

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирский государственный университет

XX Всероссийская научная конференция
**«Рентгеновские и электронные спектры
и химическая связь»**
РЭСХС-2010

24-27 мая 2010 года

*Посвящается памяти многолетнего
Председателя Оргкомитетов конференции
академика В.И. Нефёдова*

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Новосибирск - 2010

Организаторы конференции:

- Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
- Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск
- Новосибирский государственный университет

Серебряный спонсор конференции:

INTERTECH Corporation

INTERTECH Corporation

При финансовой поддержке:

РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ



РОССИЙСКОЙ КОРПОРАЦИИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ



Консультативный совет

Кузнецов Ф.А., академик РАН	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Пармон В.Н., академик РАН	ИК СО РАН	Новосибирск
Новоторцев В.М., академик РАН	ИОНХ РАН	Москва

Программный комитет

Председатель – Бухтияров В.И., чл.-корр. РАН	ИК СО РАН, НГУ	Новосибирск
Адамчук В.К., д.ф.-м.н.	СПбГУ	С-Петербург
Бабанов Ю.А., д.ф.-м.н.	ИФМ УрО РАН	Екатеринбург
Ведринский Р.В., д.ф.-м.н.	ЮФУ	Ростов-на-Дону
Виноградов А.С., д.ф.-м.н.	СПбГУ	С-Петербург
Демехин В.Ф., д.ф.-м.н.	РГУПС	Ростов-на-Дону
Домашевская Э.П., д.ф.-м.н.	ВГУ	Воронеж
Кочубей Д.И., д.ф.-м.н.	ИК СО РАН	Новосибирск
Курмаев Э.З., д.ф.-м.н.	ИФМ УрО РАН	Екатеринбург
Сухоруков В.Л., д.ф.-м.н.	РГУПС	Ростов-на-Дону
Тетерин Ю.А., д.ф.-м.н.	РНЦ «Курчатовский институт»	Москва
Трапезников В.А., д.т.н	ФТИ УрО РАН	Ижевск
Федин В.П., д.х.н.	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Шабанова И.Н., д.ф.-м.н.	ФТИ УрО РАН	Ижевск
Яржемский В.Г., д.ф.-м.н.	ИОНХ РАН	Москва

Организационный комитет

Председатель – Мазалов Л.Н., д.ф.-м.н., профессор	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Заместители председателя:		
Боронин А.И., д.х.н.	ИК СО РАН, НГУ	Новосибирск
Окотруб А.В., д.ф.-м.н.	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Ответственный секретарь Оргкомитета:		
Замулина Т.В.	ИК СО РАН	Новосибирск
Секретариат:		
Крылова Н.С.	ИК СО РАН	Новосибирск
Мутас И.Ю.	ИК СО РАН	Новосибирск
Члены Оргкомитета:		
Асанов И.П.	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Булужева Л.Г.	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Гуляев Р.В.	ИК СО РАН	Новосибирск
Каичев В.В.	ИК СО РАН	Новосибирск
Кибис Л.С.	ИК СО РАН	Новосибирск
Крючкова Н.А.	ИНХ СО РАН	Новосибирск
Стадниченко А.И.	ИК СО РАН	Новосибирск
Федосеева Ю.В.	ИНХ СО РАН	Новосибирск

ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ

КАСКАДНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЭЛЕКТРОННЫХ И ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРАХ

Кочур А.Г.

*Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, пл. Ростовского Стрелкового Полка
Народного Ополчения, 2, agk@rgups.ru*

Ионизация глубокой оболочки атома порождает каскад последовательных радиационных и безрадиационных переходов, приводящий к многократной ионизации атома и испусканию сложных многокомпонентных эмиссионных и электронных спектров. Для глубоких начальных вакансий дерева распадов могут быть очень сложными, имея миллионы ветвей, что делает теоретическое описание каскадов достаточно сложной проблемой. Нами предложена теоретическая модель [1,2], основанная на прямом построении дерева каскадного распада с учетом всех радиационных и безрадиационных ветвей для начальной и всех промежуточных ионных конфигураций.

В рамках предложенной модели рассчитаны зарядовые спектры конечных ионов в однократно ионизированных, резонансно возбужденных и «пустых» атомах. Исследованы электронные оже-спектры и эмиссионные спектры каскадов в благородных газах. Рассчитаны вероятности каскадной эмиссии линий в УФ диапазоне от некоторых «космических» атомов.

Нами предсказан и подтвержден экспериментально эффект каскадного увеличения выхода флуоресценции внешних электронных оболочек при ионизации более глубоких оболочек. Это явление необходимо учитывать при рентгеновском анализе с использованием низкоэнергетических рентгеновских линий.

Каскадные «взрывы» атомов могут существенно усилить разрушительное воздействие ионизирующих излучений на вещество и живые объекты. Нами получены первые результаты по Монте-Карло моделированию каскадных распадов атомов в газообразной среде с учетом процессов вторичной ионизации.

[1]. Kochur A G *et al.* 1994 *J. Phys. B* **27** 1709.

[2]. Kochur A G *et al.* 1995 *J. Phys. B* **28** 387.

РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ КАК МЕТОД АНАЛИЗА НАНОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА

Солдатов А.В., Смоленцев Г.Ю., Мазалова В.Л., Кравцова А.Н.

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5,
E-mail: soldatov@sfedu.ru*

Разработан новый метод определения параметров трехмерной наноразмерной атомной структуры веществ в конденсированном состоянии. Основу метода составляет теоретический анализ спектров ближней области рентгеновского поглощения (XANES) с использованием методов многомерной интерполяции (комплекс программного обеспечения FitIt) [1]. Уникальность метода заключается в том, что он позволяет не только с высокой точностью (до 0.02 ангстрема) определять межатомные расстояния (функцию радиального распределения), но и угловое распределение атомов (углы химической связи).

Представлен обзор результатов, полученных по данной методике для широкого класса объектов: таких как свободные и осажденные на поверхность GaAs и кремния нанокластеры меди [2], свободные кластеры титана и оксида титана, массивы наноигол ZnO – материалов для нанофотоники и наноиглы и тонкие пленки материала для спинтроники (разбавленные магнитные полупроводники типа ZnO:Mn, ZnO:C) и локальная атомная, электронная и магнитная структура малых магнитных нанокластеров.

Одним из важных приложений разработанного метода является возможность его применения для анализа зависящих от времени процессов в частности, исследование изменения локальной наноразмерной структуры веществ в ходе химической реакции [3] и определения закономерностей 3D локальной атомной структуры фотовозбужденных молекул.

[1]. <http://nano.sfedu.ru/fitit.html>

[2]. Thomas; Adam, Sorin, Small copper clusters in Ar shells: study of local structure, *Journal of Physical Chemistry C* 113 (2009) 9086–9091.

[3]. Grigory Smolentsev, Gemma Guilera, Moniek Tromp, Sakura Pascarelli, and Alexander Soldatov, Local structure of reaction intermediates probed by time-resolved XANES spectroscopy, *Journal of Chemical Physics* 130 (2009) 174508.

Благодарности: Исследование поддержано грантом Министерства образования и науки РФ 2.1.1.5932, грантом 09-02-12257-офи_м и грантом Президента РФ МК-4283-2010.2.

СКАНИРУЮЩАЯ ТУННельНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ

Ельцов К.Н.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,
119991 Москва, ул. Вавилова, 38, eltsov@kapella.gpi.ru*

Сверхвысоковакуумный сканирующий туннельный микроскоп как аналитический прибор позволяет измерять структуру поверхности с атомным разрешением в реальном пространстве, локальную электронную плотность свободных и занятых состояний вблизи уровня Ферми, спиновое состояние поверхности с атомным разрешением (локальный поверхностный магнетизм), колебательные состояния отдельной молекулы на поверхности. В докладе представлены основы сканирующей туннельной спектроскопии (СТС). Изменяя туннельное напряжение (обычно в пределах ± 3 В) можно получить распределение электронной плотности как свободных, так и занятых состояний [1]. Именно эта особенность отличает СТС от классической фотоэлектронной спектроскопии, где можно наблюдать только распределение электронной плотности по занятым состояниям. В основе спин-поляризованной сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии (СП СТМ/СТС) лежит идея спинового вентиля. Поскольку в процессе упругого туннелирования спин электрона сохраняется, то, в зависимости от ориентации спина электронов на магнитной поверхности относительно спина туннелирующего электрона, проводимость туннельного канала существенно меняется и в СТМ-изображении возникает магнитный контраст [2]. Колебательная туннельная спектроскопия основана на рассеянии туннелирующих электронов (неупругое туннелирование) с возбуждением элементарных состояний, которыми могут быть фононы поверхности и колебания адсорбированных молекул. Только в 1998 г. удалось реализовать измерение колебательных спектров отдельных молекул на поверхности с использованием СТМ [3]. В настоящее время подобные исследования активно развиваются, хотя лидерство остается за лабораторией В. Хо (США).

[1]. F. Besenbacher. Rep. Prog. Phys. **59**, 1737 (1996).

[2]. M. Bode. Rep. Prog. Phys. **66**, 523 (2003).

[3]. B.C. Stipe, M.A. Resaei, W. Ho. Science **280**, 1732 (1998).

ФОТОЭМИССИЯ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ

Чижов Ю.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
E-mail: chizhov@photonics.phys.spbu.ru

Исследование энергетики ионных состояний свободных металлокомплексов методом фотоэлектронной спектроскопии в совокупности с современными квантовыми методами расчета существенно расширяет наши фундаментальные знания о характере взаимодействия атомов металла с органическим лигандом, важно для понимания механизмов реакций, связанных с переносом электрона, для развития квантовых методов расчета и физики каталитических процессов.

На примере исследования энергетических состояний положительных ионов ряда металлоорганических π -комплексов 3-х классов, основу которых составляют изоэлектронные соединения – бисбензолхром ($\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6$)Cr($\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6$), бензол-хромтрикарбонил ($\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6$)Cr(CO)₃ и ферроцен ($\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5$)Fe($\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5$) показаны общие и специфические закономерности изменения спектра энергетических состояний молекулярных ионов π -комплексов. Результаты неэмпирических расчетов методом теории функционала плотности (ТФП), выполненные в приближениях B3LYP/6-31G(d), SVWN/6-31G(d) и BP86/6-31G(d) показали, что одноэлектронные энергии и орбитали Кона-Шема, получаемые в рамках метода ТФП для основного состояния нейтральной молекулы, пригодны для количественного описания энергетического спектра электронных состояний ионов металлокомплексов. Рассмотрен простой метод расчета потенциалов ионизации металлокомплексов в рамках «расширенной» теоремы Купманса: $\text{ПИ} = -\varepsilon_{\text{КШ}} + D_{\text{К}}$, где ПИ – величина рассчитываемого потенциала ионизации комплекса, $\varepsilon_{\text{КШ}}$ – одноэлектронная энергия Кона-Шема, $D_{\text{К}}$ – дефект Купманса, постоянная для данного типа МО энергетическая поправка.

Рассмотрен ряд электронных эффектов, возникающих в металлокомплексах: в частности, эффект аддитивного влияния функциональных заместителей в бензольных кольцах на первый потенциал ионизации бисареновых π -комплексов; эффект разделения π -электронной системы полициклических ароматических молекул в хромтрикарбонильных комплексах на две невзаимодействующие π -системы, одна из которых локализована на координированном фрагменте, а другая – на некоординированном фрагменте; нарушение взаимодействия между π -электронными системами ферроцена и заместителя в случае введения СО-группы между ними.

ВОЗМОЖНОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ: ОТ СИНХРОТРОНОВ К ЛАЗЕРАМ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

Молодцов С.Л.

*Европейский Рентгеновский Лазер на Свободных Электронах, Гамбург
European X-Ray Free Electron Laser (XFEL), Hamburg*

Огромным шагом в области развития экспериментальных спектроскопических методик исследования химического состояния твердых тел, жидкостей и газов явилось введение в эксплуатацию мощных источников синхротронного излучения (СИ) – накопительных колец 3-его поколения. Ещё более значимым представляется использование новейших линейных источников СИ 4-го поколения – лазеров на свободных электронах, характеризующихся яркостью, на несколько порядков превышающей яркость синхротронов, и позволяющих проводить исследования с *фемто* и даже *атто* секундным временным разрешением.

В настоящем докладе сравниваются экспериментальные возможности источников СИ 3-его и 4-го поколения, уделяя особое внимание статусу и научным программам Европейских стран, планируемым к проведению на Европейском Рентгеновском Лазере на Свободных Электронах в Гамбурге.

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ

Кузнецов М.В.

*Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург,
Первомайская, 91, kuznetsov@ihim.uran.ru*

В докладе обсуждаются основы современных методов анализа поверхности и перспективы их использования для решения фундаментальных и прикладных задач материаловедения. Основное внимание уделено методам рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (РФЭС УР), сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и рентгеновской фотоэлектронной дифракции (РФД). Если первые два метода хорошо известны и широко применяются исследовательской практики, то фотоэлектронная дифракция как метод менее популярен и востребован. В то же время РФД дает ценную информацию о поверхности, он позволяет судить о локальных позициях атомов на поверхности и с технической точки зрения является вариантом РФЭС с угловым разрешением. В традиционной РФЭС-спектроскопии фотоэлектроны, эмитированные с поверхности под действием $h\nu$ -квантов рентгеновского излучения несут информацию о концентрации атомов на поверхности и их химическом (валентном) состоянии. В РФД-методе анализируется не только энергия фотоэлектронов, но и направление их вылета с поверхности, пространственная дифракционная картина формируется за счет рассеяния фотоэлектронов на ближайшем окружении атома-эмиттера. Теоретический анализ дифракционных картин дает уникальную информацию о структурных позициях на поверхности и в приповерхностных слоях атомов того или иного сорта и, более того, атомов одного сорта, но находящихся в разных химически неэквивалентных состояниях. В совокупности методы РФЭС, РФД и СТМ дают информацию о химическом составе, валентности элементов, расположению атомов и электронной структуре поверхностных слоев твердотельных материалов.

