойствами, не уступающими слоям III-V, сформированным на платформе Ge/Si (001). Однако требуется дальнейшее развитие технологии интеграции III-V с КНИ через буферные слои Ge/Si для приближения к характеристикам структур, получаемых на подложках GaAs.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90229. Исследование поддержано стипендией Президента РФ (СП-1790.2022.5).

#### Литература

1. Chia C.K. Numerical simulation of impact ionization in Ge/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As avalanche photodiode // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – V. 97. – № 7. – P. 073501-1–073501-3.
2. Vlasov Yu.A., McNab S.J. Losses in single-mode silicon-on-insulator strip waveguides and bends // *Opt. Express.* – 2004. – V. 12. – № 8. – P. 1622–1631.
3. Park J.S., et al. Heteroepitaxial Growth of III-V Semiconductors on Silicon // *Crystals.* – 2020. – V. 10. – P. 1163-1–1163-36.
4. Yurasov D.V., et al. Impact of Growth and Annealing Conditions on the Parameters of Ge/Si(001) Relaxed Layers Grown by Molecular Beam Epitaxy // *Semiconductors.* – 2015. – V. 49. – № 11. – P. 1415–1420.
5. Shengurov V.G., et al. Thin Single-Crystal Ge Layers on 2" Si Substrates // *Semiconductors.* – 2015. – V. 41. – № 1. – P. 36–39.

**УСЛОВИЯ ПРОВЕДЕНИЯ СТАРЕНИЯ В МАРТЕНСИТНОМ СОСТОЯНИИ ПОД  
СЖИМАЮЩЕЙ НАГРУЗКОЙ ВДОЛЬ [110]-ОРИЕНТАЦИИ В ОДНОФАЗНЫХ  
МОНОКРИСТАЛЛАХ ФЕРРОМАГНИТНОГО СПЛАВА  $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$**

А.Б. Тохметова, И.Д. Курлевская

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: aida-tx@mail.ru

Ферромагнитные сплавы Гейслера на основе NiFeGaCo, обладающие такими функциональными свойствами как эффект памяти формы и сверхэластичность, испытывают большие обратимые деформации при сжатии до -6,2 % и растяжении до +13,5 % при  $L_{21}/B_{2-10}/14M-L_{10}$  мартенситном превращении (МП). Известно, что старение в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой (СМН), основанное на эффекте стабилизации мартенсита, способствует расширению уникальных свойств материалов и наведению двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ) и ферроэластичности (ФЭ) [1, 2]. ДЭПФ наблюдается при изменении температуры в свободном состоянии за счет роста ориентированного варианта мартенсита, стабилизированного при СМН, тогда как ФЭ проявляется при температурах ниже температуры мартенситного перехода в циклах нагрузка/разгрузка посредством переориентации мартенситного варианта в другой вариант по отношению к внешней нагрузке. На характеристики проявления вышеперечисленных свойств (величину обратимой деформации, критических напряжений образования мартенсита, термического и механического гистерезисов) влияет несколько факторов. Во-первых, для наблюдения обратимых деформаций при проявлении ДЭПФ и ФЭ вдоль [001]-направления ( $\epsilon_{tr} = +13,5\%$ ) необходимо проводить СМН вдоль перпендикулярного [110]-направления [2, 3]. СМН вдоль [110]-направления сопровождается появлением сдвойникового варианта мартенсита  $\epsilon_{CVP}$ , и затем происходит его последующее раздвойникование  $\epsilon_{detw}$  под нагрузкой ( $\epsilon_{tr} = \epsilon_{CVP} + \epsilon_{detw} = -6,2\%$ ), что является первым фактором, и позволяет стабилизировать частично или полностью раздвойникованный мартенсит. Во-вторых, при СМН может происходить химическая и механическая стабилизация мартенсита, где первая связана с перераспределением точечных дефектов и атомов разного сорта в соответствии с симметрией мартенсита и не приводит к появлению необратимой деформации [4]. Вторая (механическая стабилизация) характеризуется образованием дислокаций, закреплением межфазных границ дефектами и сопровождается появлением необратимой деформации при СМН. Поэтому целью работы является установить закономерности влияния различных условий СМН вдоль [110]-ориентации на характеристики ДЭПФ и ФЭ вдоль [001]-направления в однофазных монокристаллах ферромагнитного сплава  $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ .

