



Синтез и сверхпроводимость в гексагидриде иттрия $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$

Исполнители: Троян И.А., Иванова А.Г., Гаврилюк А.Г., Любутин И.С. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Д. В. Семенов, А. Г. Квашнин, А. Р. Оганов (Сколковский институт науки и технологий, Инновационный центр Сколково), А. В. Садаков, О.А. Соболевский, В. М. Пудалов (Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН), V.B. Prakapenka, E. Greenberg (Center for Advanced Radiation Sources, The University of Chicago, USA), V.V. Struzhkin (Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Shanghai, China), A. Bergara, I. Errea, R. Bianco (Centro de Física de Materiales CFM CSIC-UPV/EHU, Spain), M. Calandra, F. Mauri, L. Monacelli (Dipartimento di Fisica, Università di Roma Sapienza, Roma, Italy), R. Akashi (Department of Physics, University of Tokyo, Japan)

При высоком давлении выполнен направленный синтез высокотемпературного сверхпроводника $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$, у которого теоретически предсказано значение $T_C \sim 270\text{-}280$ К с верхним критическим магнитным полем до 75 Тесла. Экспериментально установлено, что кубический гидрид YH_6 может быть приготовлен при давлениях 160-180 ГПа посредством лазерного нагрева металлического иттрия в аммиачно-борной среде (BH_3NH_3) при температуре выше 2400 К. Такой синтез проводился в камерах высокого давления с алмазными наковальнями. Установлено, что в процессе синтеза наряду с фазой $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$, в смеси присутствуют соединения $I4/mmm\text{-YH}_4$ и $Imm2\text{-YH}_7$. Обнаружено, что гидрид $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$, сжатый до 166 ГПа, переходит в сверхпроводящее состояние при температуре $T_C \sim 224$ К. Эта температура неожиданно оказалась более низкой, чем предсказанная теоретически (> 273 К).

В настоящее время это вторая по величине критическая температура, которая была экспериментально достигнута в сжатых гидридах. Наш эксперимент показывает большой потенциал системы Y-H. С увеличением содержания водорода фаза $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$ может превратиться в фазу $fcc\text{-YH}_{10}$, которая имеет наилучшие шансы стать сверхпроводником при комнатной температуре.

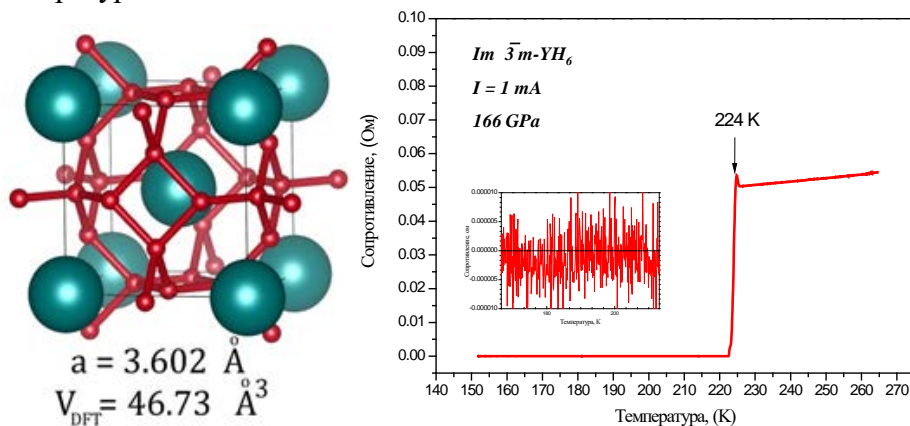


Рисунок 1. Кристаллическая структура гексагидрида иттрия $Im\bar{3}m\text{-YH}_6$ (a) и экспериментальная зависимость электросопротивления от температуры, демонстрирующая сверхпроводящий переход при давлении 166 ГПа (b).

Публикация:

I.A. Troyan, D.V. Semenov, A.G. Kvashnin, A.V. Sadakov, O.A. Sobolevskiy, V.M. Pudalov, A.G. Ivanova, V.B. Prakapenka, E. Greenberg, A.G. Gavriiliuk, I.S. Lyubutin, V.V. Struzhkin, A. Bergara, I. Errea, R. Bianco, M. Calandra, F. Mauri, L. Monacelli, R. Akashi, and A.R. Oganov. //



Anomalous High-Temperature Superconductivity in YNb . *Advanced Materials*. 2021, Pages 006832 (1-10).

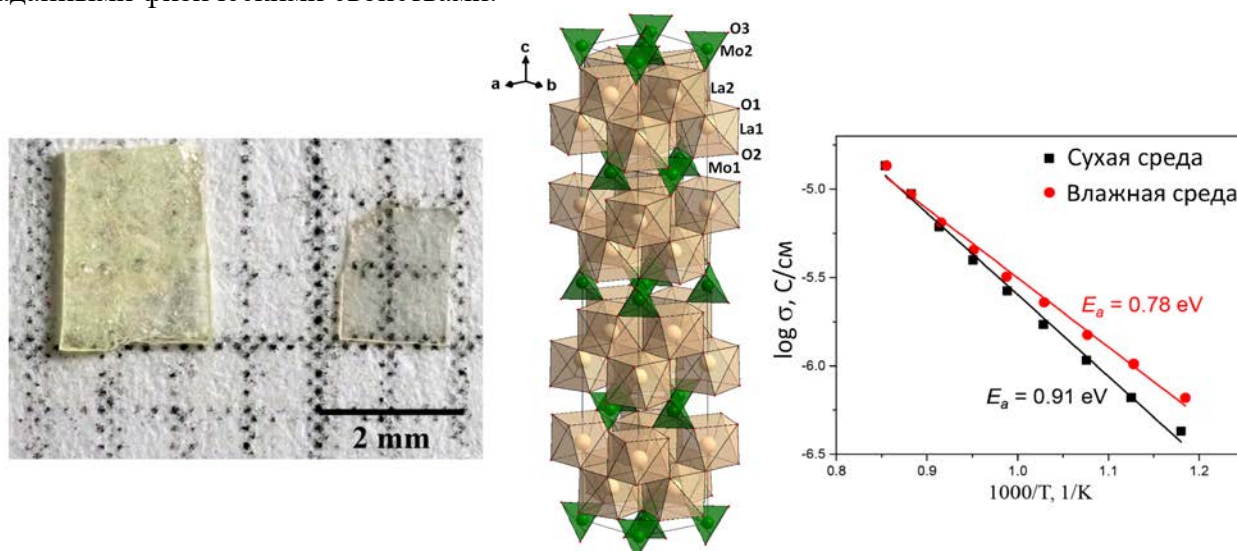
Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А20-120022890091-8

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.9; 1.3.2.7.

Особенности строения и физических свойств оксимолибдатов Ln_2MoO_6 ($Ln = La, Pr, Nd$), легированных магнием, и La_2MoO_6 , легированных натрием

Исполнители: А.М. Антипин, Н.И. Сорокина, Н.Е. Новикова, Т.А. Сорокин, В.Б. Кварталов (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Е.И. Орлова, Е.П. Харитоновна, В.И. Воронкова (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет).

Оксимолибдаты Ln_2MoO_6 ($Ln = La, Pr, Nd$), чистые и легированные магнием, а также La_2MoO_6 , легированные натрием, были получены кристаллизацией из раствора в расплаве и твердофазным синтезом в виде монокристаллов и поликристаллических образцов соответственно. Соединения были охарактеризованы методами рентгенофазового, химического, рентгеноструктурного анализа, термогравиметрии, дифференциальной сканирующей калориметрии, импеданс-спектроскопии. Установлено, что катионы магния замещают в структуре атомы молибдена, а катионы натрия – атомы лантана. Легирование образцов натрием приводит к возникновению в структуре обратимого фазового перехода при температуре 650°C и пьезоэлектрического отклика. Все исследованные материалы поглощают воду, что подтверждается данными термогравиметрии и ИК-спектроскопии и проявляют протонную проводимость во влажной среде. Показано, что в области высоких температур электропроводность беспримесных и легированных натрием образцов близка к 10^{-4} См/см (800°C). Полученные результаты могут быть использованы для совершенствования методики направленного синтеза редкоземельных молибдатов с заданными физическими свойствами.