Спектральные и микроскопические методы анализа поверхности интересны для широкого круга фундаментальных задач *surface science*, в докладе обсуждаются результаты оригинальных исследований взаимодействия реактивных газов с поверхностями d -металлов, сопровождающихся формированием низкоразмерных поверхностных структур нитридов, карбидов и оксидов. Возможности СТМ с атомарным разрешением демонстрируются на примерах квазипериодических структур NbO/Nb(110) и дихалькогенидов титана TiX_2 (X:S, Se, Te).

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ 08-03-00043.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2D, 1D И 0D НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Шикин А.М.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: shikin@paloma.spbu.ru*

Ограничение размеров системы в одном или нескольких координатных направлениях приводит к дискретизации электронной структуры в этих направлениях и соответствующему изменению их физико-химических свойств, варьируемых при изменении параметров размерного ограничения. В докладе будут обсуждены закономерности формирования и особенности электронной структуры систем различной размерности (2D, 1D, 0D), условий их синтеза, основанного на принципах самоорганизации, и возможности использования уникальных физико-химических свойств систем различной размерности. В первой части будут проанализированы эффекты размерного квантования электронной структуры тонких слоев (2D-систем) и зависимость спектров квантовых состояний от особенностей электронной структуры как металла, из которого состоит адсорбируемый слой, так и подложки, на которой этот слой формируется. Во второй части будут обсуждены особенности электронной структуры 1D-систем (квантовые проволоки и полоски) и упорядоченных ансамблей 1D-квантовых объектов. Будут проанализированы эффекты латерального квантования электронной структуры и латеральной сверхпериодичности. В третьей части доклада будут проанализированы особенности электронной структуры 0D-систем (квантовых точек (нанокластеров)) и упорядоченных ансамблей 0D-квантовых объектов. Будет показана уникальность физико-химических свойств, присущих 0D-квантовым объектам: особенности размерного квантования электронной структуры, переход «диэлектрик-металл», повышенная каталитическая активность и т.п. В заключение будут обсуждены особенности спиновой электронной структуры низкоразмерных систем и эффектов индуцированной спиновой поляризации электронных состояний.

**ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ И ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ В
ИССЛЕДОВАНИЯХ ПОВЕРХНОСТИ МИНЕРАЛОВ**

Михлин Ю.Л.

*Институт химии и химической технологии СО РАН,
Красноярск, ул. К. Маркса, 42, yumikh@icct.ru*

В докладе кратко рассматривается история и анализируется современное состояние исследований методами фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской спектроскопии поглощения, сканирующей зондовой микроскопии природных материалов – минералов и продуктов их превращений в природных условиях и в технологических процессах, некоторых биоминеральных и биологических объектов. Многие природные соединения и материалы представляют интерес не только для наук о Земле или сырьевых отраслей, но и для других областей науки и технологии. Перед исследователями стоят задачи определения электронной структуры и характера химической связи, взаимосвязи между строением, физико-химическими свойствами и реакционной способностью минералов, в особенности, их поверхности, в частности, применительно к геохимии, процессам рудообразования, экологически важным реакциям, флотации, выщелачиванию и вскрытию сырья и т.д. Сложный и неоднородный состав и структура исследуемых объектов, а более всего – общее снижение внимания к научным проблемам переработки минерального сырья привели к определенному отставанию в применении рассматриваемых методов, в России особенно сильному, поэтому одной из важнейших задач является расширение их использования. В мире растет число работ, выполненных с помощью синхротронного излучения, необходимого при изучении малых количеств веществ или низких содержаний элементов (например, EXAFS и XANES для «невидимых» благородных металлов), получении спектров с высоким разрешением, в том числе пространственным. В последние годы, как и в других областях, резко вырос интерес к наночастицам и наноразмерным материалам, в том числе размерным эффектам, бионеорганическим композитам, увеличивается доля исследований *in situ*.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Кадры» (ГК 02.740.11.0269).

РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ НАНЕСЕННЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ОКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Стахеев А.Ю.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва
Ленинский проспект, 47, st@ioc.ac.ru*

Анализируются возможности получения информации о структуре активных центров в гетерогенных оксидных и металлических катализаторах процессов гидрирования, гидрогенолиза, полного и парциального окисления:

1. Специфика использования РФЭС при исследовании реальных каталитических систем.
2. Электронное состояние нанесенных наночастиц металла, взаимосвязь каталитических и электронных свойств.
3. Дисперсность активной фазы в нанесенных катализаторах по данным фотоэлектронной спектроскопии
4. Использование Оже-электронных спектров, индуцированных рентгеновским излучением для получения дополнительной структурной информации.
5. Процессы активации и дезактивации гетерогенных катализаторов. Исследование динамики изменения структуры активной поверхности реальных катализаторов методом РФЭС.

КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

ELECTRON *f-d* HYBRIDIZATION AND FINE STRUCTURE OF «*f*-BANDS» IN Yb-BASED HEAVY-FERMION MATERIALS

Vyalikh D.V.¹, Danzenbächer S.¹, Kucherenko Yu.^{1,2}, Laubschat C.¹, Krellner C.³, Geibel C.³ and Molodtsov S.L.¹

¹*Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden, Germany, vyalikh@physik.phy.tu-dresden.de*

²*Institute for Metal Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, UA-03142 Kiev, Ukraine*

³*Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Nöthnitzer Strasse 40, D-01187 Dresden, Germany*

The interaction of nearly localized $4f$ - with itinerant electrons gives the key input into many fascinating phenomena manifested in the rare-earth intermetallic materials, like magnetism, superconductivity, Kondo effect and heavy-fermion (HF) behavior. Unrevealing the driving mechanisms of these phenomena requires deep insight into the anisotropy of the coupled electronic states, in particular in the Fermi level region. We performed a comprehensive experimental evaluation of the hybridization between $4f$ - and valence d -states in Yb-based intermetallics, using ultra-high energy resolution angle-resolved photoemission. Note that, since we are analyzing the electrons escaping the solid with extremely small mean-free paths of just a couple of angstrom, the contribution of the surface bands to the overall picture of electronic structure is considerable. We were able to distinguish the surface/bulk electronic bands in Yb-based materials not only by a comprehensive theoretical approach, but also experimentally by «*in-situ*» deposition of overlayers. Doing so, we were also able to monitor and evaluate the hybridization strength in details by gradually and systematically changing the energy overlap of interacting f and d states at the surface. We anticipate that our approach would be good starting point for tailoring of electronic and thermodynamical properties of the HF materials.

Presently, particular attention is paid on the possibility to systematically tune the physical properties of such structures. For example, it was demonstrated that gradually substituting Rh by Ir in YbRh_2Si_2 enhances the Kondo temperature from $\sim 25\text{K}$ to $\sim 40\text{K}$. Since the nominally isoelectronic materials YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 lie on opposite sides of a quantum critical point (QCP), doing such tuning should allow to get closer to the QCP where novel states of matter can be expected.

Although we performed our research at a temperature much higher ($\sim 15\text{K}$) than the QCP regime we found that indeed the electronic structure of those systems changed systematically when gradually substituting Rh by Ir atoms and we believe that our finding will be essential contribution to the general understanding of non-Fermi liquid phenomena in Yb-based intermetallics.

[1]. D.V. Vyalikh et. al., Phys. Rev. Lett. 103 137601 (2009).

[2]. D.V. Vyalikh et. al., Phys. Rev. Lett. 100, 056402 (2008).

[3]. S. Danzenbächer et. al., Phys. Rev. Lett. 102, 026403 (2009).

СТРУКТУРА ПОЛИВИНИЛСИЛОКСАНА С ПРИСОЕДИНЕННЫМ ХЕЛАТНЫМ КОМПЛЕКСОМ ХРОМА ПО ДАННЫМ РФЭС

Вовна В.И., Осьмушко И.С., Короченцев В.В.

*Дальневосточный государственный университет,
Владивосток, ул. Суханова, 8, vanja@phys.dvqu.ru*

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии проведено исследование объемной смеси поливинилсилоксана ((CHCH₂O_{1,5}Si)_n) с комплексом сульфенхлорида трис-ацетилацетоната хрома (Cr(acacSCl)₃). По спектральным данным на основе анализа основных уровней определены химические состояния и относительная концентрация атомов, входящих в состав золь-геля. Представленные результаты дают некоторую информацию о схеме взаимодействия комплекса с полимером.

Таблица. Характеристики линий РФЭ спектра для золь-геля

состояние	E _{св.} , эВ	полуширина, эВ
O1s	532,4	2,17
C1s	285,1	1,97
	287,2	1,80
Si2p	102,9	2,02
Si2p _{3/2}	102,7	1,79
Si2p _{1/2}	103,5	1,75
Cr2p _{3/2}	577,7	2,64
S2p _{1/2}	164,9	1,70
S2p _{3/2}	163,7	1,70
Cl2p	200,3	3,21

Данные для атомов кремния, и кислорода близки к результатам, полученным для чистого поливинилсилоксана. Различные состояния атомов кислорода проявляются в уширении линии O1s. Для атомов углерода появляется состояние, соответствующее более сильному окислению (в частности С-О лиганда).

Относительная концентрация атомов углерода к атомам кислорода (2,6) указывает на присутствие некоторых загрязнений, в частности диметилового эфира. По отношениям атомов кремния к атомам серы (2,6) и атомов кислорода к атомам кремния (2,9) можно предположить, что один комплекс сульфенхлорида ацетилацетоната хрома приходится на 4-8 элементарных звеньев поливинилсилоксана.

XPS ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ОКИСЛЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК Ni/Si

Домашевская Э.П.¹, Казаков А.Т.², Рябцев С.В.¹,
Сидашов А.В.², Терехов В.А.¹

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru*

²*НИИ Физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

Процессы фазообразования в тонких пленках никеля на кремниевой подложке при высокотемпературных отжигах в инертной или окислительной среде достаточно активно исследуются в силу возможностей их применения в микроэлектронике и сенсорной технике.

В работе методом XPS исследованы изменения элементного и фазового состава тонкой пленки ($d=50$ нм) никеля на кремнии в исходном состоянии и после отжигов при 400 °С и 1000 °С. Для анализа этих изменений по всей толщине пленки проводилось травление ионами Ag^+ .

В результате этих исследований установлено, что при естественном окислении тонкой пленки исходного образца на ее поверхности наряду с окислами NiO и Ni_2O_3 наблюдается металлический никель. Существенного взаимодействия металлической пленки с подложкой кремния при комнатной температуре не происходит. Отжиг при 400 °С приводит к исчезновению элементарного никеля. Более высокий температурный отжиг 1000 °С на воздухе приводит к образованию не только высшего окисла никеля но и субоксида кремния в результате диффузии Si через тонкую пленку. Наряду с этим, в результате взаимодействия пленки с подложкой происходит образование силицида кремния.

Таким образом, данные XPS показывают, что в случае тонких пленок никеля наноразмерной толщины происходит её существенное окисление уже при комнатной температуре. Отжиг при 400 °С приводит к её полному окислению, а при 1000 °С происходит взаимодействие металла не только с окружающим кислородом, но и с подложкой кремния.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

**РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА
FeAs - СВЕРХПРОВОДНИКОВ****Курмаев Э.З.***Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург,
kurmaev@ifmlrs.uran.ru*

Приводятся результаты (FP LAPW) первопринципных расчетов электронной структуры и измерений рентгеновских эмиссионных, абсорбционных и фотоэлектронных спектров 1111 ($R\text{FeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, $R=\text{La}, \text{Sm}$), 122 (CaFe_2As_2) и 111 (LiFeAs , NaFeAs) FeAs-сверхпроводников. Установлено, что экспериментальные рентгеновские спектры находятся в хорошем согласии с одноэлектронными зонными расчетами. И в теории и эксперименте обнаружено, что Fe 3d-состояния доминируют вблизи уровня Ферми и не формируют нижней Хаббардовской d-зоны, типичной для сильно коррелированных систем. Спектры резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS), измеренные вблизи Fe $L_{2,3}$ -порогов возбуждения показывают, что $I(L_2)/I(L_3)$ отношение близко к таковому в чистом Fe и существенно меньше, чем в сильно коррелированном FeO. Установлено, что соответствие экспериментальных спектров с LDA+DMFT расчетами [1] имеет место только в случае учета Fe 3d-As 4p гибридизации, которая существенно ослабляет электронные корреляции. Делается вывод, что исследованные FeAs-сверхпроводники принадлежат к слабым или умеренно слабым коррелированным системам.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ для ведущих научных школ (грант НШ-3572.2010.2) и РФФИ (проект 08-02-00148).

[1]. V.I. Anisimov, E.Z. Kurmaev, A. Moewes and Y.A. Izyumov, Physica C **469**, 442 (2009).