Выращенные методом Бриджмена монокристаллы сплава  $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$  подвержены высокотемпературному отжигу от  $T = 1448\text{ K}$  в течение 1 часа с последующей закалкой в воду для получения однородной структуры материала. Исследования проводились на образцах в форме параллелепипеда размером  $3 \times 3 \times 6\text{ мм}^3$ , имеющих [110]-,  $[1\bar{1}0]$ - и [001]-ориентации. Погрешность измерений при исследовании СЭ и проведении СМН составляет 2 МПа, тогда как при проявлении ДЭПФ и ФЭ равна 0,3 %.

Исходя из кривых СЭ, для исследования СМН выбрана повышенная температура при  $T = 423\text{ K}$  (рис. 1 а, б) для эффективности происходящих при СМН диффузионных процессов. Исследование



проведено на двух образцах, где на одном образце отсутствует пластическая деформация  $\epsilon_{\text{пласт}}$  (рис. 1 а), а на другом наблюдается  $\epsilon_{\text{пласт}}$ , что приводит к увеличению необратимой деформации и величины механического гистерезиса (рис. 1 б). За счёт проявления пластической деформации величиной 0,7 % последующий второй цикл «нагрузка/разгрузка» меняет кривую течения, при этом модуль упругости аустенита снижается в отличие от СЭ без  $\epsilon_{\text{пласт}}$ , где второй цикл не меняет кривую СЭ.

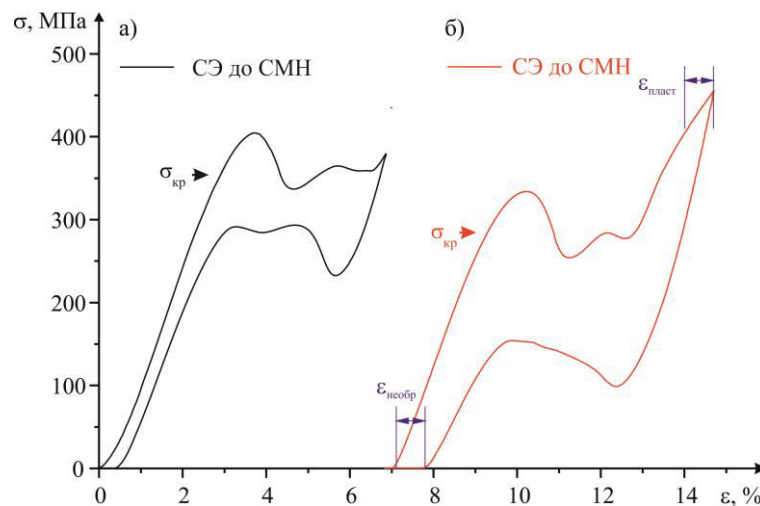


Рис. 1. Кривые СЭ вдоль [110]-ориентации в однофазных монокристаллах сплава  $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ :  
 а – без пластической деформации; б – с пластической деформацией

СМН при обоих условиях проводилось вдоль [110]-направления при  $T = 423 \text{ K}$  в течение 1 часа под нагрузкой 400 – 430 МПа при заданных деформациях 7,0 – 7,2 %. После выдержки при разгрузке монокристалла наблюдается необратимая деформация 4,3 %, что связано со стабилизацией мартенсита при СМН. Поэтому в первом цикле проявления ДЭПФ необходим перегрев выше температуры старения в мартенсите. После I режима СМН ( $T = 423 \text{ K}$ , 1 час,  $\sigma = 430 \text{ МПа}$ ,  $\epsilon_{\text{зад}} = 7,0 \%$ ) на монокристаллах  $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$  вдоль [001]-направления наблюдается ДЭПФ с растягивающей обратимой деформацией +8,1 %. Термический гистерезис  $\Delta T$ , характеризующий рассеяние энергии, составляет 73 K. II режим старения ( $T = 423 \text{ K}$ , 1 час,  $\sigma = 400 \text{ МПа}$ ,  $\epsilon_{\text{зад}} = 7,2 \%$ ), где наблюдалась пластическая деформация мартенсита при СЭ, наводит ДЭПФ с величиной растягивающей обратимой деформации в 2 раза меньшей, чем при I режиме, термический гистерезис равен  $\Delta T = 54 \text{ K}$ .