Монокристаллы La_2MoO_6 и $La_2MoO_6:Na$: внешний вид, структура и проводящие свойства.

Публикации:

1. Orlova, E. Structure and Properties of La_2MoO_6 Oxymolybdates ($Ln = La, Pr, Nd$) Doped with Magnesium. // E. Orlova, E. Kharitonova, T. Sorokin, A. Antipin, N. Novikova, N. Sorokina, V. Voronkova // *Crystals*. 2021. V. 11. 611–624. DOI: 103390/crystal1060611



2. La₂MoO₆ Oxymolybdates Doped with Sodium: Crystal Growth, Features of the Structure, and Properties. // E. Orlova, S. Chernyak, E. Kharitonova, N. Lyskov, T. Sorokin, A. Antipin, V. Kvartalov, N. Sorokina, and V. Voronkova. // Crystal Growth and Design. 2021. DOI: 10.1021/acs.cgd.1c00970.

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А20-120031790119-2 и при частичной поддержке РФФИ (грант № 18-29-12005).

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.2.

Диэлектрические метаповерхности с максимальной оптической хиральностью без потерь на поглощение

Исполнители: М.В. Горкунов, А.А. Антонов, (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН)

Ю.С. Кившарь (Nonlinear Physics Centre, Australian National University, Australia).

Развита концепция максимальной оптической хиральности без потерь на поглощение для метаповерхностей с высокодобротными квази-связанными состояниями в континууме (квази-ССК). Найден фундаментально общий способ конструирования метаповерхностей, совмещающих прозрачность для электромагнитных волн одной круговой поляризации с полным резонансным отражением волн противоположной поляризации, за счет квази-ССК, хирально-селективно взаимодействующих со светом. Предложены реализации метаповерхностей, обладающих такими квази-ССК, на основе пар идентичных прямоугольных кремниевых наностержней. Численным моделированием из первых принципов подтверждено наличие высокодобротных оптических резонансов, максимальная хиральность которых сопровождается пренебрежимо малым поглощением световой энергии.

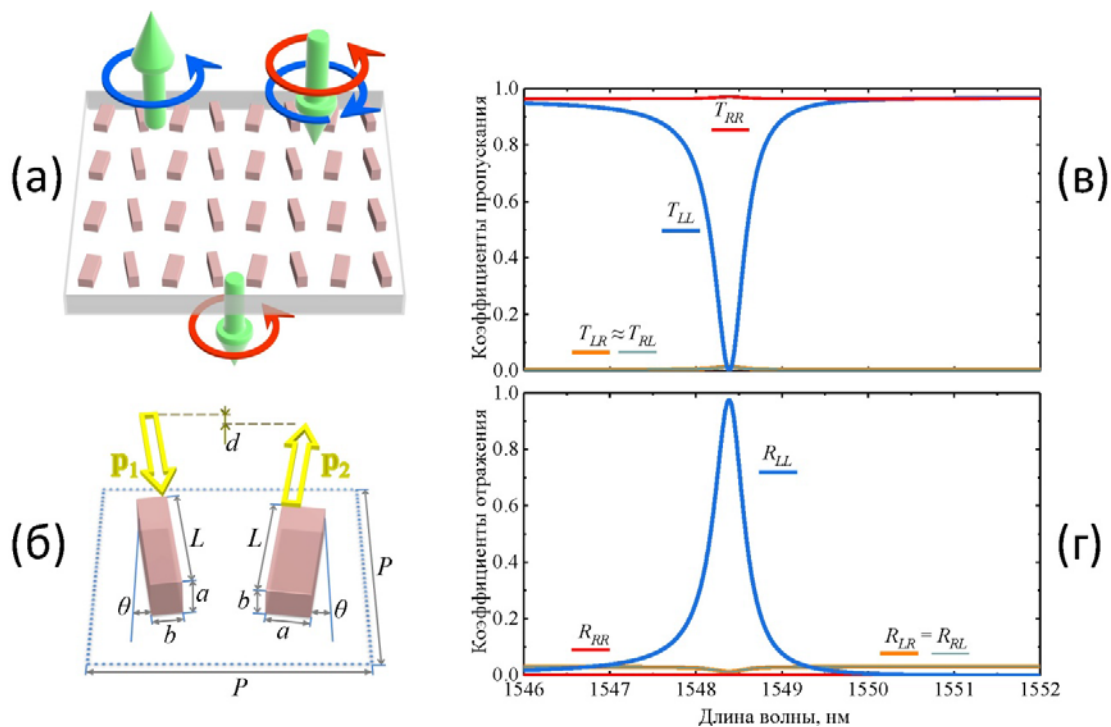


Рисунок. Принципиальная схема максимальной оптической хиральности без потерь на поглощение (а) и конструкция элементарной ячейки метаповерхности, позволяющая ее реализовать за счет квази-ССК с дипольными моментами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 , разведенными на небольшой угол θ и смещенными на расстояние d в результате попеременного расположения идентичных кремниевых стержней на разных сторонах (б). Рассчитанные спектры коэффициентов пропускания (в) и отражения (г) световых волн круговых поляризаций



подтверждают наличие высокодобротного максимально хирального резонанса. Моделирование выполнено точным решением уравнений Максвелла для параметров $a = 165$ нм, $b = 135$ нм, $L = 470$ нм, $P = 940$ нм и $\theta = 3.7^\circ$.

Публикация:

Gorkunov, M.V. Bound States in the Continuum Underpin Near-Lossless Maximum Chirality in Dielectric Metasurfaces / M.V.Gorkunov, A.A.Antonov, V.R.Tuz, A.S.Kupriianov, Y.S.Kivshar.// Advanced Optical Materials. 2021. V. 9. Issue 19. P. 2100797.

<https://doi.org/10.1002/adom.202100797>

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А20-120030390089-5

Направление ПФНИ: 1.3.5.6.

Цитоплазматический домен гемагглютинина вируса гриппа А H1N1 и состав мембранных липидов определяют характер ассоциации белка M1 с липидным бислоем

Исполнители: П.В. Конарев, Э.В. Штыкова, Л.А. Дадинова (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Л.В. Кордюкова, Н.В. Федорова, А.Л. Ксенофонтов, С.С.Абрамчук, А.В. Моисеенко, Л.А. Баратова (МГУ имени М.В. Ломоносова), Н.А.Лошкарев, О.В. Батищев (ИФХЭ РАН), Т.А. Тимофеева (НИЦЭМ им. Н. Ф. Гамалеи), Д.И. Свергун (ЕМБЛ, Германия).

Вирус гриппа А H1N1, SARS-CoV-2, и другие опасные патогены относятся к классу оболочечных вирусов. Они содержат липопротеиновую оболочку, которая обеспечивает проникновение нуклеокапсида вируса в клетку-хозяина посредством слияния вирусных и клеточных мембран. Этот процесс общий для всех оболочечных вирусов и требует тщательного изучения для выработки стратегии борьбы с вирусными заболеваниями. В оболочке вируса гриппа одним из основных интегральных вирусных белков является гемагглютинин (HA), с которым взаимодействует матриксный белок M1. Последний обеспечивает форму вируса и участвует в формировании инфекционных вирионов внутри клетки. Поэтому изучение взаимодействия HA и M1 как между собой, так и с липидами мембраны представляется весьма актуальной задачей.

В данной работе методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) впервые была обнаружена специфическая роль гемагглютинина в упорядочении вирусной липидной мембраны. Новый подход к анализу данных МУРР позволил показать, что гемагглютинин стимулирует олигомеризацию белка M1 на поверхности липидного бислоя, способствуя формированию вирусного матрикса во время сборки вирусных частиц.