РЕНТГЕНОВСКАЯ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ

Мазалов Л.Н.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск,
630090, пр. Акад. Лаврентьева, 3, lm@che.nsk.su*

В настоящем обзорном докладе делается обзор экспериментальных и теоретических достижений в области рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии малых молекул. Рентгеновские эмиссионные спектры рассматриваются в сопоставлении с результатами рентгеноэлектронных исследований внутренних и внешних уровней молекул.

Показано, что совместное использование рентгеноспектральных и рентгеноэлектронных данных позволяет получить наиболее полную информацию об энергетическом спектре и электронном строении молекул.

Проведено сопоставление экспериментальных рентгеновских спектров большого ряда простых молекул с результатами теоретических расчетов, выполненных в различных приближениях.

Рассмотрены результаты исследования рентгеновских спектров молекул, полученных с использованием поляризационного рентгеновского излучения, а также при пороговом возмещении.

ДИНАМИКА ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ МЕЖДУ ПЕРВЫМ И ВТОРЫМ ПОРОГОМ ИОНИЗАЦИИ

Сухоруков В.Л.¹, Петров И.Д.¹, Хотоп Х.²

¹Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, пл. Народного Ополчения, 2, vis@rgups.ru

²Технический университет Кайзерслаутерн, Германия

Возбуждение атомов благородных газов между первым $mp_{3/2}^5$ и вторым $mp_{1/2}^5$ порогом ионизации определяется автоионизацией Ридберговских состояний (АРС) $mp_{1/2}^5 n \ell' [K]_J$. Начиная с пионерской работы Бойтлера [1], исследование этих резонансов привлекает внимание как экспериментаторов, так и теоретиков (см, например, работы [2,3] и ссылки в них). Интерес связан с тем, что, несмотря на кажущуюся простоту спектров, связанных с АРС, их интерпретация требует прецизионных расчетов с учетом многоэлектронных эффектов.

В данной работе проанализированы основные многоэлектронные эффекты, которые влияют на полные и парциальные сечения фотоионизации АРС и их распад. Выявлены общие тенденции в серийных закономерностях. Проанализировано влияние взаимодействия между резонансами и сплошными спектрами на форму спектральных линий. Спектры, рассчитанные в приближении конфигурационного взаимодействия с учетом поляризации остова и релятивистских эффектов, сопоставлены как с результатами измерений, известных из литературы, так и с результатами оригинальных измерений.

[1]. H. Beutler, Z. Phys. **93**, 177 (1935).

[2]. J. Berkowitz, Adv. Chem. Phys. **72**, 1 (1988).

[3]. I.D. Petrov, V.L. Sukhorukov, H. Hotop, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 065205 (2008).

РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ОСОБЕННОСТИ ПРИРОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В СОЕДИНЕНИЯХ ТОРИЯ

Тетерин Ю.А.¹, Рыжков М.В.², Терехов В.А.³,
Маслаков К.И.¹, Тетерин А.Ю.¹, Иванов К.Е.¹

¹РНЦ «Курчатовский институт», Москва, teterin@ignph.kiae.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, ryz@ihim.uran.ru

³Воронежский государственный университет, Воронеж, ftt@phys.vsu.ru

К особенностям электронного строения ThO_2 и ThF_4 можно отнести участие $\text{Th}5f,6p$ атомных оболочек (АО) в образовании внешних валентных (ВМО, от 0 до ~ 13 эВ) и внутренних валентных (ВВМО от ~ 13 до ~ 35 эВ) молекулярных орбиталей (МО). Несмотря на то, что $\text{Th}5f$ -электроны отсутствуют в атоме тория, некоторые экспериментальные [1] и теоретические результаты, полученные для ThO_2 , указывают на присутствие в его валентной зоне заполненных $\text{Th}5f$ состояний. Это предполагает участие $\text{Th}5f$ -электронов в химической связи рассматриваемых соединений тория. Этот важный факт нуждается в подтверждении. Также остается непонятной до конца роль $\text{Th}6p$ АО в формировании ВМО и ВВМО в таких соединениях.

В настоящей работе рассматриваются результаты анализа тонкой структуры спектров РЭС валентных электронов ThO_2 и ThF_4 (от 0 до ~ 35 эВ) с учетом данных их релятивистских расчетов. Теоретически показано и экспериментально подтверждено, что в ThO_2 и ThF_4 $\text{Th}5f$ -электроны могут непосредственно участвовать в химической связи. Найдено, что $\text{Th}6p$ -электроны принимают значительное участие в образовании не только ВВМО но и ВМО. Установлен состав и порядок следования внутренних валентных молекулярных орбиталей. Полученные данные позволили впервые расшифровать тонкую структуру рентгеноэлектронных спектров от 0 до ~ 35 эВ и создать для рассматриваемых соединений количественные схемы МО, с учетом которых расшифрована тонкая структура рентгеновских $O_{4,5}(\text{Th})$ - и $O(\text{F})K_{\alpha}$ -эмиссионных, поглощения вблизи $O_{4,5}(\text{Th})$ -края, резонансной электронной эмиссии валентных электронов ThO_2 , ОКЛЛ Оже- спектров.

[1]. Макаров Л.Л., Каразия Р.И., Батраков Ю.Ф. Ю.Ф. и др., Радиохимия. 1978. Т.1. С. 116.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08–03–00314.

БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Щукарёв А.В.

Umeå University, 901 87 Umeå, Sweden, andrei.shchukarev@chem.umu.se

Уникальные возможности методов рентгеновской и электронной спектроскопии для изучения подавляющего большинства реальных биологических и медицинских объектов существенно ограничены условиями высокого вакуума, необходимыми для получения спектров. В настоящее время экспериментальные исследования биомедицинских поверхностей проводятся *ex situ*, в лучшем случае с использованием лиофильной сушки. Получаемая информация позволяет лишь косвенно судить о процессах, протекающих на границах раздела твердой и жидкой фаз. Качественный прорыв в этой области может обеспечить методика быстрой заморозки центрифугированных влажных паст [1], разработанная нами для РФЭС-исследований минеральных суспензий.

В рамках традиционного подхода к подготовке образцов, в работе представлены новые результаты исследования *ex situ* поверхности зубной эмали после воздействия щелочной среды, а также химического состава камней, образующихся в простате при ее заболеваниях.

Возможности пробоподготовки с использованием быстрой заморозки проиллюстрированы РФЭС-исследованиями поверхности живых бактериальных культур, а также границы раздела биокерамика-питательная среда для выращивания клеток трех биоактивных материалов (Bioglass 45S5, Bio-Oss[®] и Algipore[®]), используемых в челюстной хирургии в качестве имплантов при восстановлении дефектов костной ткани.

Обсуждаются преимущества и недостатки быстрой заморозки образцов и перспективы ее применения в области фундаментальных и прикладных биомедицинских проблем.

[1]. A.Shchukarev, S.Sjöberg. *Surface Science* **584** (2005) 106-112.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 1

**НОВЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В ОПИСАНИИ
ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ. НОВЫЕ РАЗРАБОТКИ
ЛАБОРАТОРНЫХ ПРИБОРОВ**

CHEMICAL STATE IMAGING OF NANOCONES USING AUGER ELECTRON SPECTROSCOPY

Raman Sankar, Paul Dennis, Hammond John, Betz Wolfgang

Physical Electronics, Inc., 18725 Lake Drive East, Chanhassen, MN, USA, 55317
microscop@microscop.ru

Nanotechnology research has increased dramatically and it is an essential to understand the growth mechanism and chemical nature of these new materials in addition to high resolution imaging. Scanning electron beam techniques, including Scanning Auger Microscopy, have provided valuable imaging and elemental characterization tools for these structures with a spatial resolution better than 10 nm. To enhance the Auger analysis for nanocones, high energy resolution chemical state spectroscopy and imaging has been combined with the imaging capabilities of a CMA based Scanning Auger.

In this presentation we will highlight the advantages of the CMA based Scanning Auger system with various examples. We will use a combination of these Auger analytical capabilities, in the analysis of nanocones grown by plasma enhanced chemical vapor deposition which reveals a non-uniform chemical composition between several different nanocones. The quantitative elemental analysis as well as the imaging of different chemical states has been obtained without imaging artifacts induced by the shapes of the vertically oriented nanocone structures. These results provide further insights into the nanocone growth mechanisms.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ФТОРУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Булущева Л.Г., Окотруб А.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, Новосибирск,
проспект Академика Лаврентьева, 3, E-mail: bul@niic.nsc.ru*

Исследована возможность моделирования рентгеновских спектров поглощения вблизи С К-края и F К-края углеродных и фторуглеродных материалов по результатам квантово-химических расчетов основного состояния молекулярных структур и кластеров. Объектами исследования являлись графит, фуллерен C_{60} , фторид графита $(CF)_n$ и фторид фуллерена $C_{60}F_{36}$. Показано, что относительная интенсивность и расстояние между основными особенностями спектра углерода в предкраевой области удовлетворительно воспроизводятся в $(Z+1)$ -приближении, в котором дырочное состояние на внутреннем уровне элемента Z моделируется увеличением числа протонов в ядре. В соответствии с этим приближением, атом углерода (атом фтора) замещается на атом азота (атом неона), а увеличение общего числа электронов в системе компенсируется за счет положительного заряда. По сравнению с расчетами с полным учетом дырочных состояний, $(Z+1)$ -приближение требует значительно меньших компьютерных ресурсов. Для лучшего соответствия теоретического спектра экспериментальным данным предложено изменять ширину спектральных линий в зависимости от энергии фотонов. Использование $(Z+1)$ -приближения для моделирования спектра вблизи F К-края поглощения фторида графита $(CF)_n$ не привело к положительным результатам из-за сильной локализации орбиталей неона. Показано, что корректного описания основных особенностей в предкраевой области спектра фтора можно достичь в результате удлинения C-F связи на $\sim 0.1 \text{ \AA}$ по сравнению с длиной связи в системе, находящейся в основном состоянии. Данный результат может объясняться энергетической нестабильностью C-F связи при создании вакансии на внутренних уровнях фтора. Экспериментально показано изменение спектра поглощения вблизи F К-края фторида графита $(CF)_n$ при облучении образца рентгеновским пучком.

ИЗУЧЕНИЕ КЛАСТЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ЖИДКИХ d-МЕТАЛЛОВ

Мурин А.В., Шабанова И.Н., Холзаков А.В.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, E-mail: xps@fti.udm.ru

Сведения о кластерной структуре металлических расплавов являются ключевыми для управления синтезом наноструктур с определёнными формами. Известно, что структура жидкой системы наследуется при охлаждении. В представленной работе проводилось изучение наноразмерной кластерной структуры d-металлов Ni, Cu и Au в жидком состоянии.

Проводилось сравнительное изучение теоретических моделей атомной структуры жидкостей d-металлов, полученных методом классической молекулярной динамики. Использовались многочастичные полуэмпирические потенциалы метода погруженного атома, обеспечивающие адекватное описание межатомного взаимодействия. Модельные структуры жидких металлов использовались в качестве входных данных для: (а) расчёта функции радиального распределения (ФРРА); (б) проведения зонных расчётов электронной структуры методами TB-LMTO-ASA. И APW+LO; (в) анализа кластерной структуры на основе расчётов метрик, количественно описывающих ближнее окружение атомов и позволяющих идентифицировать форму нанокластеров. Кроме того, было проведено экспериментальное исследование электронной структуры методом рентгенэлектронной спектроскопии d-металлов в жидком состоянии вплоть до температуры 2000 К и получены рентгеноэлектронные спектры валентных полос.

Сближение атомов в жидком состоянии приводит к сильному перераспределению электронной плотности между атомами, наблюдается сильная гибридизация d электронов с p электронами в зависимости от локализации d-электронов в исследуемых металлах, определяющих форму валентных полос и кривой полной плотности электронных состояний. В результате, образуются кластеры с сильными межатомными связями. Хорошее согласие расчётных и экспериментальных ФРРА, а также расчётных плотностей состояний и рентгенэлектронных спектров, позволяет сделать вывод об адекватности результатов моделирования атомной структуры и последующего кластерного анализа. Обсуждается форма нанокластеров и кластерный состав жидкостей d-металлов в зависимости от заполнения d-оболочки.

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ
В РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОМ АНАЛИЗЕ
АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ КВАРЦА**

Немцова О.М., Канунникова О.М.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, 426000, Кирова 132.

E-mail: Nemtsova@fnms.fti.udm.ru

Целью данной работы явилась апробация метода регуляризации [1] для обработки экспериментальных рентгеноэлектронных спектров: впервые определена аппаратная функция (энергоанализатора) спектрометра ЭС-2401 (Гауссиан с шириной линии 0.72 эВ); получена истинная линия внутреннего уровня (положение линий, ширина и соотношение интенсивностей) спектра Si2p (111) монокристалла, полученного на спектрометре ЭС-2401; проведена обработка спектров кристаллических модификаций кварца с использованием смоделированных одиночных спектральных линий анализируемых элементов (Si2p, O1s). Впервые выделение составляющих в сложных РФЭ спектрах химических соединений выполнено без процедуры вычитания фона.

На основании анализа рентгеноэлектронных спектров описана атомная структура стеклообразного и кристаллического кварца.

Продемонстрированы эффективность и преимущества использования методики, основанной на теоретическом описании основного уравнения рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии интегральным уравнением Фредгольма 1 рода [2].