Исследование ФЭ вдоль [001]-направления показало, что после I режима СМН при температуре  $T = 348 \text{ K}$  наблюдается большая обратимая деформация с величиной -11,9 % (при  $\epsilon_{\text{зад}} = 13 \%$ ) за счет переориентации стабилизированного ориентированного варианта мартенсита в циклах нагрузка/разгрузка, что почти в 2 раза превышает величину обратимой деформации при ЭПФ ( $\approx 6 \%$ ) (рис. 2). Деформация сопровождается, во-первых, низким коэффициентом деформационного упрочнения  $\theta$ , во-вторых, низкими напряжениями переориентации мартенситных вариантов равными  $\sigma_{\text{кр}} = 12 \text{ МПа}$ , в-третьих, узким механическим гистерезисом  $\Delta\sigma$ , характеризующим рассеянием энергии, величиной 30 МПа. Во II режиме СМН, где проявилась механическая стабилизация, кривые ФЭ характеризуются высоким коэффициентом деформационного упрочнения  $\theta$ , высоким напряжением переориентации  $\sigma_{\text{кр}} = 39 \text{ МПа}$ , а также большим механическим гистерезисом в 2,6 раза по сравнению с I режимом. Обратимая деформация при таком режиме СМН при  $\epsilon_{\text{зад}} = 15 \%$  составляет -13,2 %.

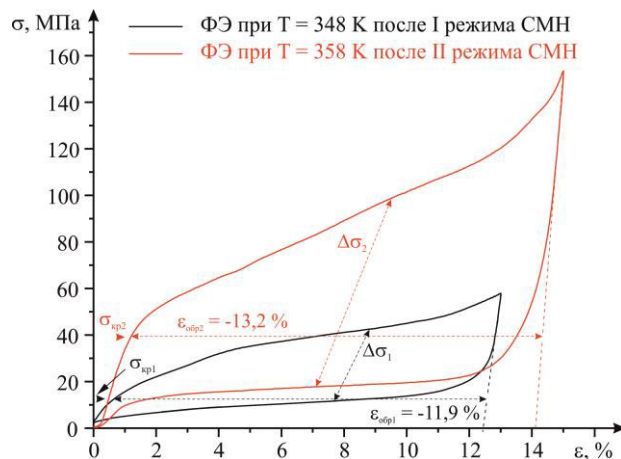


Рис. 2. Исследование ФЭ вдоль [001]-ориентации в циклах нагрузка/разгрузка после I и II режима СМН в однофазных монокристаллах  $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$

Таким образом, экспериментально установлено влияние условий СМН на характеристики проявления ДЭПФ и ФЭ. СМН при  $T = 423$  К, 1 час под нагрузкой  $\sigma = 430$  МПа с  $\epsilon_{зад} = 7,0$  %, при котором механическая стабилизация минимальна, обладают высокой эффективностью для наведения растягивающей обратимой деформации величиной  $+8,1$  % при ДЭПФ вдоль [001]-направления. Полученные кривые ФЭ при  $T = 358$  К при таком режиме СМН обладают низкими напряжениями переориентации мартенситных вариантов, механическим гистерезисом и коэффициентом деформационного упрочнения с большими обратимыми деформациями в циклах нагрузка/разгрузка величиной  $-11,9$  %.

Авторы выражают благодарность Панченко Е.Ю. и Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-19-00153.

### Литература

1. Otsuka K., Ren X. Mechanism of martensite aging effects and new aspects // Mater. Sci. Eng., A. – 2001. – V. 312. – P. 207–218.
2. Effect of Stress-Induced Martensite Aging on Martensite Variant Reorientation Strain in NiMnGa Single Crystals / Panchenko E. [et al.] // Shap. Mem. Superelasticity. – 2020. – V. 6. – P. 29–34.
3. The Influence of Compressive-Stress-Induced Martensite Aging on the Two-Way Shape Memory Effect in Single Crystals of  $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$  Ferromagnetic Alloy / A. B. Tokhmetova, N. G. Larchenkova, E. Yu. Panchenko, Yu. I. Chumlyakov // Technical Physics Letters. – 2020. – V. 46. – № 6. – P. 621–624.
4. Chemical and mechanical stabilization of martensite / S. Kustov [et al.] // Acta Mater. – 2004. – V. 52. – P. 4547–4559.