Публикация: L.V. Kordyukova, P. V. Konarev, N. V. Fedorova, E. V. Shtykova, A. L. Ksenofontov, N. A. Loshkarev, L.A. Dadinova, T. A. Timofeeva, S. S .Abramchuk, A. V. Moiseenko, L. A. Baratova, D. I. Svergun, O. V. Batishchev. The Cytoplasmic Tail of Influenza A Virus Hemagglutinin and Membrane Lipid Composition Change the Mode of M1 Protein Association with the Lipid Bilayer. // Membranes. 2021. V. 11. P. 772. DOI: 10.3390/membranes11100772

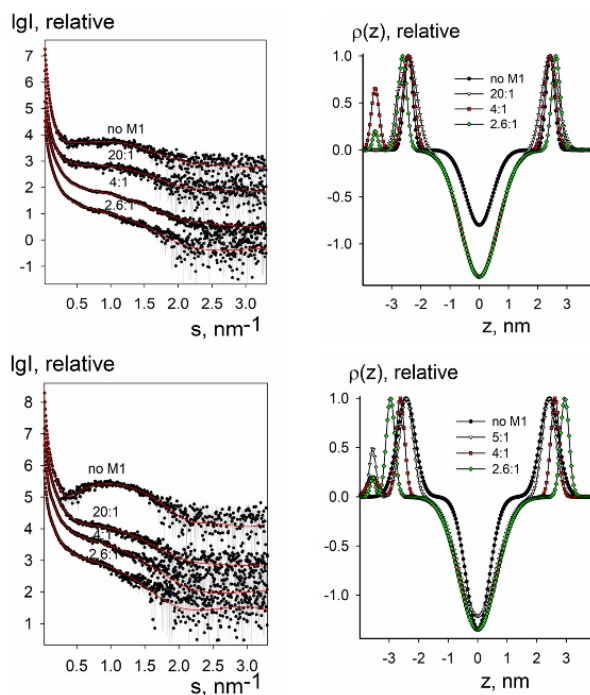


Рис. Анализ электронной плотности липидных бислоев при взаимодействии нативных и синтетических липосом с матричным белком М1 по данным МУРР.

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А20-120022890092-5.

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.2.

Изучение влияния аминокислотных замещений на антивирусную активность производной аминокислоты с использованием методов молекулярного моделирования

Исполнители: А.А. Лашков, С.В. Рубинский (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Т.М. Гараев, Т.В. Гребенникова, М.П. Финогонова, Г.К. Садыкова, А.Г. Прилипов, Т.А. Тимофеева, С.Н. Норкина, М.М. Журавлева (НИЦЭМ им. Н. Ф. Гамалеи), А.И. Одноров (РУДН)

Цель исследования – разработка эффективных препаратов против вируса гриппа путем моделирования взаимодействия молекулы экспериментального препарата гистидин-римантадина с белком протонного канала М2 мембраны вируса. Проведен молекулярный докинг и молекулярно-динамическая симуляция с использованием расчётов на гибридных суперкомпьютерах для изучения стабильности связывания гистидин-римантадина, как с референсным каналом, содержащим в 30 позиции аланин, так и с мутантом, содержащим замену аланина на треонин. В соответствии с расчетами наиболее энергетически выгодной является "глубокая" конформация связывания лиганда, показанная на рисунке. Показано также, что проведение молекул воды и ионов гидроксония в канале в этом случае полностью заблокировано, что приводит к инактивации вирусных частиц в клетках. Последнее было подтверждено в исследованиях *in vitro* на клеточных культурах и куриных эмбрионах.

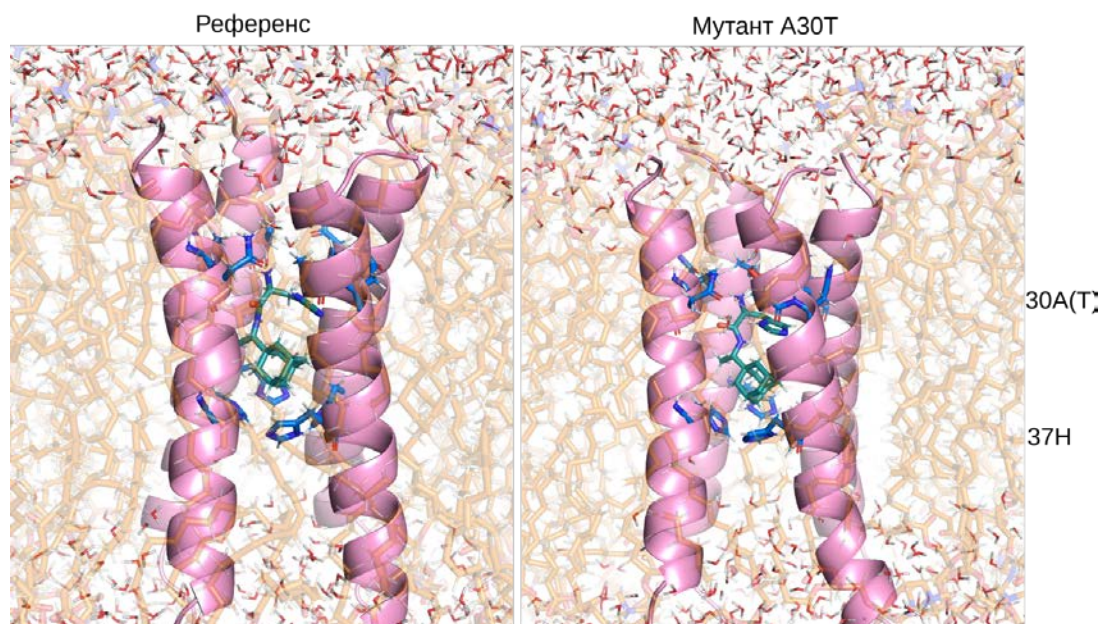


Рис. Глубокое положение лиганда в протонном канале М2 мембраны вируса гриппа.

Публикация: Т.М. Garaev, A.I. Odnovorov, A.A.Lashkov, T.V.Grebennikova, M.P. Finogenova, G.K.Sadykova, A.G. Prilipov, T.A.Timofeeva, S.V. Rubinsky, S. N.Norkina, M.M. Zhuravleva. Studying the Effect of Amino Acid Substitutions in the M2 Ion Channel of the Influenza Virus on the Antiviral Activity of the Aminoadamantane Derivative In Vitro and In Silico. // Adv Pharm Bull, 2021, 11, 700-711. Doi: 10.34172/apb.2021.079.

Работа выполнена по теме ГЗ Пер. № АААА-А20-120022890092-5.

Направления ПФНИ ГАН:

Микроскопия поверхности кристаллов-суперпротоников

Исполнители: Гайнутдинов Р.В., Толстихина А.Л., Макарова И.П., Селезнева Е.В., Васильев А.Л. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН).

Кристаллы $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$ принадлежат к семейству кислых солей щелочных металлов, проявляющих протонную проводимость при относительно невысоких температурах и перспективных для разработок в области энергоэффективных технологий. Применение комплекса физических методов, включая атомно-силовую, оптическую поляризационную и сканирующую электронную микроскопию, структурные исследования, позволили получить новые данные о реальной структуре, строении поверхности и локальных физических свойствах кристаллов. Впервые измерены локальные вольт-амперные характеристики (ВАХ), которые с высокой воспроизводимостью подтвердили наличие структурного фазового перехода при $T \approx 308$ К в суперпротонную фазу. Методом микроскопии пьезоэлектрического отклика исследована эволюция поверхности при фазовых переходах из сегнетоэластической в суперпротонную фазу. Установлено, что при изменении внешних условий на поверхности кристалла образуется слой непроводящей фазы переменного состава с отличающимися водородными подсистемами, и показано его влияние на измеряемые физические параметры.