[1]. Бабанов Ю.А., Каменский И.Ю., Кузнецов В.Л., Михайлова С.С., Титов П.В., Филатов А.Л. // Поверхность, 2006, №11, 44-48.

[2]. Yu.A. Babanov, O.M. Nemtsova, I.Yu. Kamensky, S.S. Mikhailova // J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena (to be published).

Авторы выражают благодарность проф. Ю.А. Бабанову, по инициативе и при активном участии которого была выполнена данная работа.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА В ЦИРКОНОЦЕНОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Панченко В.Н.¹, Захаров В.А.¹, Brintzinger H.H.²

¹*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090 Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 5. panchenko@catalysis.nsk.su*

²*Fachbereich Chemie, Universität Konstanz, Germany*

В данной работе с использованием метода UV/vis спектроскопии нами был изучен процесс формирования активного компонента в цирконоценовых нанесенных $\text{SiO}_2/\text{MAO}/\text{Me}_2\text{Si}(\text{ind})_2\text{ZrCl}_2$ (I) и гомогенных $\text{MAO}/\text{Me}_2\text{Si}(\text{ind})_2\text{ZrCl}_2$ (II) катализаторах [1-3].

Показано, что мольное отношение MAO/Zr в системах (I) и (II) влияет на состав образующихся соединений циркония. При мольных отношениях $\text{MAO}/\text{Zr} < 40$ происходит моноалкилирование $\text{Me}_2\text{Si}(\text{Ind})_2\text{ZrCl}_2$, при этом наблюдается гипсохромный сдвиг полос переноса заряда (ППЗ) в UV/vis спектре (446→409 нм). Повышение мольного отношения MAO/Zr приводит к катионизации цирконоцена, при этом в UV/vis спектре наблюдается батохромный сдвиг ППЗ: 409 нм (A)→456 нм (B)→496 нм (C). Показано, что в системе (I) при мольных отношениях $\text{MAO}/\text{Zr} > 400$ образуются преимущественно катионы $[\text{Me}_2\text{Si}(\text{Ind})_2\text{Zr}-\mu-(\text{Me})_2\text{AlMe}_2]^+$ (C), в то время как в системе (II) – контактные ионные пары $[\text{Me}_2\text{Si}(\text{Ind})_2\text{ZrMe}]^+$ (B).

Изучен процесс активации системы (II) $\text{Al}^i(\text{C}_4\text{H}_9)_3$ (ТИБА). Показано, что ТИБА взаимодействует как с $\text{Me}_2\text{Si}(\text{ind})_2\text{ZrCl}_2$ так и с MAO. На основании данных UV/vis, ¹H NMR сделано предположение, что при активации катализатора ТИБА происходит алкилирование цирконоцена с образованием гетероядерных катионных структур $[\text{Me}_2\text{Si}(\text{Ind})_2\text{Zr}-\mu-(\text{R})_2\text{Al}(\text{i-Bu})_2]^+$, аналогичных структурам (E), наблюдаемым в гомогенной системе (I). Данные химического анализа показывают, что 50% (мол.) Zr, закрепленного на поверхности удаляются при активации системы (II) ТИБА. Анализ полимеров и каталитические данные полимеризации позволяют сделать вывод о том, что удаление активного компонента в ходе полимеризации и протекание полимеризации в растворе связано с образованием модифицированного MAO, растворимого в алифатических углеводородах.

- [1]. Panchenko, V.N.; Zakharov, V.A.; Paukshtis E.A. *J. Mol. Cat. A*: **2005**, *240*, 33.
 [2]. Wieser, U.; Schaper, F.; Brintzinger, H.H. *Macromol. Symposia* **2006**, *236*, 63.
 [3]. Babushkin, D.E.; Panchenko, V.N.; Timofeeva, M.N.; Zakharov, V.A.; Brintzinger, H.H. *Macromol. Chem. Phys.* **2008**, *209*, 1210.

ТЕОРЕМА КУПМАНСА ДЛЯ СИСТЕМ С ОТКРЫТЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ОБОЛОЧКАМИ

Плахутин Б.Н.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
Лаборатория квантовой химии, Новосибирск 630090.*

E-mail: Plakhutin@catalysis.ru

Как показано в классической работе Рутана (1960 г.), орбитальные энергии в методе Хартри-Фока для открытых электронных оболочек (ROHF) являются неоднозначно определенными величинами. Основываясь на этом результате, в 70-х годах рядом авторов было «доказано», что теорема Купманса не выполняется в методе ROHF, и это утверждение стало общепринятым в литературе. В докладе излагается полученное нами строгое доказательство выполнимости теоремы Купманса в методе ROHF.

Канонический метод ROHF.

Нами разработан специальный (*канонический*) метод ROHF [1], орбитальные энергии в котором по определению удовлетворяют теореме Купманса для всего спектра энергий (т.е., для потенциалов ионизации и сродства к электрону).

Вариационная формулировка теоремы Купманса.

Основываясь на результатах [1], нами впервые дана общая (вариационная) формулировка теоремы Купманса, основанная на учете конфигурационного взаимодействия (КВ) для ионизированных систем [2,3]. Фундаментальный результат, лежащий в основе новой формулировки, состоит в том, что энергия иона, рассчитанная в приближении «замороженных» *канонических* МО, равна энергии, рассчитанной методом КВ (полное КВ в ограниченном активном пространстве).

Для серии парамагнитных систем: N, Mn, O₂, NO₂, N@C₆₀ и др. проведено сопоставление экспериментальных потенциалов ионизации с их оценками по теореме Купманса.

Работа поддержана грантами РФФИ (09-03-00113) и ОХНМ РАН (2009/5.1.9).

- [1]. B.N. Plakhutin, E.V. Gorelik and N.N. Breslavskaya, J. Chem. Phys. **125**, 204110 (2006).
- [2]. B.N. Plakhutin and E.R. Davidson, J. Phys. Chem. A. **113**, 12386 (2009).
- [3]. E.R. Davidson and B.N. Plakhutin, *in press*.

РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В ДИОКСИДЕ ТОРИЯ

Рыжков М.В.¹, Тетерин Ю.А.², Тетерин А.Ю.²

¹Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, ryz@ihim.uran.ru

²Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва

В рамках строго-релятивистского метода дискретного варьирования (РДВ) выполнены расчеты различных фрагментов кристаллической решетки диоксида тория ThO_8 , $\text{Th}_{13}\text{O}_{56}$ и $\text{Th}_{63}\text{O}_{216}$. В работе использовалась оригинальная программа метода РДВ, основанного на решении уравнения Дирака-Слэтера для 4-х компонентных волновых функций, преобразующихся по неприводимым представлениям двойных групп. Расширенный базис численных атомных 4-х компонентных орбиталей (АО), полученных из решения одноэлектронной задачи для изолированных нейтральных атомов, включал также виртуальные состояния $\text{Th}5f^{5/2}$, $5f^{7/2}$, $7p^{1/2}$, $7p^{3/2}$ - типа. В расчетах использовался локальный обменно-корреляционный потенциал, а эффективные заряды на атомах вычислялись интегрированием зарядовой плотности в пространственных областях, заключенных между точками минимума электронной плотности. Для исследования химического связывания рассматривались заселенности перекрывания различных пар АО металлов и лигандов (n_{ij}). Получено, что основной вклад в химическое связывание дают $\text{Th}6d - \text{O}2p$ состояния, при этом n_{ij} в ThO_2 оказались несколько больше, чем в UO_2 и PuO_2 . С другой стороны, вклад в связь $\text{Th}5f$ АО заметно уменьшился по сравнению с $\text{U}5f$ и $\text{Pu}5f$.

На основе результатов расчетов дана интерпретация экспериментального рентгеноэлектронного спектра диоксида тория в диапазоне энергий связи от 0 до 50 эВ, полученного с использованием $\text{AlK}\alpha$ возбуждающего излучения. Теоретические спектры строились на основании полученных в расчетах кластеров ThO_8 , $\text{Th}_{13}\text{O}_{56}$ и $\text{Th}_{63}\text{O}_{216}$ полных и парциальных плотностей состояний, последние умножались на сечения фотоионизации соответствующих АО. В случае кластера $\text{Th}_{13}\text{O}_{56}$ кроме основного состояния были выполнены расчеты возбужденных состояний, соответствующих ионизации внешних и внутренних валентных орбиталей.

**МЕТОДЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
И СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ
В ГЕНЕТИЧЕСКОЙ МИНЕРАЛОГИИ И ГЕОХИМИИ**

Таусон В.Л.

ИГХ СО РАН, Иркутск. E-mail: vltauson@igc.irk.ru

Возникший на рубеже тысячелетий, несколько гипертрофированный интерес к наносистемам коснулся и наук о Земле. Между тем, ряд специфических эффектов в наноразмерных минеральных системах исследовали и раньше (например, образование полиморфных и политипных модификаций, а также твердых растворов вне областей их устойчивости как макрофаз [Tauson et al. – Geochim. Cosmochim. Acta. 1991. V.55. P.2851; 1993. V.57. P.815; 1997. V.61. P.4935; Chem. Geol. 1993. V.109. P.113]). В дальнейшем РФЭС, ЭОС, СЗМ в комплексе с методами экспериментальной геохимии значительно расширили круг установленных явлений в наноразмерных (по крайней мере, в одном измерении) геологических средах. Показано, что образующиеся в гидротермальных условиях кристаллы минералов и их природные аналоги имеют поверхностный слой толщиной до ~500 нм, отличный по химическому составу, стехиометрии и структуре от объема кристалла и фактически представляющий собой неавтономную фазу [Tauson et al. – Eur. J. Mineral. 2005. V.17. P.599; Crystal. Rep. 2009. V. 54. P.119]. НФ обладают важной для геохимии особенностью – поглощать элементы-примеси, несовместимые со структурой объемной матрицы. Например, пирротиноподобная НФ на пирите поглощает Au, Hg, Cd, причем коэффициент фракционирования этих элементов в НФ составляет десятки и даже тысячи (соответственно, возрастает и коэффициент распределения кристалл-раствор). В условиях высоких температур и давлений традиционные механизмы сорбции имеют подчиненное значение. Приоритетными становятся механизмы, обеспечивающие удержание элемента за счет его вхождения в состав НФ и взаимодействия с поверхностными дефектами. Одно из важных следствий этих результатов для аналитики геоматериалов (и не только) – зависимость содержания микроэлемента от распределения кристаллов по размеру в пробе, вызывающая ухудшение воспроизводимости анализа.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант № 09-05-00067) и СО РАН (проекты №117 и ОНЗ-5.1).

ИЗМЕНЕНИЕ ПЛОТНОСТИ НЕЙТРИННОГО ПУЧКА ПРИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ НЕЙТРИНО НА ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ

Трапезников В.А.

*Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Ижевск, Кирова, 132,
e-mail: xps@fti.udm.ru
Удмуртский государственный университет, 426037, Ижевск,
Университетская, 1*

При дифракции пучка нейтрино на изогнутом кристалле плотность пучка нейтрино по мере приближения к фокусу увеличивается, что ускоряет процессы смешивания и осцилляций и соответственно превращений электронных нейтрино в мюонные и тау нейтрино, с массами, превышающими массу электронных нейтрино на несколько порядков. В фокусе будет максимальная плотность тяжелых нейтрино и возможно дальнейшее преобразование нейтрино в еще более тяжелые частицы вплоть до образования родственной частицы, не имеющей заряда и имеющей момент, например, типа нейтрона, а возможно и плазмы типа водородной как на Солнце в процессе $\nu_e + n \rightarrow e^- + p$, где ν_e – электронное нейтрино, n – нейтрон, e^- – электрон и p – протон. Это приведет к существенному увеличению взаимодействия тяжелых нейтрино с веществом. Такая возможность представляется перспективной с целью создания нового вида возобновляемой энергетики или для анализа состояния вещества находящегося вне пределов воздействия и анализа другими методами. Например, при оценке сейсмической активности вещества Земли на значительной глубине от поверхности в условиях назревания землетрясения, как, например, предсказанного в 1985 сильнейшего землетрясения в Калифорнии с магнитудой 8 и вероятностью 60% в пределах 30 лет (в современных сообщениях в средствах массовой информации сила землетрясения указывается еще большей, с магнитудой 9). Метод повышения плотности пучка нейтрино за счет дифракции на изогнутых кристаллах при сведении вторичной экстинкции кристаллов до минимума и соответственно плотности пучка до максимального значения, можно рассматривать в первом приближении как метод исследования ожидаемого сжатия Вселенной.

**РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ КАК НЕРАЗРУШАЮЩИЙ МЕТОД
ИССЛЕДОВАНИЯ СКРЫТЫХ МЕЖФАЗОВЫХ ГРАНИЦ**

Филатова Е.О.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Санкт-Петербург, feo@EF14131.spb.edu*

В наши дни тонкопленочные и многослойные покрытия широко используются в микроэлектронике, материаловедении, оптике и рентгеновской оптике. Качество пленочных покрытий зачастую является решающим фактором, определяющим предельные параметры микроэлектронных и оптических устройств. Любые отклонения физических и геометрических параметров покрытий от желаемых, возникающие в процессе их формирования, приводят к флуктуациям их электронных свойств, а в ряде случаев и к полному исчезновению квантоворазмерных эффектов в устройствах наноэлектроники или катастрофическому падению отражения от короткопериодных многослойных зеркал рентгеновского диапазона. Поскольку толщина покрытий может составлять всего лишь единицы и даже доли нанометра возрастает роль интерслоев (протяженности и строения), образующихся на границе раздела двух различных веществ из-за взаимодиффузии, химических реакций и имплантации в процессе синтеза пленок. Это, в свою очередь, обуславливает повышенные требования к технологиям формирования тонких пленок и к средствам контроля их качества. Предпочтение отдается методам неразрушающего контроля. Одним из таких методов является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия высоких энергий (РФЭВЭ). В докладе будут рассмотрены теоретические и экспериментальные возможности РФЭВЭ как неразрушающего метода исследования скрытых межфазовых границ. В качестве примера будут приведены исследования «high-k» диэлектриков.