**ОКСИДНЫЙ ПОВЕРХНОСТНЫЙ СЛОЙ И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ  
СВОЙСТВА В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$**

И.Д. Фаткуллин, А.С. Ефтифеева

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail fatkullin\_92@mail.ru

Известно [1], что гетерофазные сплавы NiTi с высоким содержанием никеля более 50,6 % широко применяются в сфере медицины благодаря тому, что они характеризуются высокими прочностными свойствами (<700 МПа) и обратимой деформацией при B2-R-B19' мартенситном превращении (МП) 8 – 10 %. Однако выделение ионов никеля с поверхности образцов остается актуальной проблемой, так как ионы никеля крайне токсичны для человека и понижают биосовместимость имплантов из NiTi с органами и тканями человеческого тела. Именно поэтому, для повышения биосовместимости NiTi используют окисление на воздухе для получения защитной безникелевой пленки на поверхности сплава. Однако работ по изучению влияния оксидной пленки на развитие термоупругих МП в сплавах TiNi существует не достаточное количество для разработки таких сплавов с гарантированными функциональными свойствами. Поэтому целью данной работы является изучение влияния поверхностных оксидных фаз на развитие МП и функциональные свойства в монокристаллах сплавах  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$ .

Монокристаллы  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$  выращены методом Бриджмена. Образцы для исследования при деформации сжатием имели форму параллелепипеда размером 3 x 3 x 6 мм<sup>3</sup>. Ось деформации соответствует направлению вблизи [001]<sub>B2</sub>. Образцы монокристаллов отжигали в трубке в атмосфере гелия при 1253 К в течение 1 часа с последующем закаливанием в воду. Далее монокристаллы старили при 823 К в течение 1 часа, одну часть образцов – на воздухе для получения поверхностной оксидной пленки, а вторую часть – в атмосфере гелия.

В таблице 1 представлены химический состав и толщина слоев, экспериментально полученных с помощью просвечивающего электронного микроскопа Hitachi HT-7700 при исследовании вдоль поперечного сечения монокристаллов, состаренных на воздухе.

Итак, экспериментально установлено, что слой 1 представляет поверхностную оксидную пленку толщиной d=250 нм, который состоит из титана и кислорода (таблица 1). Следующий более тонкий слой 2 (d=170 нм) обогащен по никелю (таблица 1). Подобное расслоение вблизи поверхности сплавов на основе TiNi наблюдали в [2]. Далее под слоем 2 наблюдается B2-матрица, которая содержит частицы  $Ti_3Ni_4$  размером 300 – 400 нм, выделившиеся в процессе старения. Такая же гетерофазная матрица характерна и для состаренных в гелии монокристаллов. Частицы  $Ti_3Ni_4$  приводят к уменьшению содержания никеля в матрице, упрочняют матрицу и влияют на процессы зарождения мартенсита.

Таблица 1. Химический состав слоев, образовавшихся после старения при температуре 823 К в течение 1 часа на воздухе в монокристаллах  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$

Слой	d, нм	Ni, ат. %	Ti, ат. %	O, ат. %
1	250	0,25	21,79	77,95
2	170	75,5	24,5	-

Температуры термоупругих МП были получены методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), результаты представлены на рисунке 1. Состаренные монокристаллы  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$  испытывают двухстадийное B2-R-B19' МП. Температура  $T_R$  связана с B2→R МП, температуры  $M_s$  и  $M_f$  характеризуют начало и конец R→B19' МП, температуры  $A_s$  и  $A_f$  – начало и конец B19'→B2 МП. Из рисунка 1 видно, что оксидная пленка приводит к незначительному снижению температур  $M_s$ ,  $M_f$  на 6 К, а  $A_s$ ,  $A_f$  изменяются в пределах погрешности измерений ( $\pm 1$  К). Температура  $T_R$  наоборот возрастает на 4 К, по сравнению с кристаллами без поверхностной пленки. Оксидный слой создает дополнительные сжимающие напряжения вблизи поверхности образца [2], что может приводить к увеличению  $T_R$  в соответствие с уравнением Клапейрона-Клаузиуса [3] и релаксации внутренних напряжений вблизи оксидного слоя. Одновременное снижение температур начала и конца МП на одинаковую величину не приводит к изменению интервалов прямого и обратного МП при наличии на монокристаллах оксидной пленки и, соответственно, они равны  $\Delta_1=M_s-M_f=17$  К и  $\Delta_2=A_f-A_s=13-15$  К. Однако, наличие оксидной пленки приводит к росту термического гистерезиса  $\Delta T=A_f-M_s=49$  К по сравнению с образцами без поверхностного оксидного слоя  $\Delta T=46$  К.