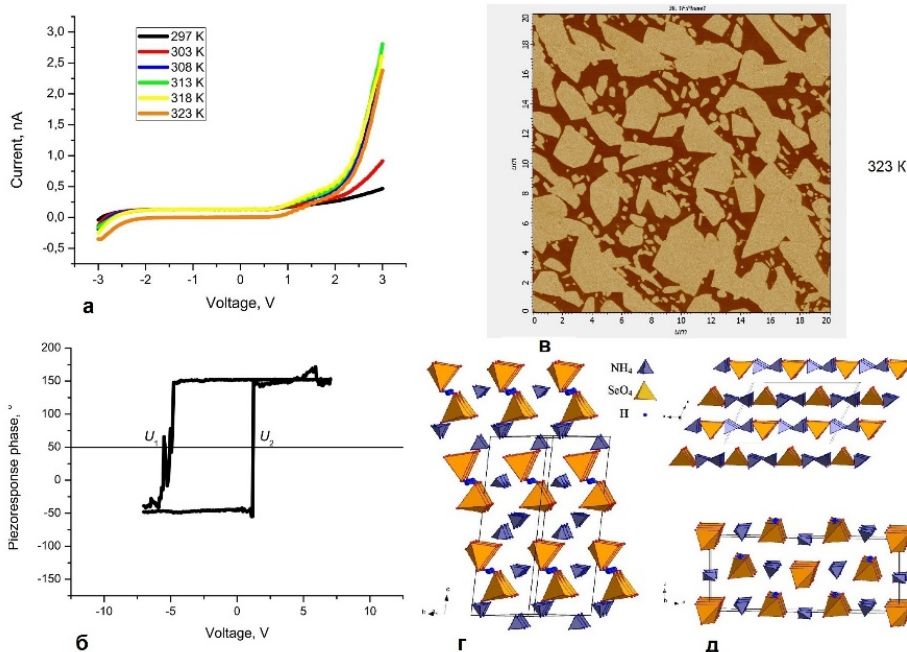


Рисунок. Кристаллы $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$: локальные ВАХ (а), петля пьезоэлектрического гистерезиса (б), изображение модифицированного поверхностного слоя (фаза нормального пьезоотклика) (в), атомная структура кристалла (г) и поверхностных фаз (д).

Публикации:

1. Gainutdinov, R. Microscopic studies of the surface layer of $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$ crystals subject to phase transformations / R. Gainutdinov, E. Selezneva, I. Makarova, A. Vasiliev, A. Tolstikhina // Surfaces and Interfaces. 2021. V. 23. P. 100952-1-9.
2. Гайнутдинов, Р.В. Эволюция поверхности кристаллов $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$ при фазовых переходах / Р.В. Гайнутдинов, А.Л. Толстихина, Е.В. Селезнева, И.П. Макарова. // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 3. С. 461-466.
3. Гайнутдинов, Р.В. Комбинированная микроскопия сегнетоэластических кристаллов дигидроселената триаммония / Р.В. Гайнутдинов, А.Л. Толстихина, Е.В. Селезнева, И.П. Макарова. // Известия РАН. Серия. Физ. 2021. Т. 85. № 8. С. 1081-1087.

Работа выполнена по темам ГЗ Рег. № АААА-А20-120031790119-2 и Рег. № АААА-А20-120022890089-5. Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.2.

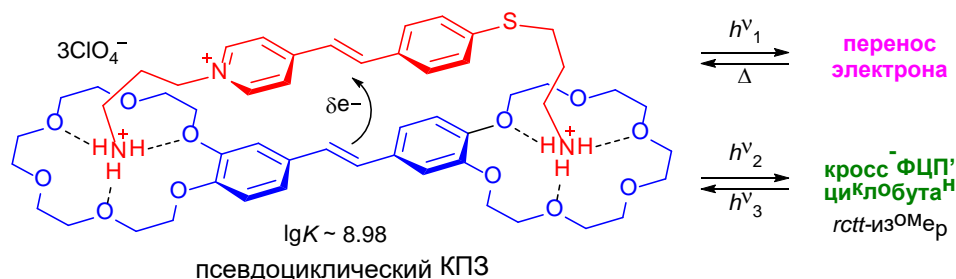
Изучено производное стирилпиридина, образующее высокостабильный бимолекулярный комплекс с бис(18-краун-6)стильбеном

Было изучено производное стирилпиридина, образующее высокостабильный бимолекулярный комплекс с бис(18-краун-6)стильбеном благодаря дитопной координации с участием водородных связей. Установлено, что комплексообразование приводит к многократному ускорению дезактивации возбужденных состояний стильбена и производного стирилпиридина вследствие фотоиндуцированного переноса электрона (ФПЭ) в бимолекулярном комплексе. Помимо ФПЭ в комплексе протекает стереоспецифическая реакция кросс-[2 + 2]-ФЦП, приводящая к образованию производного циклобутана в виде *rcct*-изомера. Полученный циклобутан легко подвергается реакции ретро-ФЦП при УФ-облучении. Результаты исследования существенно расширяют граничные условия протекания реакций кросс-ФЦП диарилэтиленов с использованием супрамолекулярной



организации. Также они будут полезны при разработке новых методов синтеза макроциклических рецепторов на основе производных циклобутана.

Руководитель работы - чл.-корр. РАН С. П. Громов; отв. исп. – к.х.н. Т. П. Мартьянов и д.х.н. Е. Н. Ушаков.



Публикация:

Dyes Pigments. 2021. V. 185. 108952. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2020.108952>. IF 4.689. (Q1)

Жидкокристаллические микролинзы на основе бинарно-модулированных ориентирующих поверхностей, созданных сфокусированным ионным пучком

Исполнители: С.П. Палто, А.Р. Гейвандов, И.В. Касьянова, И.В. Симдянкин, В.В. Артемов, М.В. Горкунов (ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника РАН»).

В работе реализован новый подход к созданию массивов светосильных микролинз с высокой оптической силой (фокусное расстояние может составлять десятки микрон) на основе жидкокристаллических метаповерхностей, созданных с помощью обработки ориентирующих слоев ионным пучком по заданному цифровому шаблону. Фокусирующие свойства достигнуты благодаря прецизионному формированию требуемого фазового профиля световой волны ЖК-слоем, в котором реализовано целевое изменение угла наклона локальной оптической оси (директора) в плоскости перпендикулярной к слою, рис.1. Получены уникальные светосильные микролинзы с малым фокусным расстоянием f при большом апертурном числе ($A/f \sim 0.5$), что позволяет фокусировать свет в пределах ЖК-слоя в область размером порядка длины волны. Последнее, например, открывает возможности концентрации световой энергии в малых объемах и перспективно для создания ЖК-микролазеров с оптической накачкой и ЖК-устройств с опто-оптическим переключением при использовании диодных лазерных источников с относительно невысокой мощностью (~10–30 Вт).

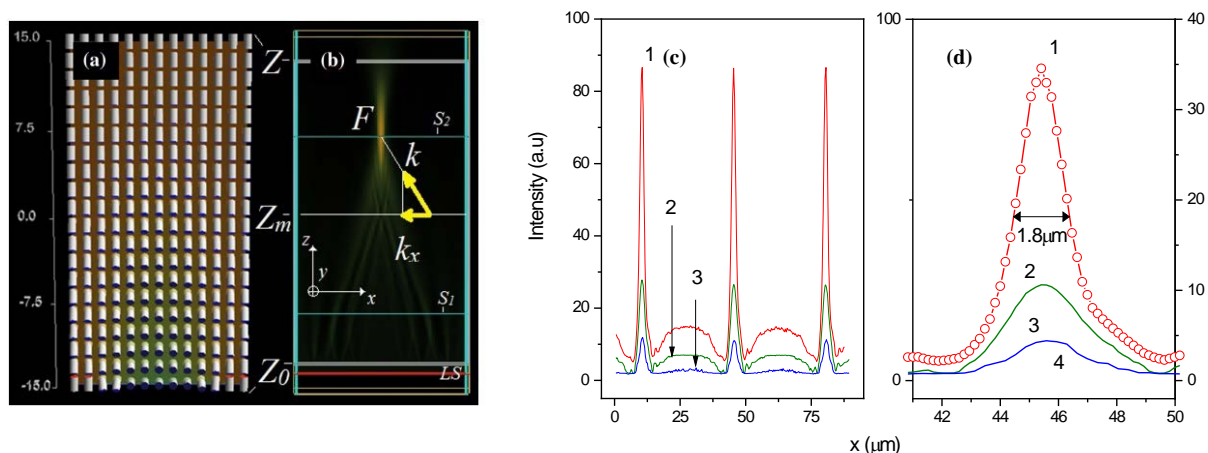


Рисунок 1. (а) Численно смоделированное распределение поля директора ЖК в слое толщиной 30 мкм, выполняющем роль микролинзы, и (b) распределение интенсивности света внутри этого ЖК слоя, рассчитанное с помощью метода FDTD. Измеренные распределения интенсивности света в фокальной плоскости массива микролинз периода 35 мкм (c) и более детальное распределение интенсивности вблизи фокуса одной линзы (d); красная (1), зеленая (2) и синяя (3) кривые соответствуют линейным данным, регистрируемым RGB сенсором фотокамеры для красного, зеленого и синего каналов, соответственно.