Работа была выполнена при поддержке проекта МНТЦ 3963.

АНАЛИЗ ПРЕДКРАЕВЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ КИСЛОРОДА В ОКСИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ DFT МЕТОДА И БАЗИСА ПАРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Рузанкин С.Ф., Зильберберг И.Л.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
ruzankin@catalysis.ru*

Эпоксидирование этилена на поверхности серебра связывают с двумя формами адсорбированного кислорода с энергиями связи $1s$ электрона $E_{1s} = 528,4 \pm 0,2$ эВ (нуклеофильный, O_n) и $E_{1s} = 530,4 \pm 0,2$ эВ (электрофильный, O_e).

XANES спектр ОК края O_n имеет интенсивный узкий предкраевой пик с $E = 531$ эВ и широкую структуру за порогом в районе 539 эВ, что практически совпадает с ОК XANES спектром оксида Ag_2O . ОК спектр поглощения O_e не имеет предкраевой особенности и не наблюдается также особенностей за краем поглощения. Природа O_e до сих пор является предметом острых дискуссий.

В данной работе рассматриваются модели кислородных форм, обладающие спектральными особенностями, характерными для O_n и O_e . Моделирование O_e проводится с помощью спиновой поляризации, приводящей к пространственному разделению электронов с антипараллельными спинами, что условно можно представить в виде поверхностной пары $(Ag^+)^\uparrow \cdots (O^-)^\downarrow$.

С помощью теории функционала плотности на малых кластерах моделировались состояния: O_n и O_e . Расчёты спектров вблизи ОК-края поглощения (XANES) для двух типов кислорода, выполненные методом многократного рассеяния [1], качественно согласуются с экспериментальными спектрами нуклеофильного и электрофильного формами кислорода [2]. Анализ состояний с открытой оболочкой в базисе парных орбиталей [3] позволяет оценить вклады ионных и ковалентных состояний.

[1]. S.Ph. Ruzankin, Computational Materials Science **36** (2006) 184.

[2]. S.Ph. Ruzankin, I. Zilberberg, G.M. Zhidomirov, Res. Chem. Intermed., **30** (2004) 75.

[3]. I. Zilberberg, S.Ph. Ruzankin, Chemical Physics Letters **394** (2004) 165.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 2

**ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И
ЭЛЕКТРОННАЯ ОЖЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ.
ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ**

МЕТОДОЛОГИЯ АНАЛИЗА СОСТАВА И СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ: ТЕРМОДИНАМИКА И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Гончаров О.Ю., Канунникова О.М.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Кирова, 132, olaf@nm.ru

Для образования сложной многокомпонентной системы, содержащей нестехиометрические соединения и твердые растворы достаточно пары химических элементов. Теоретическое предсказание методами термодинамики и экспериментальная оценка химического состава такой системы является сложной задачей, не всегда приводящей к однозначным результатам. Наша цель заключалась в разработке методологии анализа многокомпонентных систем, сочетающей и взаимодополняющей сильные стороны методов термодинамики и рентгеноэлектронной спектроскопии.

Новая методология применена для исследования тонких поверхностных слоев окалин на сплавах FeCr [1] и неравновесных сплавах FeCrB [2], для анализа содержания стабильных и метастабильных структурных единиц в свинцово-силикатных стеклах [3] и для других систем.

Для окалин разработана оригинальная методика послойного анализа многослойных структур, которая позволила определить набор соединений, образующихся в различных слоях по глубине окалин при высокотемпературном окислении сплавов FeCr и Fe₇₀Cr₁₅B₁₅ на воздухе. Кроме того, удалось установить кинетические особенности процессов окисления и механизм взаимодействия сплавов FeCr с воздухом.

Для свинцово-силикатных стекол разработана модель твердого раствора стабильных и метастабильных соединений, определены величины термодинамических свойств и состав метастабильных структурных единиц образующихся в стеклах.

- [1]. Гончаров О.Ю., Канунникова О.М. Термодинамика высокотемпературного взаимодействия воздуха со сплавами Fe-Cr // Проблемы термодинамики поверхностных явлений и адсорбции/ Под ред. О.И. Койфмана, М.В. Улитина. Иваново: Иван. гос. хим.-технол. ун-т., 2009. С.187-204.
- [2]. Гончаров О.Ю., Канунникова О.М., Шаков А.А., Ломаева С.Ф. //ФММ. 2001. Т.91. N6. С.64-71.
- [3]. Гончаров О.Ю., Канунникова О.М. // Журнал физической химии. 2009. Т.83, N12, С.2205-2210.

**РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ И МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ
В НАНОРЕАКТОРАХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦ**

**Кодолов В.И.^{1,2}, Шабанова И.Н.^{1,3}, Благодатских И.И.^{1,2},
Тринеева В.В.^{1,4}, Терехова Н.С.^{1,3}, Ляхович А.М.³**

¹Научно-образовательный центр химической физики и мезоскопии УдНЦ
УрО РАН, Ижевск

²ГОУ ВПО «Ижевский государственный технический университет», Ижевск

³Учреждение Академии наук «Физико-технический институт УрО РАН»,
Ижевск

⁴Учреждение Академии наук «Институт прикладной механики УрО РАН»,
Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34, e-mail: vera_kodolova@mail.ru

Одним из интенсивно развивающихся направлений нанохимии являются синтезы различных наноструктур в нанореакторах полимерных матриц. В данной работе приведены результаты исследований формирования углеродных металлсодержащих наноструктур в гелях и ксерогелях поливинилового спирта (ПВС) и матрицы, включающей поливиниловый спирт и полиэтиленполиамин (ПЭПА). В качестве участвующей в процессе синтеза металлсодержащей фазы использованы хлориды и оксиды таких 3d металлов, как Ni, Co, Cu. Независимо от способа введения металла в полимерную матрицу ионы металла участвуют в процессах координации с функциональными группами полимерной фазы, образуя «нанореакторное» пространство в полимерной матрице. Образовавшиеся ксерогели представляют собой микропленки, в некоторых случаях по толщине приближающиеся к многослойным нанопленкам. Исследование образованных пленок методами атомной силовой микроскопии и просвечивающей оптической микроскопии позволяет определить размеры и энергетические параметры нанореакторов. После термохимической обработки ксерогелей, содержащих нанореакторы, в узких температурных интервалах (не превышающих 400 °С) получены нанопродукты, которые исследованы с помощью рентгеноэлектронной спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и электронной дифракции. В случае использования ПВС, согласно рентгеноэлектронным спектрам нанопродукты содержат металл, скоординированный на C=C связи, а в случае участия в синтезе системы ПВС–ПЭПА полученные нанопродукты включают металлы, скоординированные на C=C и =N⁺= группировки. Наличие соединений металлов подтверждается электронной дифракцией. Отмечено, что на форму наноструктур оказывает влияние соотношение компонентов.

РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ SP ЭЛЕМЕНТОВ II И III ПЕРИОДОВ НА АКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

Теребова Н.С.¹, Шабанова И.Н.¹, Кодолов В.И.²

¹Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, 42600,
Кирова, 132, xps@fti.udm.ru

²Научно-образовательный центр химической физики
и мезоскопии УдНЦ УрО РАН, Ижевск

Основываясь на результатах рентгеноэлектронной спектроскопии и электронной микроскопии установлено, что относительное содержание С-С и Ме-С связей, тип гибридизации валентных s, p электронов атомов углерода позволяет осуществлять контроль за формированием и ростом наноструктур. Развита модель, описывающая электронную структуру систем Ме-Х. Следовательно, проведенные рентгеноэлектронные исследования показали, что формирование наноструктур определенной формы основано на межатомном взаимодействии исходных компонентов, образовании гибридизированной химической связи d электронов атомов металла с p электронами атомов sp элементов. Показано, что с увеличением числа p электронов гибридизация d(Ме) и p(X) электронов уменьшается, растет ионная составляющая в химической связи. С заполнением 3d оболочки металла (Ме) ионная составляющая проявляется меньше, т.к. возрастает вклад p состояний sp элемента (X) у уровня Ферми из-за проявления d-p резонанса.

На основе проведенных исследований установлены закономерности зависимости активности синтеза наноструктур от добавок sp элементов в полимерной матрице: sp элементы N,P,Si, Cl способствуют синтезу, а O замедляет синтез. С изучением активности образования наночастиц открываются возможности направленного синтеза наноструктур в нанореакторах и формирования композитов с желаемым набором свойств.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ АДсорбированных состояний МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ПОТЕНЦИАЛОВ ИСЧЕЗНОВЕНИЯ

Чолач А.Р., Булгаков Н.Н., Тапилин В.М.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 5, cholach@catalysis.ru*

Спектроскопия потенциалов исчезновения основана на последовательном пороговом возбуждении электронов внутренних уровней атомов поверхности твердого тела пучком первичных электронов переменной энергии с локализацией взаимодействующих электронов на вакантных состояниях вблизи уровня Ферми. Показано, что релаксация избыточной энергии первичных электронов после порогового возбуждения может происходить через ионизацию валентных состояний адсорбированных частиц, химически связанных с возбуждаемым атомом поверхности. Такого рода сопряженное электронное возбуждение (СЭВ) проявляется экспериментально как серия спектральных спутников над уровнем Ферми, отражающая структуру валентных состояний поверхностных частиц. Регистрация СЭВ позволяет достоверно установить химическую природу и локализацию произвольных адсорбированных состояний, в том числе – атомов водорода, на многокомпонентной поверхности проводников, полупроводников и диэлектриков по сопоставлению распределения спутников с известной или рассчитанной структурой валентных состояний предполагаемых адсорбированных частиц. Перспективной областью применения эффекта СЭВ является исследование электронных свойств поверхности с особыми свойствами, такими как сверхтвердость, сверхпроводимость, каталитический синергетический эффект и т.п., а также исследование устойчивых интермедиатов поверхностных реакций – при условии времени их жизни, достаточном для регистрации спектра пороговых потенциалов. В частности, при помощи СЭВ показано промежуточное образование NH_x частиц при взаимодействии NO с адсорбированным водородом на поверхности монокристалла $\text{Pt}(100)$. С учетом полученных ранее результатов, это позволило сформулировать новый механизм автоколебаний в реакции $\text{NO} + \text{H}_2$ на платиновых металлах. Методом математического моделирования кинетики реакции в рамках предложенного механизма обнаружена область существования регулярных автоколебаний скорости реакции при значениях констант стадий, близких к экспериментальным.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 3

**РЕНТГЕНОВСКАЯ ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ.
EXAFS И NEXAFS (XANES)**

ДИАГНОСТИКА ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЕВ И ИНТЕРФЕЙСОВ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ: EXAFS СПЕКТРОСКОПИЯ С УГЛОВЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Бабанов Ю.А.¹, Саламатов Ю.А.¹, Мухамеджанов Э.Х.², Устинов В.В.¹

¹*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, babanov@imp.uran.ru*

²*Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва*

Сегодня исследования свойств наноразмерных гетеросистем на основе ферромагнитных металлов, разделённых тонким слоем немагнитного металла, полупроводника или диэлектрика, получили большое развитие, так как такие структуры стали широко использоваться в спинтронике. Чтобы прояснить механизм межслоевого обменного взаимодействия необходимо иметь информацию о расположении атомов как в слое, так и в межслоевой области. Однако с помощью традиционного метода рентгеновского поглощения XAFS сделать это практически невозможно, потому что получаемая информация усреднена по толщине всей пленки.

В настоящем докладе сообщается о разработке новых экспериментальных методик анализа угловой зависимости ближней и далекой структуры рентгеновских спектров поглощения (XANES и EXAFS). Получено интегральное уравнение, описывающее связь между рентгеновскими спектрами исследуемого элемента и селективным концентрационным профилем, а также XAFS спектром, зависящим от глубины исследуемого слоя. При решении обратной некорректной задачи использовался метод регуляризации Тихонова.

Эффективность предложенного метода была тестирована в ходе численных экспериментов для модели трехслойной структуры ОЦК типа: Cr/Fe/Cr. Показана возможность определения концентрационного профиля Fe и Cr по глубине с точностью 0,1-0,2 нм, а также определение парциальных межатомных расстояний (например, Fe-Fe и Fe-Cr) в чистом слое и в интерфейсе с точностью 0,001 нм. На образцах-трехслойках проведены эксперименты по угловой зависимости рентгеновской флуоресценции на краях поглощения элементов Fe и Cr на станции «Прецизионная рентгеновская оптика» Курчатовского источника синхротронного излучения.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Президиума РАН № 27.

АТТЕСТАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ 3d-ЭЛЕМЕНТОВ, КАПСУЛИРОВАННЫХ В УГЛЕРОДНУЮ ОБОЛОЧКУ, МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Галахов В.Р.¹, Шкварин А.С.¹, Семенова А.С.², Уймин Н.А.¹,
Ермаков А.Е.¹, Курмаев Э.З.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург,
ул. Софьи Ковалевской, 18, 62004, galakhov@ifmlrs.uran.ru
²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

Наночастицы 3d-металлов, капсулированные в углеродную оболочку, обладают громадным потенциалом для использования в медицине, биологии и химии катализа. Наночастицы металла Fe и Ni, капсулированные в углерод (Fe@C и Ni@C), получены бесконтактной левитационной плавкой в высокочастотном поле и испарением расплавленного металла в потоке инертного газа, содержащего углеводороды. Для диагностики капсулированных в углеродную оболочку наночастиц Fe@C и Ni@C и определения эффективности защитного углеродного слоя, предохраняющего наночастицы металла от окисления, мы исследовали рентгеновские спектры фотоэмиссии валентной полосы и внутренних C 1s-, Fe 2p-, Ni 2p-уровней и спектры C 1s-, Fe 2p- и Ni 2p-поглощения, измеренные на Российско-Германской линии накопительного кольца BESSY. Рентгеновские фотоэлектронные и абсорбционные спектры наночастиц Fe@C и Ni@C подобны спектрам металлических железа и никеля. Это означает, что наночастицы Fe и Ni находятся в металлическом состоянии, и углеродная оболочка препятствует окислению переходных элементов.

Работа поддержана проектами ОФН РАН по программе «Физика новых материалов» (проект 22), двусторонним проектом «Российско-Германская лаборатория на BESSY» и Советом по Грантам Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (грант НШ-3572.2010.20).

СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ ПО ДАННЫМ EXAFS ДВУМЕРНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ХАЛЬКОГЕНАМИ

Кочубей Д.И.¹, Кочубей В.И.², Бабенко В.П.¹, Зайковский В.И.¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова, Новосибирск, kochubey@catalysis.ru

²Саратовский государственный университет, Саратов

Строению наночастиц сейчас уделяется большое внимание. Наибольший интерес представляют квазидвумерные наночастицы. Такие частицы в силу того, что для них соотношение поверхность/объем является максимальным, будут иметь лабильную структуру, отличающуюся от структуры массивного соединения. Кроме того, структура таких наночастиц может варьироваться при различных способах их стабилизации. Помимо того, двумерность частицы предполагает анизотропию ее физических и химических свойств, которые могут варьироваться варьированием морфологии частицы. В данной работе рассматриваются три системы двумерных стабилизированных халькогенами наночастиц: MoS₂, CdS и металлический рутений. Структура этих частиц, а также влияние на их структуру адсорбции изучены методом EXAFS.

Синтез MoS₂ и CdS проводился путем реакции элементарной серы с карбонилем молибдена(0) и пивалатом кадмия(II), соответственно, в растворе ортоксилола при повышенных температурах. Размеры и анизотропия частиц устанавливались с помощью электронной микроскопии. Анизотропные наночастицы металлического рутения получались путем термического разложения додекарбонила рутения(0) в ортоксилоле в присутствии элементарного селена.

Стабилизация рутения селеном приводит к пассивации базальной грани селеном получению наночастиц с развитыми боковыми гранями. Соотношение размеров базальной грани и боковых граней определялось методом EXAFS. Состояние рутения и структура меняются при адсорбции кислорода. Наночастицы MoS₂ переходят из кристаллической модификации 2H массивного сульфида в 1T модификацию с октаэдрическим окружением молибдена. Симметрия окружения MoS₂ и соответственно его физические свойства меняются при адсорбции водорода. Двумерные частицы CdS сравнивались с наночастицами CdS стабилизированными в полимерной матрице. Различие в стабилизирующих агентах (сера для двумерных частиц CdS и OH группы для CdS в полимере) приводят к различию их оптических свойств.

Работа частично финансировалась грантом РФФИ 09-03-00369.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ
ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБРАЗЦОВ ФТАЛОЦИАНИНА НИКЕЛЯ
ДОПИРОВАННЫХ ЩЕЛОЧНЫМИ МЕТАЛЛАМИ МЕТОДОМ
РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

Манукян А.С.¹, Мирзаханян А.А.¹, Шароян Э.Г.¹, Гуда А.А.², Солдатов А.В.²,
Храпко В.В.², Авакян Л.А.², Бугаев Л.А.²

¹*Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения*

²*Физический факультет Южного федерального университета,
344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, Россия, bugaev@sfedu.ru*

Получение высокотемпературных ферромагнитных соединений является актуальной задачей в области магнетизма молекулярных и органических материалов. Разработан метод синтеза комнатно-температурных ферромагнитных образцов фталоцианина никеля (NiPc), допированных атомами калия и рубидия. Эти материалы устойчивы на воздухе и имеют $T_{\text{Кюри}} > 300$ °С. Образцы сохраняют оптические свойства фталоцианиновых пигментов, а в спектрах магнитного резонанса этих материалов регистрируется интенсивная линия поглощения ФМР с $g \approx 2,23$ и $\Delta H \approx 8000$ Ое. Для выяснения природы ферромагнетизма в этих соединениях и для определения локального окружения ионов никеля, измерены рентгеновские К-спектры поглощения:

- а) исходного диамагнитного фталоцианина никеля,
- б) ферромагнитного фталоцианина никеля допированного Rb и K (Rb-NiPc, K-NiPc) и
- в) ферромагнитных наночастиц Ni в углеродной матрице (нано-Ni/C).

С помощью Фурье-анализа и прямого расчета спектров, выполненных на основе различных моделей ближнего окружения атомов Ni, Rb в изучаемых материалах, установлены местоположения допированных атомов в исходной матрице, а также характер локальных структурных искажений в координационном окружении атома металла.

МИКРОСТРУКТУРА «КАЛИБРОВАННЫХ» НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА ВНУТРИ ПОЛОСТЕЙ КУКУРБИТ[7]УРИЛА ПО Au EXAFS СПЕКТРАМ

Эренбург С.Б.¹, Трубина С.В.¹, Коваленко Е.А.¹, Герасько О.А.¹,
Никитенко С.Г.²

¹ИHX СО РАН, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 3, simon@niic.nsc.ru
²DUBBLE-CRG & ESRF, Гренобль, Франция

При переходе от массивных металлов к частицам с размером 10 нм и менее последние проявляют новые или существенно изменённые свойства, позволяющие создавать принципиально новые продукты и нанотехнологии. Для получения однородных по размерам и форме наночастиц уникальную возможность представляет семейство органических молекул состава $C_{6n}H_{6n}N_{4n}O_{2n}$ (CB[n]) с $n = 5 - 10$. Молекулы имеют макроциклическую структуру и открытую гидрофобную внутримолекулярную полость, при определенных условиях включающую в себя металлические нанокластеры.

В водно/этанольном растворе путем химического восстановления золото-хлористоводородной кислоты ($HAuCl_4$) концентрацией 10^{-3} моль/л или 10^{-4} моль/л боргидридом натрия ($NaBH_4$) проведен синтез соединений включения золота во внутримолекулярные полости CB[7]. Для синтезированных соединений включения Au@CB[7] измерены EXAFS- и XANES- спектры в районе L_{III} -краев поглощения Au. Спектры получены с использованием СИ накопителя ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН (Новосибирск) и канала DUBBLE центра ESRF (Гренобль). Полученный материал обработан с использованием программных пакетов DL_EXCURV 98, FEFF8.

Установлено, что Au в соединении Au@CB[7], полученном при концентрации $HAuCl_4 \sim 10^{-4}$ моль/л, имеет несколько меньшие (на $\sim 0.02-0.03 \text{ \AA}$) межатомные расстояния и заметно 'большие (в три раза при 12 K) значения фактора Дебая-Валлера по сравнению с массивным Au, а также координационные числа $N_{Au-Au} \leq 7$. Однако, электронное состояние такого золота неотличимо от металлического. Следует отметить, что для высокодисперсных образцов, полученных другими методами на различных носителях и содержащих несколько более крупные частицы золота, ранее установлены аналогичные изменения микроструктуры [1].

[1]. S. Erenburg, S. Trubina, N. Bausk et al., Journal of Physics: Conf. Ser., 2009, v.190, 012121.

**МНОГОКАНАЛЬНАЯ ВЕРСИЯ МЕТОДА
ПОЛНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЙЯНИЯ:
РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ**

Таранухина А.И., Новакович А.А., Ведринский Р.В.

*НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону 344090, пр. Стачки, 194, E-mail: vedr@jp.rsu.ru*

В докладе представлен многоканальный метод полного многократного рассеяния, позволяющий одновременно учитывать влияние на рентгеновские спектры поглощения одночастичных эффектов многократного межатомного рассеяния фотоэлектронов и электрон-дырочных корреляций на ионизованном атоме (ИА). В данной схеме расчета такой атом рассматривается как источник расходящихся электронных волн с амплитудами, определяемыми матричными элементами перехода. При этом учитывается влияние электрон-дырочных корреляций как на амплитуды первичных волн, выходящих из ИА, так и на амплитуды рассеяния на этом атоме отраженных от окружения волн. На амплитуды отражения от окружения, определяемые эффектами многократного рассеяния (зонными эффектами), корреляции не сказываются. Практическая реализация общей концепции многоканального подхода основана на методе сильной связи каналов и методе полного многократного рассеяния в формализме функции Грина. Получена связь между одноканальной и многоканальной функциями Грина для многоатомной системы, потенциал которой в общем случае преобразуется по неприводимому представлению точечной группы симметрии C_1 . Получена система связанных интегродифференциальных уравнений для состояний рассеяния фотоэлектрона с учетом электрон-дырочных корреляций и спин-орбитального взаимодействия и предложена методика численного решения этой системы. Разработан алгоритм расчета многоканальной t -матрицы рассеяния на ИА, основанный на решении указанной системы уравнений. Разработана программа для расчета спектров поглощения методом многоканального многократного рассеяния и интерфейс между новым кодом и программой XKDQ, ранее разработанной Новаковичем и реализующей применение традиционного метода полного многократного рассеяния к решению спектроскопических задач. Рассчитаны и проанализированы $L_{2,3}$ -спектры поглощения высоко-симметричных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 2.1.1/3690).

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ НАНОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ УЛЬТРАМЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Турищев С.Ю.¹, Терехов В.А.¹, Кашкаров В.М.¹, Леньшин А.С.¹,
Панков К.Н.¹, Ховив Д.А.¹, Парина Е.В.¹, Домашевская Э.П.¹,
Скрышевский В.А.², Гаврильченко И.В.²

¹Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru

²Киевский национальный университет, Киев, Украина

Представлены результаты исследований нанопористого кремния (НПК) проведенные в лабораторных условиях и на синхротронных центрах SRC (Стоутон, США) и BESSY II (Берлин, Германия) методами ультрамягкой рентгеновской спектроскопии (XANES и USXES, $L_{2,3}$ спектры кремния).

Определены фазы, составляющие поверхностных слой НПК полученного на подложках n-типа: кристаллический кремний, разупорядоченный кремний, аморфный кремний, диоксид и субоксид кремния. Установлено образование α -Si и субоксида кремния на поверхности нанокристаллов Si. Экспериментально показано увеличение ширины запрещенной зоны НПК вследствие квантово-размерного эффекта до 1.4 эВ. Предложена модель фотолюминесценции НПК. Показана кинетика естественного старения в зависимости от легирующих примесей подложки и эволюция фазового состава.

Для подложек p-типа толщина поверхностного оксидного слоя превосходит толщину естественного окисла пластин кремния. Существенное отличие относительной интенсивности и энергетического положения двух главных максимумов Si $L_{2,3}$ XANES (a_1 и t_2) поверхностного окисла НПК от соответствующих параметров термического окисла SiO_2 и α -кварца свидетельствует о значительном искажении кремний–кислородного тетраэдра, приводящем к растяжению связей Si–O и увеличению углов связей Si–O–Si. Данные метода USXES показывают достаточно сильную аморфизацию поверхностных слоев наряду с их окислением. Наряду с этим обнаруживается разупорядоченный кремний и субоксид SiO_x .

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАМЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ СТРУКТУРАМИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИЯХ XANES

Терехов В.А., Турищев С.Ю., Домашевская Э.П.

*Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru*

В настоящее время синхротронное излучение (СИ) является одним из мощнейших инструментов исследования вещества в конденсированном состоянии. Диапазон длин волн этого излучения простирается на 20 порядков величины от 10^3 до 10^{-18} м. Центр этого диапазона занимают нанометровые волны электромагнитного излучения, относящиеся к мягкой и ультрамягкой рентгеновской области длин волн. Именно поэтому в последние десятилетия нанометровый диапазон СИ стал интенсивно использоваться для исследования конденсированного состояния вещества, особенно в виде наноматериалов и наноструктур.

Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия благодаря работам А.П. Лукирского и его учеников широко используется для исследования электронного строения и локальной атомной структуры твердых тел, их поверхности переходных слоев и тонких пленок. В последние годы наибольший интерес вызывают XANES исследования наноматериалов и наноструктур, наиболее перспективных для применения в электронике, машиностроении, технике двойного назначения. В этих исследованиях существенную роль играет близость длин волн ультрамягкого диапазона и характерного размера структурных неоднородностей в наноматериалах. В результате следует ожидать интерференционных и дифракционных эффектов на неоднородностях наноструктур при исследованиях методами ультрамягкой рентгеновской спектроскопии с использованием СИ.