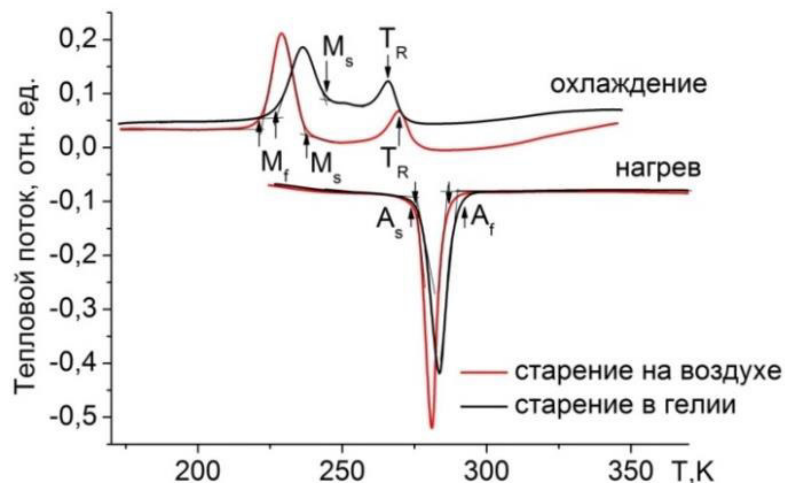


Рис. 1. ДСК кривые при охлаждении/нагреве для состаренных монокристаллов сплава  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$

Было рассмотрено влияние поверхностной оксидной пленки на эффект памяти формы (ЭПФ) в циклах охлаждение/нагрев под нагрузкой. На рисунке 2 представлены примеры кривых деформации от температуры  $\epsilon(T)$  в циклах охлаждение/нагрев под сжимающей нагрузкой 100 МПа для монокристаллов сплава  $Ni_{50,6}Ti_{49,4}$ , состаренных на воздухе и в атмосфере гелия. Как видно, кривые  $\epsilon(T)$  при развитии ЭПФ практически идентичные и слабо зависят от термообработки. Максимальные значения  $\epsilon_{ЭПФ}$  для образцов, состаренных в гелии и на воздухе одинаковые и равны  $\epsilon_{ЭПФ}=3,3-3,5$  % ( $\pm 0,3$  %). Отсутствие влияния поверхностной фазы на величину обратимой деформации связано с тем, что напряжения, образующиеся вблизи поверхностной фазы слишком малы по сравнению с внешними приложенными напряжениями.

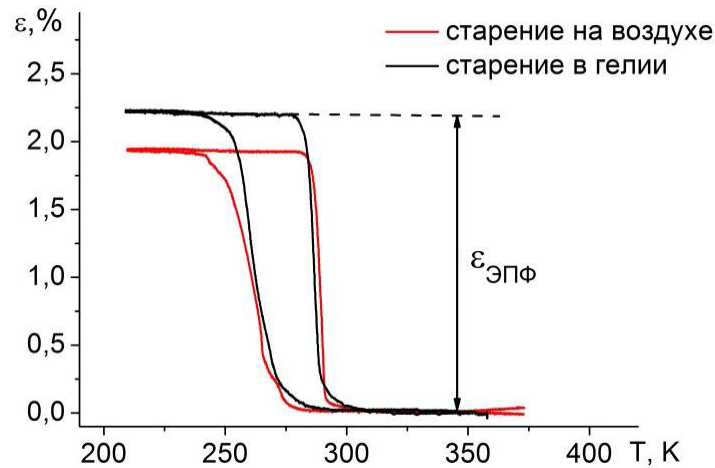


Рис. 2. Кривые  $\varepsilon(T)$  при охлаждении/нагреве под сжимающей нагрузкой 100 МПа для состаренных монокристаллов сплава  $\text{Ni}_{50,6}\text{Ti}_{49,4}$

Экспериментально установлено, что тонкая оксидная пленка не оказывает влияние на температурную зависимость сверхэластичности (СЭ) и ее циклическую стабильность в монокристаллах  $\text{Ni}_{50,6}\text{Ti}_{49,4}$ . Исследование циклической стабильности СЭ при  $T=296$  К показало, что наибольшая деградация кривых  $\sigma(\varepsilon)$  наблюдается в первых 10 циклах нагрузка/разгрузка – снижение критических напряжений и уменьшение температурного гистерезиса. Далее в циклах от 11 до 100 деградация СЭ не наблюдается. Изменение СЭ параметров в первых 10 циклах связана с образованием дислокаций и остаточного мартенсита, которые в последующих циклах облегчают зарождение мартенсита.