Публикация: Liquid crystal microlenses based on binary surface alignment controlled by focused ion beam treatment // S.P. Palto, A.R. Geivandov, I.V. Kasyanova, I.V. Simdyankin, V.V. Artemov, M.V. Gorkunov. *Optics Lett.* 2021. V. 46. I. 13. P. 3376-3378. <https://doi.org/10.1364/OL.426904>.

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А20-120022890090-1 и проекта РФФ №18-12-00361

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.5.6.

Структурные и термодинамические закономерности эволюции сверхгладкой поверхности оксидных кристаллов

Исполнители: В.М. Каневский, А.В. Буташин, А.Ш. Асваров, А.Э. Муслимов (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), А.П. Чернышев (Новосибирский государственный технический университет)

Впервые объяснена с единых термодинамических и кристаллохимических позиций эволюция морфологии в зависимости от температуры отжига на воздухе сверхгладких поверхностей практически-важных оксидных кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ (области применения - пьезотехника, эпитаксиальные технологии, рентгеновская оптика и лазерная техника высокой мощности).

Экспериментально показано, что перестройка сверхгладкой кристаллической поверхности кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ начинается при температуре Таммана T_T , а наиболее интенсивно процессы рекристаллизации поверхности и формирования наноструктур идут при достижении температуры T_{tr} (рис. а). Механизм образования наноструктур в этом температурном диапазоне – поверхностная диффузия. Дальнейшее нагревание кристаллов до температуры $T \geq T_{sm}$ (рис. а) приводит к плавлению в тонком приповерхностном слое и вызывает декомпозицию кристалла химически неустойчивого соединения оксидов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$. Термическая обработка кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ со сверхгладкой поверхностью позволяет формировать на ней 2-D наноструктуры с различной морфологией (рис. б-г). Если требуется сохранение сверхгладкой



поверхности кристаллических элементов, то их не следует нагревать выше T_T при эксплуатации.

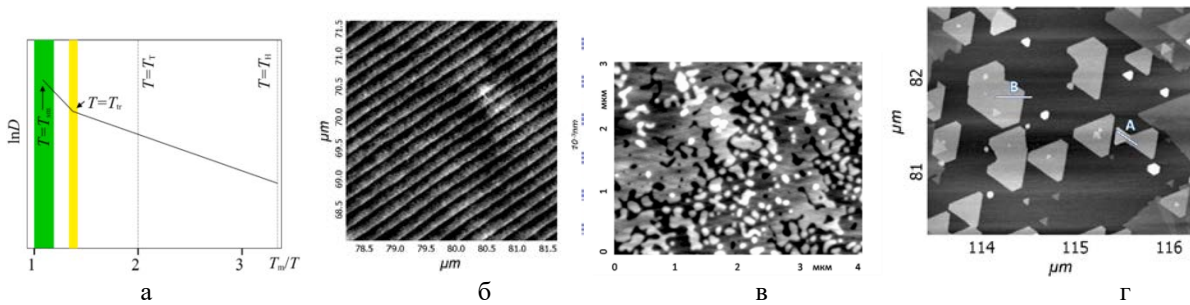


Рис. Типичная аррениусовская зависимость коэффициента поверхностной диффузии D от обратной температуры $1/T$: $T_{tr} = \theta_{tr} T_m$ – переходная температура между высоко- и низкотемпературным режимами поверхностной диффузии, $T_n = \theta_n T_m$, $T_t = \theta_t T_m$ и T_{sm} – температуры Хюттига, Таммана и поверхностного плавления, соответственно (а); наноструктуры на (0001) поверхностях кристаллов α - Al_2O_3 (б), $La_3Ga_5SiO_{14}$ (в) и $LaMgAl_{11}O_{19}$ (г) после отжига при высоких температурах

Публикация:

Butashin A.V., Chernyshev A.P., Muslimov A.E., Asvarov A.Sh., Kanevsky V.M. Structural and thermodynamic aspects of the evolution of supersmooth surface of oxide crystals // Applied Surface Science 2021. V.553. P.149541. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149541>. Q1.

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А19-119073190049-2

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.6.

Обнаружение необычной деформации в кристаллах бифталата калия в поперечном электрическом поле направлении и исследование её структурной обусловленности

Исполнители: А.Г. Куликов^{1,2}, Н.Е. Новикова¹, А.Е. Благов^{1,2}, Ю.В. Писаревский^{1,2}, И.А. Верин¹, М.В. Ковальчук^{1,2} ¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ²(НИЦ КИ)

В кристаллах бифталата калия (БФК) впервые обнаружены необычные анизотропные деформации в условиях воздействия внешнего электрического поля. Применение комплекса электрофизических и рентгеновских методов позволило установить взаимосвязь между структурой и свойствами материала. Методами рентгеновской дифракции выделен быстрый пьезоэлектрический отклик и более медленные обратимые релаксационные деформации активационного типа, схожие по кинетике с электропроводностью кристалла. Наиболее отчетливо они проявляются вдоль оси a , перпендикулярной направлению c приложения поля (рис. 1а). Рентгеноструктурный анализ выявил разупорядочение атомов калия по нескольким позициям и вакансии в них (рис. 1б). Определены пути возможной миграции ионов K^+ в структуре БФК. Миграция носителей заряда (катионов калия) приводит к поперечной деформации кристаллической решетки БФК во внешнем электрическом поле. Полученные уникальные результаты демонстрируют новые возможности диагностики и создания в кристаллах деформаций, перпендикулярных приложенному внешнему электрическому полю, что крайне перспективно для задач стрейнтроники.

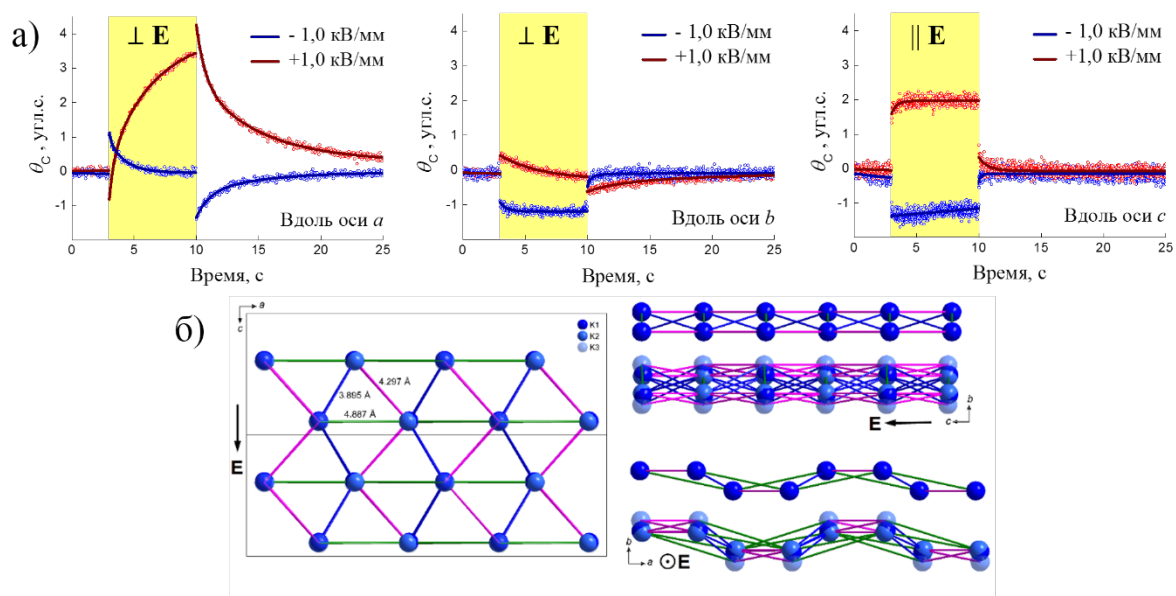


Рис. 1. Кристалл БФК: а – временные зависимости углового смещения дифракционных отражений вдоль осей a , b и c при импульсном воздействии (интервал выделен желтым) электрического поля напряжённостью 1,0 кВ/мм; б – проекция решетки атомов калия в структуре на плоскости ac , bc и ab . Стрелкой обозначено направление действия электрического поля.