В работе на примере слоистых структур, сверхрешеток и пленок с нанокристаллами показаны проявления обнаруженных особенностей взаимодействия синхротронного излучения нанометрового диапазона с наноструктурированными материалами при получении спектров XANES по методике регистрации квантового выхода рентгеновского фотоэффекта.

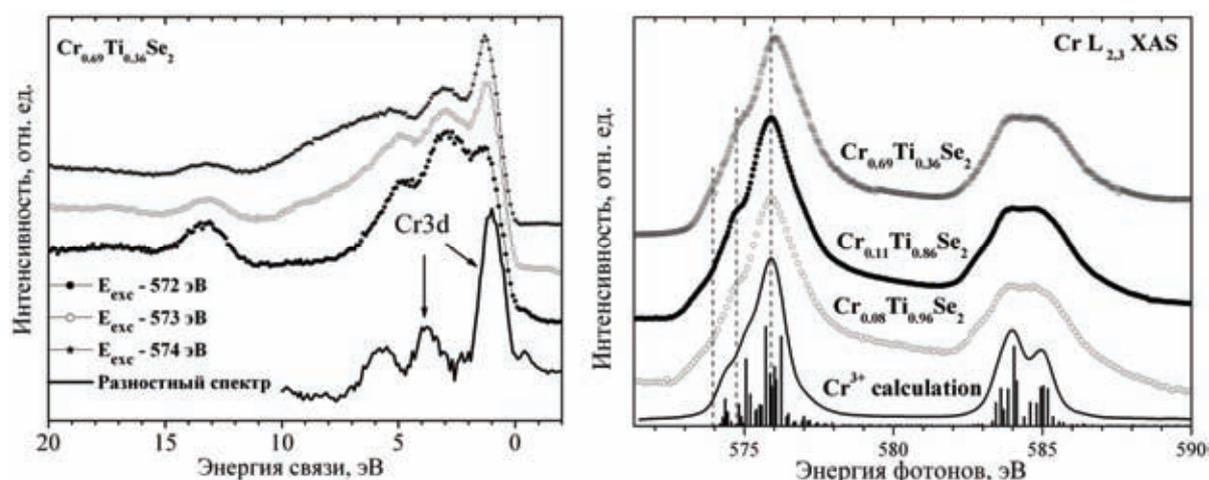
Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ МЕТОДАМИ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИИ И АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Шкварин А.С., Ярмошенко Ю.М., Скориков Н.А., Меренцов А.И., Титов А.Н.

*Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской, 18, shkvarin@ifmlrs.uran.ru*

Изучены XPS внутренних уровней, резонансные спектры валентных полос монокристаллов $1\text{T-Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ ($x=0-0,69$), XAS Ti, Cr. Обнаружено энергетическое расщепление величиной около 1 эВ $\text{Cr}2p_{3/2}$ XPS, причиной которого является обменное магнитное взаимодействие $\text{Cr}3d$ электронов и основной $2p$ вакансии. Показано, что атомы титана и хрома в идентичном октаэдрическом окружении имеют степень окисления +4 и +3. Это подтверждается атомными мультиплетными расчётами XAS Ti, Cr (правая панель рисунка). При измерении резонансных $\text{Cr}2p$ XPS валентных полос хрома ($E_{\text{exc}}=572-574$ эВ) обнаружена мощная узкая $\text{Cr}3d$ полоса в окрестности энергии Ферми (левая панель рисунка). Ионность связи Cr-Se при увеличении содержания хрома увеличивается за счёт сверхстехиометрического титана, действующего как донор. На это указывает возрастание энергии связи $\text{Cr}2p_{3/2}$ линии. Результаты модельных расчётов LDOS хрома согласуются с экспериментальными данными, $\text{Cr}3d$ плотность электронных состояний хрома, замещающего титан в матрице, спин поляризована и имеет полуметаллический характер.



Работа выполнена по проекту РФФИ 09-03-00053, междисциплинарному проекту №36 и двустороннему проекту «Российско-Германская лаборатория на BESSY» №81041.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 4

**ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ,
КАТАЛИЗАТОРОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМНЫХ СТРУКТУР, СФОРМИРОВАННЫХ ХЛОРОМ НА ПОВЕРХНОСТИ Au(111)

Андрюшечкин Б.В.¹, Черкез В.В.^{1,2}, Киррен Б.², Дидье К.²,
Мальте Д.², Ельцов К.Н.¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва,
ул. Вавилова, 38, andrush@kapella.gpi.ru

²International Joint Laboratory IMTAS, Institut Jean Lamour,
Universite H. Poincaré, Nancy, France

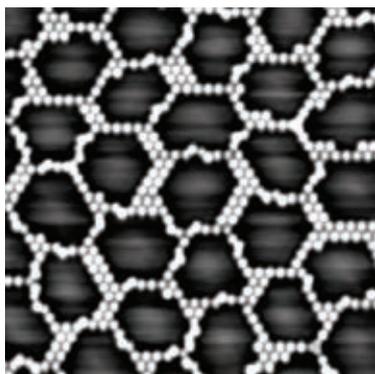


Рис. 1. СТМ-изображение Cl/Au(111), 0.09 МС, 5К.

Адсорбция хлора на поверхность Au(111) проводилась при температуре 300 К. Все СТМ-измерения сделаны при 5 К. Установлено, что при адсорбции молекулы хлора диссоциируют и наблюдаются на поверхности в виде отдельных атомов. При степени покрытия около 0.09 монослоя (МС) реконструкция $22\times\sqrt{3}$ исчезает и на поверхности возникает система упорядоченных колец из атомов хлора (рис. 1).

Для поверхностных электронов, имеющих на поверхности Au(111), система упорядоченных колец может быть рассмотрена как система связанных квантовых ям, внутри которых возникают локализованные электронные состояния, энергия которых связана с геометрией колец. На рис. 2 показаны СТМ-изображения в виде карт спектроскопии (дифференциальной проводимости) $dI_t/dU_t(U_t, x, y)$, которые наглядно демонстрируют возможность регистрации различных мод такого «атомного резонатора».

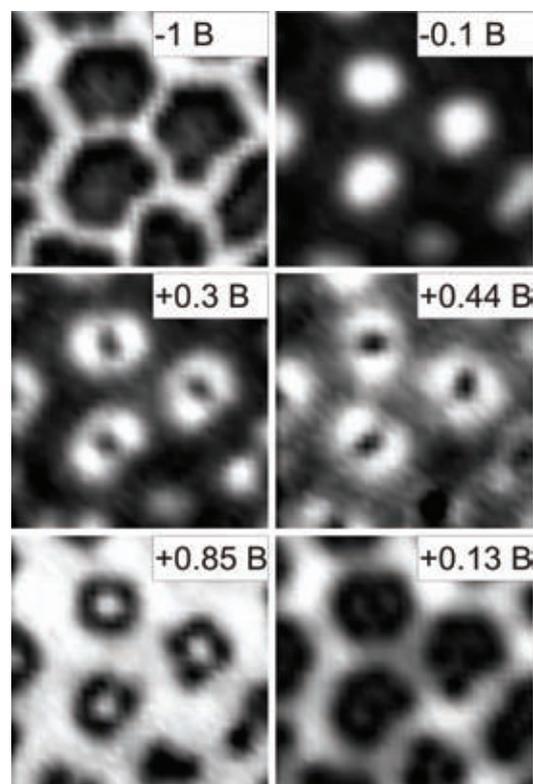


Рис. 2. Карты $dI_t/dU_t(x, y)$, записанные при различных напряжениях смещения U_t .

ФОТОЭМИССИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Боронин А.И.^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
пр. Лаврентьева, 5, E-mail: boronin@catalysis.ru

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Исследование гетерогенных катализаторов представляет необходимый этап в установлении механизмов протекания каталитических реакций. Фотоэмиссионные методы позволяют детально охарактеризовать электронное состояние поверхности и, в связи с этим, являются незаменимыми для изучения гетерогенных катализаторов. Наиболее мощным и информативным фотоэмиссионным методом установления химического состава и электронной структуры поверхности катализаторов является метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Применение РФЭС для гетерогенных катализаторов, в которых компоненты катализатора, как правило, обладают как диэлектрическими (носитель), так и металлическими (активный компонент) свойствами, характеризуется рядом особенностей, которые не могут быть описаны в рамках классических приближений и подходов. В данной работе на примере катализаторов Pd(Pt,Cu,Au,Ag)/CeO₂(Ce_{1-x}Zr_xO₂, Al₂O₃) анализируются экспериментальные рентгеновские фотоэлектронные спектры основных уровней и обсуждаются особенности их отклонений от «нормальных» спектров за счет морфологического и размерного факторов, контактных взаимодействий и учетом конечных состояний. На примере ряда систем показано, что для точной интерпретации фотоэлектронных спектров и определения валентного состояния элементов поверхности катализаторов зачастую необходимо совместное применение метода РФЭС и структурных методов, таких как EXAFS, ПЭМВР, РФА и др., методов колебательной спектроскопии, а также расчетных квантовохимических методов.

В работе также рассматриваются преимущества и недостатки применения РФЭС для исследования катализаторов в режиме *ex situ* и *in situ*.

Работа поддержана интеграционным проектом СО РАН (грант №112).

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ТОНКИХ НАНОКОМПЗИТНЫХ ПЛЕНОК ZnS МЕТОДОМ EXAFS-СПЕКТРОСКОПИИ

Валеев Р.Г.^{1,2}, Бельтюков А.Н.^{1,2}, Романов Э.А.²,
Деев А.Н.¹, Кривенцов В.В.³

¹Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск

E-mail: valeev@jasas.fti.udm.ru

²Удмуртский госуниверситет, Ижевск

³Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Научный интерес к нанокристаллическому состоянию конденсированных сред связан, прежде всего, с ожиданием различных размерных эффектов, проявляющихся в свойствах наночастиц и нанокристаллитов, размеры которых соизмеримы или меньше, чем характерный корреляционный масштаб физического явления или характерная длина, используемая в теоретическом описании свойств или процессов. Прикладной интерес к наноматериалам обусловлен значительной модификацией и даже принципиальным изменением свойств известных материалов при переходе от кристаллического к нанокристаллическому состоянию, что используется при создании новых материалов и изделий из структурных элементов нанометрового размера [1].

Тонкие полупроводниковые пленки сульфида цинка получены термическим испарением материала в сверхвысоком вакууме на подложки из ситалла, кремния, кварца. Диапазон температур подложек - от -150 до 0 °С. Химический состав полученных пленок был исследован методом ВИМС, структурное состояние пленок определялось методами ПЭМ, АСМ, и рентгеновской дифракции.

Локальная атомная структура полученных пленок исследовалась методом EXAFS-спектроскопии. Определены длины химической связи, координационные числа, а также объемные доли кристаллической и аморфной фаз в полученных пленках [2].

Работа выполнена в рамках проекта Программы Президиума РАН по направлению № 20, Инновационного проекта молодых ученых УрО РАН.

[1]. M.C. Roco. Nanoparticles and nanotechnology research. // J. Nanopart. Res. 1999. V.1. Pp.1-6.

[2]. R.G. Valeev, A.N. Deev, Yu.V. Ruts // Surface and interfaces analysis. 2004, V.36., p.995.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ *IN SITU* ИССЛЕДОВАНИЙ МЕХАНИЗМОВ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Каичев В.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
E-mail: vvk@catalysis.ru

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на протяжении многих лет активно применяется для определения химического состава и электронного строения атомов, молекул и твердых тел. Наиболее широко данный метод используют в материаловедении, микроэлектронике и катализе. В гетерогенном катализе традиционно РФЭС применяют для охарактеризации катализаторов в целях выявления природы активного компонента. Измерения проводят, как правило, в режиме *ex situ* в условиях СВВ. В тоже время, высокая поверхностная чувствительность метода позволяет определять не только химический состав и строение поверхностного слоя катализаторов, но и определять природу и концентрацию адсорбированных частиц. Более того, проведение РФЭС измерений *in situ*, т.е. непосредственно в ходе протекания каталитического процесса при синхронном детектировании продуктов в газовой фазе открывает новые возможности для исследования механизмов гетерогенных каталитических реакций [1-4]. В этом случае, в рамках одного эксперимента удастся определить состояние катализатора, природу и концентрацию ключевых интермедиатов, а также степень конверсии реагентов и выход основных продуктов изучаемой реакции.

В данной работе рассмотрены особенности записи рентгеновских фотоэлектронных спектров при повышенных давлениях (до 10 мбар). Приводятся примеры *in situ* исследований адсорбции CO, разложения и окисления метанола на Pd, а также автоколебаний в реакции окисления пропана на Ni.

- [1]. Kaichev V.V., Prosvirin I.P., Bukhtiyarov V.I., Unterhalt H., Rupprechter G., Freund H.-J. // J. Phys. Chem. B. 2003. Vol. 107. P. 3522-3527.
- [2]. Kaichev V.V., Morkel M., Unterhalt H., Prosvirin I.P., Bukhtiyarov V.I., Rupprechter G., Freund H.-J. // Surf. Sci. 2004. Vol. 566-568. P. 1024-1029.
- [3]. Bukhtiyarov V.I., Nizovskii A.I., Bluhm H., Hävecker M., Kleimenov E., Knop-Gericke A., Schlögl R. // J. Catal. 2006. Vol. 238. P. 260-269.
- [4]. Knop-Gericke A., Kleimenov E., Hävecker M., Blume R., Teschner D., Zafeiratos S., Schlögl R., Bukhtiyarov V.I., Kaichev V.V., Prosvirin I.P., Nizovskii A.I., Bluhm H., Barinov A., Dudin P., Kiskinova M. // Adv. Catal. 2009. Vol. 52. P. 213-272.