Таким образом, оксидный поверхностный слой толщиной 250 нм и составом O – 77,95 ат. %, Ti – 21,79 ат. %, Ni – 0,25 ат. % в монокристаллах сплава  $\text{Ni}_{50,6}\text{Ti}_{49,4}$ , полученный путем старения в трубке в атмосфере воздуха при 823 К в течение 1 часа, слабо влияет на функциональные свойства (ЭПФ и циклическую стабильность СЭ) при развитии МП под нагрузкой. Развитие МП в свободном состоянии при охлаждении/нагреве в монокристаллах с оксидным слоем приводит к увеличению на 4 К температуры  $T_R$ , характеризующей начало B2→R МП, и небольшое увеличение на 3 К термического гистерезиса  $\Delta T=A_T-M_s$  при развитии R-B19' и B19'-B2 обратимых МП.

Авторы выражают благодарность Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование проведено при поддержке гранта в соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации № 220 от 09 апреля 2010 года (Соглашение № 075-15-2021-612 от 04 июня 2021 года).

#### Литература

1. Гюнтер В.О., Ходоренко В.Н., Ясенчук Ю.Ф., Чекалкин Т.Л. Никелид титана: медицинский материал нового поколения. – Т.: [Изд-во МИЦ], 2006. – 286 с.
2. Nam T.H., Chung D.W., Lee H.W., Kim J.H., Choi M.S. Effect of the surface oxide layer on transformation behavior and shape memory characteristics of Ti-Ni and Ti-Ni-Mo alloys // Journal of material science. – 2003. – V. 38. – P. 1333–1338.
3. Otsuka K., Wayman C.M. Shape Memory Materials. – Cambridge University Press, 1999. – 300 p.

**ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК НА ЦИКЛИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ И ЭЛАСТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В  
МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$**

Э.И. Янушоните

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

E-mail: yanushonite98@mail.ru

В последние годы в сплавах с памятью формы активно проводятся исследования закономерностей эластокалорического эффекта (ЭКЭ), поскольку особенно остро стоит вопрос о разработке материалов для экологически чистых твердотельных систем охлаждения, работающих в широком диапазоне температур без использования отрицательно влияющих на окружающую среду хладагентов. Данный эффект связан с обратимым изменением энтропии или температуры твердого тела в процессе развития мартенситных превращений (МП) под нагрузкой в изотермических или адиабатических условиях, соответственно [1].

Одним из перспективных сплавов с памятью формы для создания твердотельных холодильников являются ферромагнитные сплавы на основе NiFeGa, испытывающие B2(L<sub>21</sub>)-10M/14M-L1<sub>0</sub> МП. Известно, что с помощью термомеханических обработок можно улучшить функциональные свойства сплавов, а именно упрочнить материал, расширить рабочий интервал температур и гарантировать высокую циклическую стабильность функциональных свойств [2]. В связи с этим цель данной работы заключается в исследовании влияния термомеханических обработок на циклическую стабильность сверхэластичности (СЭ) и ЭКЭ в монокристаллах сплава Ni<sub>54</sub>Fe<sub>19</sub>Ga<sub>27</sub>.

Монокристаллы Ni<sub>54</sub>Fe<sub>19</sub>Ga<sub>27</sub> выращены методом Бриджмена. Температуры МП определены методом дифференциально сканирующей калориметрии (ДСК). Микроструктуру монокристаллов изучали на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) Hitachi HT-7700. Для механических испытаний были использованы образцы в форме прямоугольных параллелепипедов с площадью поперечного сечения  $S = 9 \text{ мм}^2$  и длиной  $L = 6 \text{ мм}$ . Ось сжатия соответствует длинной стороне образца и имеет кристаллографическую ориентацию  $[001]_A$ . Величина адиабатического охлаждения  $\Delta T_{\text{ад}}$  определялась как разница между температурой испытания и минимальной температурой на образце при обратном эндотермическом МП в условиях СЭ. Измерения температуры образца проводились высокочувствительной термопарой Т-типа в циклах нагрузка/разгрузка со скоростью нагрузки  $\dot{\epsilon}_1 = 2,0 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$  и высокой скоростью разгрузки  $\dot{\epsilon}_2 = 6,7 \cdot 10^{-1} \text{ с}^{-1}$  для приближения условий эксперимента к адиабатическим.