Публикация: Petrenko, A. Lateral deformations of a crystal of potassium acid phthalate in an external electric field / A. Petrenko, N. Novikova, A. Blagov, A. Kulikov, Yu. Pisarevsky, I. Verin, M. Kovalchuk // J. Appl. Crystallogr. 2021. V. 54. Iss. 5. P. 1317–1326. DOI: 10.1107/S1600576721007366

Работа выполнена по теме ГЗ Рег. № АААА-А19-119041590077-0.

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.10. и 1.3.2.2.

Низкотемпературный синтез прозрачных электродов с улучшенными функциональными характеристиками на основе ZnO, легированного индием

Исполнители: В.М. Каневский, А.Ш. Асваров, А.Э. Муслимов (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН)

Детально исследовано влияние примеси индия на морфологию, микроструктуру, оптические и электрические свойства тонких пленок ZnO, осажденных методом магнетронного распыления в отсутствие подогрева подложки ($T \leq 50^\circ\text{C}$). Показано, что соотношение In/Zn в формируемых высокопрозрачных проводящих пленках соответствует составу керамической мишени, и с ростом содержания индия в распыляемой мишени коэффициент оптического пропускания тонких пленок имеет тенденцию снижаться, а удельная электропроводность достигает максимума $\sigma = 4.5 \times 10^2 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ при содержании индия в пленке 10 ат.% In. Т.о. прозрачные проводящие оксидные тонкие пленки, полученные при распылении керамической мишени ZnO:10 at.% In по совокупности оптических и электрических свойств могут рассматриваться в качестве реальной альтернативы широко используемому в настоящее время дорогостоящему материалу на основе ИТО ($90\% \text{In}_2\text{O}_3; 10\% \text{SnO}_2$) при низкотемпературном формировании прозрачных электродов для различных приложений, например для электрооптических приборов и структур на гибких полимерных подложках.

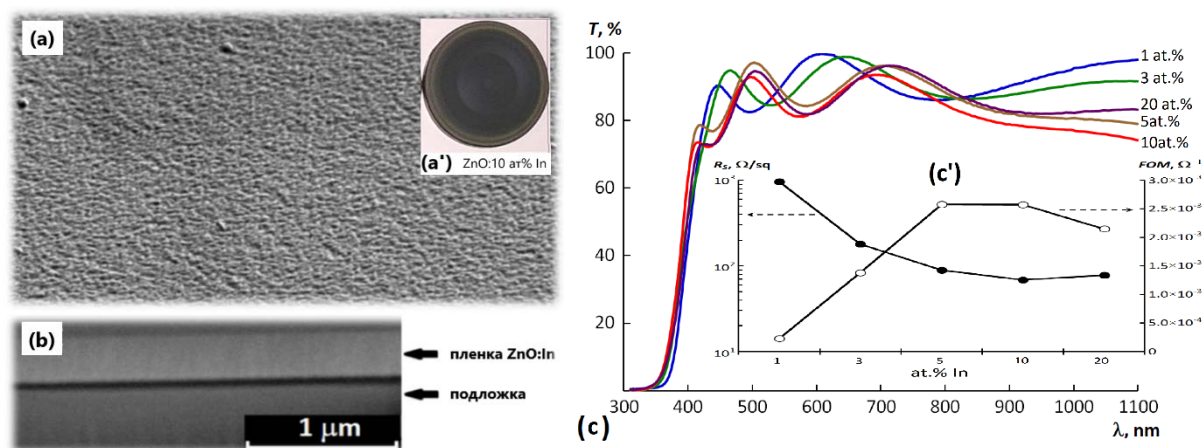


Рис.: SEM-изображения поверхности (a) и поперечного скола (b) пленки ZnO с оптимальным уровнем легирования 10 ат.% In (на вставке a' – керамическая мишень, используемая для осаждения пленки); (c) – спектры оптического пропускания пленок ZnO:In с различным уровнем легирования. На вставке c' – зависимости поверхностного сопротивления R_s и критерия качества FOM пленок ZnO:In от уровня легирования индием.

Публикация: Akhmedov A., Abduev A., Murliev E., Asvarov A., Muslimov A., Kanevsky V. The ZnO-In₂O₃ Oxide System as a Material for Low-Temperature Deposition of Transparent Electrodes // Materials. 2021. V.14. P.6859. DOI: 10.3390/ma14226859.

Работа выполнена по теме ГЗ Рег.№ АААА-А19-119100790114-4.

Направления ПФНИ ГАН: 1.3.2.10. и 1.3.5.6.

Спиральные каустики вихревых лазерных пучков

Секция вычислительных, локационных, телекоммуникационных систем и элементной базы

1.3.5.3. Волоконная оптика, оптическая связь, оптическая информатика

Осуществлена непараксиальная фокусировка лазерного излучения в 3D световую спираль. Для расчета тангенциальной и нормальной компонент электромагнитного поля на заданной криволинейной поверхности предложен асимптотический метод, с помощью которого получены уравнения для вычисления стационарных точек и каустик. На основе электромагнитной теории выполнен расчет и моделирование действия дифракционных оптических элементов (ДОЭ), формирующих распределения поля в виде двумерных и трёхмерных световых спиралей. Предложенная специальная структура ДОЭ, реализующая наличие продольной протяженности спирали вдоль оптической оси за счет угловой зависимости, приводит к возникновению вихревого момента импульса поля. Соответственно, частица, захваченная таким полем, будет двигаться по 3D спирали, что находит применение в области лазерного манипулирования. Экспериментальные результаты, полученные с помощью пространственного модулятора света, хорошо согласуются с результатами моделирования.

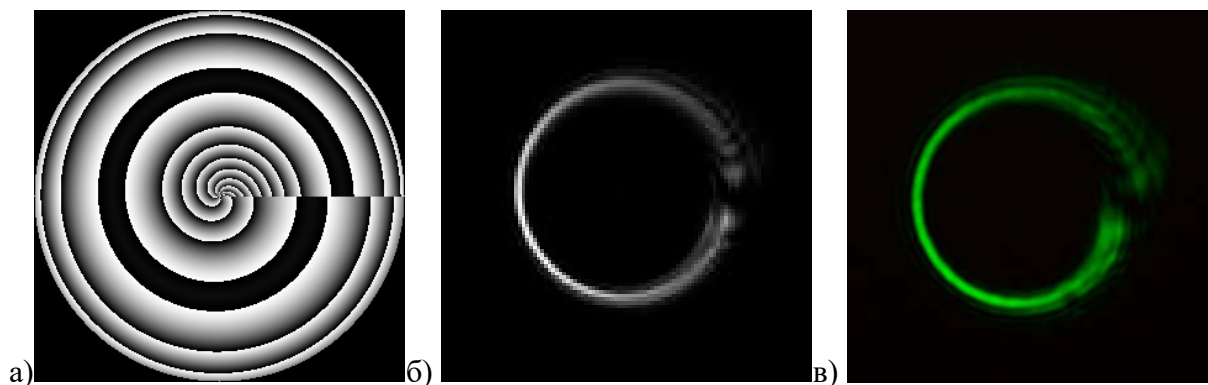


Рисунок. Распределение фазы оптического элемента (а), распределение интенсивности в виде одно витка спирали на некотором расстоянии от элемента: моделирование (б), эксперимент (в). Длина волны 532 нм, размер кадров 3x3 мм.

Организация: Институт систем обработки изображений РАН - филиал Федерального научно-исследовательского центра "Кристаллография и фотоника" РАН.

Авторы: Сойфер В.А., Хонина С.Н., Порфирьев А.П., Харитонов С.И., Стрелков Ю.С.