Исходные монокристаллы Ni<sub>54</sub>Fe<sub>19</sub>Ga<sub>27</sub> подвергли старению при  $T = 773 \text{ К}$ , 1 ч и  $T = 1373 \text{ К}$ , 0,5 ч. Исследования микроструктуры монокристаллов показали, что старение при  $T = 773 \text{ К}$  в течение 1 часа с последующим медленным охлаждением на воздухе приводит к выделению частиц  $\gamma'$ -фазы с упорядоченной L1<sub>2</sub> кристаллической структурой размером от 170 до 500 нм. Тогда как старение при 1373 К в течение 0,5 часа приводит к выделению некогерентных частиц  $\gamma'$ -фазы с упорядоченной L1<sub>2</sub> кристаллической структурой размером 5 – 35 мкм с объемной долей до 24 %. Таким образом, данный выбор термомеханических обработок позволяет создать естественные наноккомпозиты, в которых

XVIII РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ СТУДЕНЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО  
ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА. 28 – 31 марта 2022, ТОМСК

матрица испытывает термоупругое МП, а дисперсные частицы  $\gamma'$ -фаз – не испытывают, и варьировать размер частиц.

Методом ДСК для всех исследуемых состояний монокристаллов  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$  определены температуры МП и тепловые характеристики, представленные в таблице 1. Состаренные монокристаллы  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$  при  $T = 773 \text{ K}$ , 1 ч, характеризуются более низкими температурами МП в отличие от исходных кристаллов и состаренных при  $T = 1373 \text{ K}$ , 0,5 ч, которые демонстрируют самые высокие температуры МП.

Таблица 1. Характеристические температуры и тепловые характеристики МП исходных и состаренных монокристаллов  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$

Состояние	$M_S, \text{K}$	$M_F, \text{K}$	$A_S, \text{K}$	$A_F, \text{K}$	$\Delta H^{A-M}, \text{ Дж/г}$	$\Delta H^{M-A}, \text{ Дж/г}$	$C_p, \text{ Дж/(кг·K)}$	$\Delta T_{ad}^{theor}, \text{ K}$
Исходное	276	265	280	289	-4,51	4,68	488	9,6
Старение при 773 К, 1 ч	259	245	257	270	-4,2	4,4	434	10,1
Старение при 1373 К, 0,5 ч	281	261	274	295	-3,48	2,91	418	6,9

На основе полученных экспериментальных данных выполнены расчеты максимальной величины ЭКЭ  $\Delta T_{ad}^{theor}$ :

$$\Delta T_{ad}^{theor} = -\frac{\Delta H}{C_p} \quad (1)$$

При оценке по формуле (1) использовались величины  $\Delta H$  для обратного превращения, поскольку ЭКЭ исследуется при развитии обратного МП под нагрузкой (табл. 1).

Экспериментально показано, что исходные  $[001]_A$ -монокристаллы характеризуются высокими прочностными свойствами аустенита и мартенсита (800 – 1500 МПа), отсутствием процессов раздвойнивания кристаллов  $L1_0$ -мартенсита под нагрузкой, что приводит к проявлению СЭ с узким механическим гистерезисом  $\Delta\sigma = 35 - 50 \text{ МПа}$  и стабильной величиной  $\Delta T_{ad} = (11,8 \pm 0,5) \text{ K}$  в широком температурном интервале  $\Delta T_{C\bar{S}} = 195 \text{ K}$  от 298 К до 493 К. Оценочное значение  $\Delta T_{ad}^{theor}$  составляет 9,6 К.

По сравнению с исходным состоянием высокопрочные  $[001]_A$ -монокристаллы, содержащие наноразмерные частицы  $\gamma'$ -фазы, выделившиеся за счет старения при 773 К, 1 ч, демонстрируют более широкий в 1,4 раза температурный интервал проявления СЭ  $\Delta T_{C\bar{S}} = 270 \text{ K}$  (от 278 до 548 К) и ЭКЭ со стабильной величиной адиабатического охлаждения  $\Delta T_{ad} \approx (11,1 \pm 0,5) \text{ K}$ , оценочное значение  $\Delta T_{ad}^{theor} = 10,1 \text{ K}$ , механический гистерезис равен  $\Delta\sigma \approx 60 - 67 \text{ МПа}$ . Широкий температурный интервал проявления СЭ обусловлен, во-первых, более низкой температурой  $A_F = 270 \text{ K}$  в состаренных кристаллах по сравнению с исходным состоянием ( $A_F = 289 \text{ K}$ ). Во-вторых, в состаренных кристаллах наблюдается более высокое сопротивление дислокационному скольжению при развитии МП под нагрузкой за счет упрочнения матрицы наноразмерными частицами  $\gamma'$ -фазы, что расширяет температурный интервал проявления СЭ и ЭКЭ в сторону высоких температур.