Публикация:

Soifer V.A., Kharitonov S.I., Khonina S.N., Strelkov Y.S., Porfirev A.P., Spiral Caustics of Vortex Beams, Photonics (MDPI). Vol. 8. 20 pp. 2021. <https://doi.org/10.3390/photonics8010024>; IF=2,676 (open access).

Исследование генерации терагерцового излучения в полуорганическом молекулярном кристалле GUNP

Авторы: А.С. Синько, А.П. Шкуринов, П.М. Солянкин, И.А. Ожередов, В.Л. Маноменова, Е.Б. Руднева, Н.Н. Козлова, Н.И. Сорокина

Полуорганические молекулярные кристаллы являются перспективными нелинейно-оптическими источниками излучения благодаря совмещению преимуществ органических и неорганических сред: высокая лучевая стойкость, большой показатель нелинейности и вариативность в дизайне молекулярной кристаллической структуры. Для исследований был выращен кристалл гидрофосфитгуанилмочевины $(\text{NH}_2)_2\text{CNHCO}(\text{NH}_2)\text{H}_2\text{PO}_3$ (GUNP), молекула которого состоит из катион гуанилмочевины (1+) и гидрофосфит-иона (1-). В результате проведенных исследований было установлено, что фонная подсистема в ближнем терагерцовом диапазоне частот (0.2-2 ТГц) определяется межмолекулярными водородными связями и имеет узкополосные спектральные резонансы поглощения и преломления, зависящие от ориентации и температуры кристалла. Также было получено, что при накачке фемтосекундным излучением видимого и БИК диапазона длин волн в кристалле GUNP происходит нелинейно-оптическое выпрямление, что приводит к генерации ТГц импульсов. Они оказываются узкополосными, и их параметры коррелируют со спектральными параметрами пропускания кристалла на ТГц частотах, благодаря чему при криогенных температурах удалось достигнуть ширины полосы генерации 6.2 ГГц.

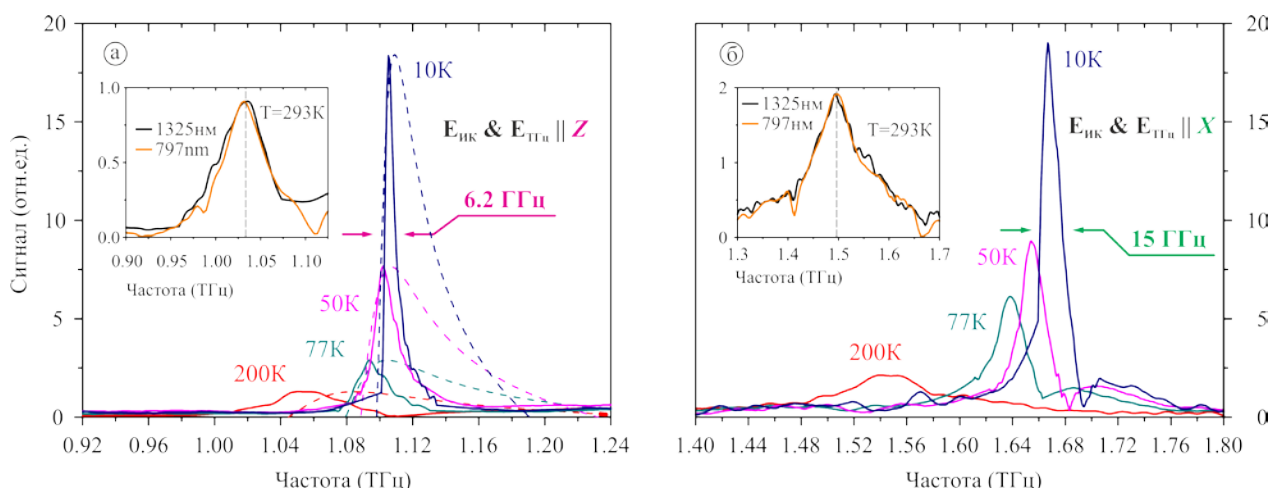


Рис.1. Спектры ТГц излучения, генерируемого при ориентации кристалла GUHP вдоль осей Z (а) и X (б) при разных температурах. Длина волны накачки 1325 нм. Сплошные линии – экспериментальные данные; пунктирными линиями показано приближение модели не критического фазового синхронизма с использованием экспериментальных данных спектров пропускания кристалла. На вставках представлено сравнение спектров ТГц излучения, генерируемого при 293К для двух длин волн лазерной накачки: 1325 нм и 797 нм.

Публикация:

Sinko, A., Solyankin, P., Kargovsky, A., Manomenova, V., Rudneva, E., Kozlova, N., Sorokina, N., Minakov, F., Kuznetsov, S., Nikolaev, N., Surovtsev, N., Ozheredov, I., Voloshin, A., Shkurinov, A. A monoclinic semiorganic molecular crystal GUHP for terahertz photonics and optoelectronics //Scientific Reports. 2021. T. 11. №. 1. С. 1-13., DOI: 10.1038/s41598-021-02862-3

Новый тип структурно-стабильных вихревых лазерных пучков с бесконечным топологическим зарядом и конечным орбитальным угловым моментом

Развитие методов фотоники для применения в технике и медицине

Найдено точное аналитическое выражение (решение параксиального уравнения распространения), которое описывает структурно-стабильный вихревой косинус-гауссов лазерный пучок с квадратом вихревого аргумента косинуса, который обладает уникальными свойствами. Пучок обладает бесконечным топологическим зарядом, так как на декартовых осях в поперечном сечении пучка находится бесконечное число винтовых дислокаций (центров сингулярности фазы), но нормированный на мощность пучка орбитальный угловой момент его конечный. Максимум орбитальный угловой момент достигает когда период косинуса близок к радиусу перетяжки гауссова пучка. Расстояние между винтовыми дислокациями уменьшается с увеличением расстояния от центра пучка. И при достаточном удалении от центра расстояние между соседними дислокациями становится много меньше длины волны (эффект супер-осцилляций). В отличие от обычных вихревых пучков, у которых интенсивность имеет вид кольца, интенсивность данного пучка имеет вид квадрата с максимумом на оптической оси и с медленно спадающей интенсивностью вдоль диагоналей квадрата (пучок похож на четырехконечную звезду). Пучок при распространении меняется



только масштабно и вращается. Может применяться в микроманипуляции и сканирующей оптической микроскопии.

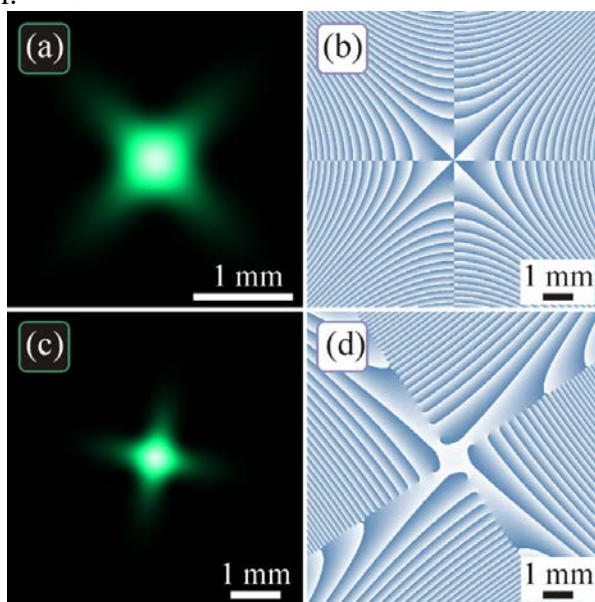


Рисунок: Интенсивность (а, с) и фаза (b, d) пучка в начальной плоскости (а, b) и после распространения в пространстве (с, d). Параметры: длина волны 532 нм, радиус перетяжки гуссова пучка 0,5 мм, период косинуса 0,55 мм, дистанция распространения 1 м.

Организация: Институт систем обработки изображений РАН — филиал Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» РАН.

Авторы результата: Котляр В.В., Ковалев А.А.

Публикации:

1. Propagation-invariant laser beams with an array of phase singularities / A.A. Kovalev, V.V. Kotlyar // Phys. Rev. A. 2021. V.103. P.063502. DOI:10.1103/PhysRevA.103.063502.
2. Топологический заряд оптических вихрей / В.В. Котляр, А.А. Ковалев// Новая техника, Самара. 2021. 184 с. ISBN 978-5-88940-157-5.

Исследование новых широкозонных халькогенидов для нейроморфных применений методом молекулярной динамики

Авторы: Хоменко М.Д., Бычков Е.В., Соколов А.А.

Оптические нейроморфные вычислительные технологии позволяют превзойти ограничения архитектуры Фон-Неймана и эффективно удовлетворить быстрорастущий спрос на хранение и обработку информации. Классические фазоизменяемые материалы способны обратимо переключаться с высокой скоростью между несколькими уровнями аморфного и кристаллического состояния и уже достигли технологической зрелости в нейроморфных вычислительных системах. При помощи метода молекулярной динамики из первых принципов проведено численное исследование новых широкозонных материалов с фазовым переходом. Они обладают малым поглощением в видимом и ближнем ИК диапазоне, позволяют снизить потери и энергию, необходимую для оптических переключений, а также увеличить их скорость. Обнаружено, что плотная металлическая жидкость GeTe₂ показывает высокую текучесть и сильную хрупкость (рис. 1), что позволяет рассчитывать на высокую скорость структурных преобразований [1]. Показано наличие фаз высокого давления при нагревании аморфного Ga-Te ниже температуры плавления (рис. 2) [2]. Этот феномен



положительно сказывается на контрастности аморфной и кристаллической фаз, что позволило продемонстрировать многоуровневые переходы в тонких пленках Ga₂Te₃ [3].

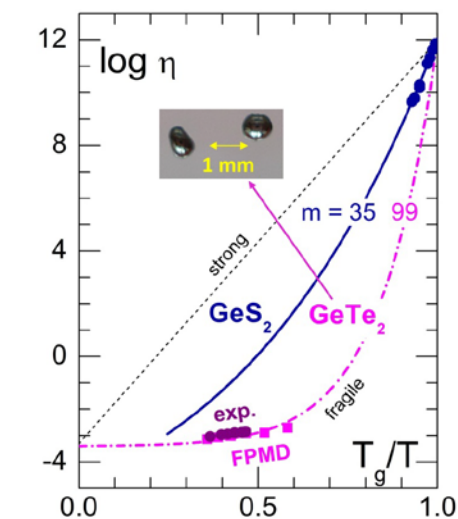


Рис. 1. Сравнение расчетной и экспериментальной зависимости вязкости объемного стекловидного GeTe₂ от температуры.

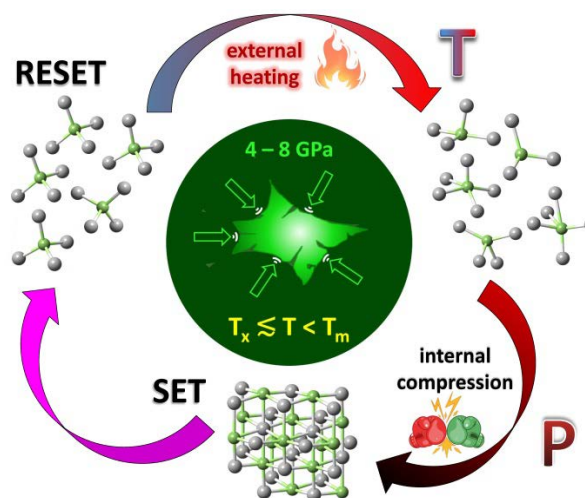


Рис. 2. Сокристаллизация металлизированных фаз высокого давления Ga-Te увеличивает оптический и электрический контраст фазовых состояний.

Публикации:

1. Tverjanovich, A., et. al. / Bulk Glassy GeTe₂: A Missing Member of the Tetrahedral GeX₂ Family and a Precursor for the Next Generation of Phase-Change Materials. // Chemistry of Materials. 2021. V. 33, N. 3. P. 1031–1045, doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c04409
2. Bokova M., et. al. / Unraveling the Atomic Structure of Bulk Binary Ga-Te Glasses with Surprising Nanotectonic Features for Phase-Change Memory Applications. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2021. V. 13, N. 31. P. 37363–37379, doi: 10.1021/acsami.1c09070.
3. A. Tverjanovich, et. al. / Atypical phase-change alloy Ga₂Te₃: atomic structure, incipient nanotectonic nuclei, multilevel writing // Journal of Materials Chemistry. 2021. DOI: 10.1039/D1TC03850H

Многомасштабное исследование структуры и пористости полиэфирных матриц для тканеинженерных конструкций

Авторы: В.Е. Асадчиков, А.В. Бузмаков, В.В. Волков, А.Г. Дунаев, Д.Г. Дьячкова, Д.А. Золотов, Ю.С. Кривоносов, Л.И. Кротова, М.В. Чукалина, В.К. Попов.

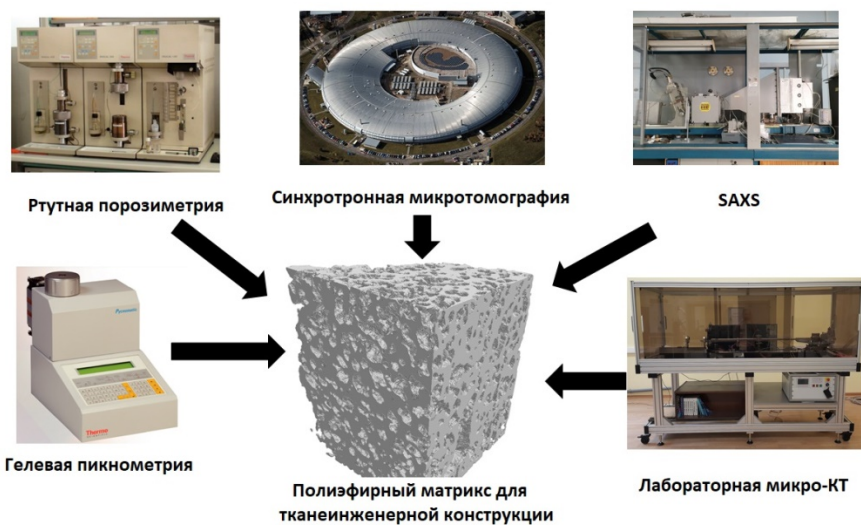
Впервые проведен сравнительный анализ внутренней структуры матриц на основе алифатических полиэфиров в масштабе от 0,02 до 1000 мкм до и после их пластификации в сверхкритическом диоксиде углерода и последующего вспенивания целым комплексом различных методов, включающем в себя: малоугловое рентгеновское рассеяние (SAXS), гелиевую пикнометрию и ртутную порозиметрию, сканирующую электронную микроскопию, а также компьютерную рентгеновскую (микро-КТ) и синхротронную микротомографию. При этом изучение наноразмерных трансформаций внутренней структуры таких матриц методом SAXS и с помощью синхротронного излучения также проводилось впервые. Экспериментально показано, что два последних метода можно эффективно



использовать для исследования пор с размерами менее 0,05 мкм, в то время как ртутная порозиметрия таких малых пор требует применения высоких (более 50 МПа) давлений, разрушающих хрупкие полимерные нано- и микроструктуры. Использование предложенной нами комбинации вышеописанных методов открывает новые возможности для достоверной оценки и компьютерного моделирования физических и механических свойств полиэфирных матриц, а также прогнозирования их поведения в ходе биорезорбции в живом организме.

Публикации:

Buzmakov A.V., Dunaev A.G., Krivonosov Y.S., Zolotov D.A., Dyachkova I.G., Krotova L.I., Volkov V.V., Bodey A., Asadchikov V.E., Popov V.K. “Wide-ranging multitool study of structure and porosity of PLGA scaffolds for tissue engineering” // *Polymers*, 13, 1021 (2021). DOI: 10.3390/polym13071021 WoS (Q1), IF=3,471.



1.3.2.2. Структурные исследования конденсированных сред, связь структуры и свойств. (Секция 3).

3.3.5.5. Новые технологии наноструктурного анализа в трансплантологии, тканевой инженерии и регенеративной медицине. (Секция 3).