Высокотемпературное старение при  $T = 1373$  К, 0,5 приводит к увеличению температур МП, что способствует сужению температурного интервала СЭ  $\Delta T_{CЭ} = 255$  К (от 313 до 568 К) по сравнению с низкотемпературным старением при 773 К, 1 ч. Монокристаллы с некогерентными частицами, состаренные при 1373 К, 0,5 ч, характеризуются более низкими значениями  $\Delta T_{ad} = (9,7 \pm 0,5)$  К и  $\Delta T_{ad}^{theor} = 6,9$  К по сравнению с исходными и состаренными при 773 К, 1 ч. Величина обратимой деформации и механического гистерезиса  $\Delta\sigma$  при проявлении СЭ имеют высокие значения, особенно при повышенных температурах испытания  $T \geq 500$  К  $|\varepsilon_{об}| = (3,0 - 3,2)$  % и  $\Delta\sigma \approx 430$  МПа.

Разница величин  $\Delta T_{ad}$  и  $\Delta T_{ad}^{theor}$  во всех трех состояниях может быть связана с различной последовательностью развития термоупругих B2(L2<sub>1</sub>)-10M/14M-L1<sub>0</sub> МП в циклах нагрузка/разгрузка в монокристаллах Ni<sub>54</sub>Fe<sub>19</sub>Ga<sub>27</sub> и требует дальнейшего исследования.

Для практического применения важным параметром является циклическая стабильность СЭ и ЭКЭ. При температурах вблизи начала интервала СЭ  $T = 323$  К в состаренных монокристаллах при 773 К, 1 ч и при  $T = 373$  К в состаренных при 1373 К, 0,5 ч исследована циклическая стабильность СЭ и ЭКЭ в циклах нагрузка/разгрузка от 1 до 150. Экспериментально установлено, что гетерофазные [001]<sub>A</sub>-монокристаллы Ni<sub>54</sub>Fe<sub>19</sub>Ga<sub>27</sub>, демонстрируют высокую циклическую стабильность СЭ и ЭКЭ независимо от размера частиц  $\gamma'$ -фазы. В данных кристаллах процессы деградации СЭ наблюдаются только в первых трех циклах. Первый цикл характеризуется необратимой деформацией до 0,7 % и в последующих 2–3 циклах наблюдается изменение критических напряжений образования мартенсита и снижение величины механического гистерезиса. Такой эффект первого цикла характерен для сплавов с памятью формы при проявлении СЭ [3]. Увеличение числа циклов нагрузка/разгрузка от 1 до 150 не оказывает влияние на величину  $\Delta T_{ad} = 9,0$  К (состаренные при 773 К, 1 ч),  $\Delta T_{ad} = 8,5$  К (состаренные при 1373 К, 0,5 ч). Характеристики СЭ остаются постоянными с 4 по 150 циклы.

Таким образом установлено, что старение при 773 К, 1 ч является наиболее эффективным способом улучшения функциональных свойств, поскольку приводит к широкому температурному интервалу проявления СЭ  $\Delta T_{CЭ} = 270$  К с максимальным ЭКЭ  $\Delta T_{ad} \approx (11,1 \pm 0,5)$ , способствует высокой циклической стабильности СЭ и ЭКЭ до 150 циклов нагрузка/разгрузка, и приводит к созданию перспективных материалов для твердотельного охлаждения.

Автор выражает благодарность Панченко Е.Ю. и Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Электронно-микроскопические исследования образцов выполнены на оборудовании Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-19-00153.

#### Литература

1. S. Qian, [et al.]. A review of elastocaloric cooling: materials, cycles and system integrations // Int. J. Refrig. – 2016. – V. 64. – P. 1–19.
2. R. Santamarta, [et al.]. Effect of ageing on the martensitic transformation of Ni–Fe–Ga alloys // Scripta Materialia. – 2006. – V. 54. – № 6. – P. 1105–1109.
3. K. Gall, H.J. Maier. Cyclic deformation mechanism in precipitated NiTi shape memory alloys // Acta Mater. – 2002. – V. 50. – № 18. – P. 4643–4657.