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ МЕТОДОМ РФЭС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОНОХРОМАТИЗИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ $Ag\ L\alpha$

Калинкин А.В.¹, Смирнов М.Ю.¹, Низовский А.И.¹, Бельская О.Б.²,
Пашис А.В.¹, Сорокин А.М.¹, Просвирин И.П.¹, Бухтияров В.И.¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
пр. Акад. Лаврентьева, 5, 630090, Новосибирск, avkalinkin@mail.ru
²Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, Омск

Известно, что метод РФЭС весьма информативен при исследовании состояния поверхности твёрдого тела. К сожалению, его возможности при использовании стандартного излучения $Al\ K\alpha$ и $Mg\ K\alpha$ в некоторых случаях сильно ограничены из-за взаимного наложения линий в спектре. Классическим примером таких систем являются катализаторы, содержащие платину и оксид алюминия. В этом случае линия $Pt\ 4f$ маскируется линией $Al\ 2p$ носителя, что сильно затрудняет или делает невозможным детальное исследование электронного состояния платины. Как оказалось, эта проблема может быть решена с помощью фотоэлектронного спектрометра SPECS, обладающего источником более жёсткого излучения $Ag\ L\alpha$ с энергией 2984,3 эВ. Применение такого излучения обеспечивает выход фотоэлектронов из глубоко лежащих уровней – $Al\ 1s$ и $Pt\ 3d_{5/2}$. Эти фотоэлектронные линии не перекрываются, обладают высокой интенсивностью и малой энергетической шириной, что делает их перспективными для исследования катализаторов Pt/Al_2O_3 с низким содержанием активного компонента.

Для проведения РФЭС анализа образцов с использованием излучения $Ag\ L\alpha$ впервые был записан спектр района $Pt\ 3d_{5/2}$ для металлической платины и ряда её индивидуальных соединений, отличающихся степенью окисления Pt. Также впервые с помощью ряда модельных образцов проведено измерение отношения экспериментальных сечений линий $Pt\ 3d_{5/2}/Al\ 1s$. Полученные данные могут использоваться в качестве табличных при интерпретации данных для катализаторов Pt/Al_2O_3 .

В работе приводятся конкретные примеры применения данного инструмента при исследовании различных каталитических объектов с содержанием платины не выше 1,5%(вес). Обсуждаются перспективы использования метода РФЭС на базе излучения $Ag\ L\alpha$ для некоторых многокомпонентных катализаторов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 10-03-00596.

**ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АНОДНОГО ОКИСЛЕНИЯ InAs
В ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
МЕТОДА РФЭС IN-SITU**

Кеслер В.Г.

*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, kesler@isp.nsc.ru*

Методом РФЭС in-situ выполнены исследования кинетики окисления InAs в плазме тлеющего разряда в атмосфере газов O_2 , CO_2 и смеси газов O_2 и NF_3 . Изучен химический состав окисных плёнок, сформированных в режимах нормального и тёмного тлеющего разряда. Установлено, что в режиме нормального тлеющего разряда в кислородсодержащей плазме на поверхности InAs формируются двухслойные окисные пленки. Нижний слой толщиной 3.0 - 3.5 нм, состоящий из окислов мышьяка и индия в соотношении 2.5 : 1, формируется в первые минуты окисления, и в дальнейшем его химический состав и толщина практически не изменяются. Отношение окисных фаз мышьяка As_2O_3 / As_2O_5 в окисле составляет величину ~ 0.5 . Верхний слой является окислом алюминия (материала катода) и его толщина растёт квазилинейно со временем обработки со скоростью 0.03 нм/мин. Растущая пленка оксида алюминия является барьером для диффузии кислорода к поверхности InAs, что препятствует дальнейшему окислению полупроводника и позволяет прецизионно формировать сверхтонкие окисные плёнки на его поверхности. На начальных стадиях роста в режиме тёмного разряда в атмосфере газов O_2 и CO_2 толщина окисной плёнки описывается логарифмической зависимостью от времени окисления, переходящей в линейную при значительном увеличении продолжительности окисления. При малых токах разряда и при повышенных давлениях газа формирование сплошного барьерного окисного слоя алюминия затруднено и осуществляется режим роста окисной плёнки тройного состава. Добавление в кислородную плазму газа NF_3 приводит к значительному увеличению скорости роста окисной плёнки (до 35 раз) и сильному смещению синтеза в сторону образования фторидов индия и мышьяка. Проведено сравнение с результатами послойного анализа анодных окисных плёнок, полученных жидкостным анодированием.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 08-07-00230.

ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ ПОЛНОГО ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНА НА АЛЮМОПЛАТИНОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДАМИ *IN SITU* РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Просвирин И.П., Бекк И.Э., Бухтияров В.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова, СО РАН, Новосибирск
prosvirin@catalysis.ru

Методом *in situ* РФЭС и масс-спектрометрии проведено исследование реакции полного окисления метана на нанесенных алюмоплатиновых катализаторах в зависимости от начального состояния активного компонента. Был приготовлен ряд образцов высокодисперсных 1%Pt/Al₂O₃ катализаторов с моноразмерными частицами платины в диапазоне от 1 до 7 нм [1], с ярко выраженным корочковым эффектом, при котором практически вся нанесенная платина присутствует на поверхности гранулы катализатора (Pt/Al=0.1-0.7). Размер частиц, дисперсность и состояние платины в образцах были охарактеризованы методами ПЭМ, EXAFS и хемосорбцией по водороду.

In situ эксперименты проводились при соотношении реагентов O₂/CH₄ – 10:1 и 2:1 и температуре 430 °С. Для активации поверхности образцы, содержащие окисленную платину, предварительно обрабатывались в кислороде (T=430 °С, t=1 час, P(O₂)=0.04 мбар), а восстановленную платину - в водороде (T=300 °С, t=1 час, P(H₂)=0.01 мбар). Для корректной идентификации химического состояния платины непосредственно в ходе каталитической реакции, предварительно был исследован ряд реперных соединений с различными степенями окисления платины. В качестве образцов сравнения в *in situ* экспериментах использовалась платиновая фольга и носитель – оксид алюминия. Анализ полученной спектральной информации показал, что независимо от начального химического состояния активного компонента в образцах – Pt⁴⁺, Pt²⁺ и/или Pt⁰, в условиях реакции формируется новая форма платины, проявляющаяся в спектрах РФЭС в виде пика Pt4f_{7/2} с E_{св}=72.0±0.1 эВ, который можно приписать состоянию Pt^{δ+}, представляющему собой частично окисленную высокодисперсную платину, определяющую активность катализатора в полном окислении метана.

[1]. I.E. Beck, V.I. Bukhtiyarov, I.Yu. Pakharukov, V.I. Zaikovsky, V.V. Kriventsov, V.N. Parmon. *J. Catal.* 268 (2009) 60.

ОКСИДНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ НИОБИЯ (110): РФЭС-, РФД- И СТМ-ИССЛЕДОВАНИЕ

Разинкин А.С., Кузнецов М.В.

*Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург,
Первомайская, 91, andrey@razinkin.ru*

Проведен цикл экспериментальных и теоретических исследований чистой поверхности ниобия (110) и оксидных наноструктур, сформированных на Nb(110) в условиях сверхвысокого вакуума (СВВ). Данные структуры образуются за счет сегрегации кислорода из объема кристалла при температурном отжиге в вакууме и представляют собой квазипериодические линейчатые структуры из Nb-атомов в окружении кислорода. В работе реализован комплексный подход, включающий в себя создание и всесторонний анализ поверхности NbO/Nb(110) в едином исследовательском СВВ-комплексе. Реализованы методы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (РФЭС УР), фотоэлектронной дифракции (РФД) и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Квантовохимические расчеты (*VASP*, *SIESTA*) использованы для анализа электронной структуры, атомной релаксации и энергетической целесообразности формирования NbO-наноструктур на Nb(110),(100). Совместно данные методы позволили установить состав поверхностных наноструктур, химическое состояние элементов, локализацию атомов кислорода и ниобия на поверхности, атомную структуру и топологию поверхности NbO/Nb(110). Предложена атомная модель формирования периодических NbO-структур на Nb(110). На поверхности Nb(110) формируется монослой Nb со структурой *гцк*-упаковки NbO(111), далее располагается слой кислорода и затем ряды (цепочки) ниобия вдоль направления [111] *оцк*-Nb. Примерно одна треть кислорода локализована в структуре Nb-рядов, оставшийся кислород располагается между Nb-рядами. Конечная длина NbO-рядов и периодическая структура возникает из-за анизотропных напряжений и структурного несоответствия между двумя решетками: NbO(111)_{*гцк*} и Nb(110)_{*оцк*}. Образовавшиеся на поверхности структуры можно рассматривать как предшественники эпитаксиального роста слоев NbO(111) на поверхности Nb(110).

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ (грант 08-03-00043).

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ОКИСЛЕНИЯ ЧАСТИЦ БЛАГОРОДНОГО МЕТАЛЛА, НАПЫЛЕННЫХ НА ПОВЕРХНОСТЬ ОКСИДНОГО НОСИТЕЛЯ, В РЕАКЦИИ С NO_x

Смирнов М.Ю., Вовк Е.И., Калинин А.В., Пашис А.В., Бухтияров В.И.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
просп. Академика Лаврентьева, 5, E-mail: smirnov@catalysis.ru*

В работе с помощью метода РФЭС исследовано изменение состояния окисления частиц Pt, Rh, Pd и Au, нанесенных на поверхность оксидов (Al₂O₃, SiO₂, TiO₂), которое происходит в результате их взаимодействия со смесью NO и кислорода (NO_x). Образцы, приготовленные в камере электронного спектрометра, представляют собой тонкие пленки оксида толщиной ~ 10 нм, выращенные на поверхности металлической фольги (Ta), с напыленными на поверхность оксида частицами металла. По данным ПЭМ, размер частиц в зависимости от количества напыленного металла составляет от 1 до нескольких десятков нанометров. Обработка образцов в NO_x производилась в камере подготовки спектрометра при давлении ~ 10 мбар в температурном интервале от комнатной до 500°C. В работе было:

- Определено различие в характере взаимодействия частиц металла разной химической природы с NO_x.
- Для Rh и Pt установлено образование двух типов состояний в зависимости от условий – частиц оксида или раствора атомов кислорода в объеме металлических частиц [1]; обнаружена различная реакционная способность растворенного кислорода и частиц оксидов по отношению к водороду.
- Исследовано влияние природы оксидного носителя, размера частиц, температуры на окисление частиц нанесенного металла под действием NO_x.

Полученные результаты могут быть использованы в исследованиях механизма реакций на нанесенных металлических катализаторах при нейтрализации выхлопных автомобильных газов и в других химических процессах, для которых активность катализатора зависит от степени окисления нанесенного металла.

[1]. Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Бухтияров В.И., ЖСХ, 2007, т.48, с. 1120-1127.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты 09-03-91225-СТ_a и 10-03-596.

**СТМ/РФЭС/ОЭС-ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИГОТОВЛЕНИЯ
ОБРАЗЦОВ МОДЕЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ Ag-Cu/ВОПГ**

Сорокин А.М., Демидов Д.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
проспект Академика Лаврентьева, 5, sorokin@catalysis.ru*

Как известно, нанесенные металлические наночастицы проявляют размерно-зависимую каталитическую активность в различных каталитических реакциях. Исследование размерных эффектов в катализе на атомно-молекулярном уровне предполагает использование модельных катализаторов с варьируемым распределением частиц по размеру, стабильных в широком диапазоне температур и давлений. В докладе представлены результаты исследования, посвященного изучению свойств Ag-, Cu- и Au-наночастиц, нанесенных на модифицированную аргоновым травлением поверхность высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ), и факторов, влияющих на эти свойства. Исследование проводилось методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), рентгеновской фотоэлектронной (РФЭС) и Оже-электронной (ОЭС) спектроскопии с рентгеновским возбуждением.

Было показано, что морфологические свойства нанесенных частиц (средний размер, ширина распределения и поверхностная плотность) зависят от ряда факторов: режима предварительного аргонового травления, количества нанесенного металла, скорости и конечной температуры прокаливания. Эти же факторы определяют способность частиц к спеканию. Обнаружен эффект интеркаляции серебра в приповерхностный слой графита с последующим его вытеснением в процессе нагрева. Данный эффект объясняется протеканием двух конкурирующих процессов при нагреве образца – диффузией металла через поры в объем носителя и его вытеснением за счет реструктуризации и «залечивания» дефектов кристаллической решетки. Стабилизация образцов происходит при прокалке в вакууме при $T \geq 300^\circ\text{C}$. Приготовленные таким образом образцы Me/ВОПГ проявляют высокую стабильность к спеканию и, следовательно, могут быть использованы в качестве модельных катализаторов.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансирование данной работы – гранты № 07-03-92117-ГФЕН и 09-03-12272-офи.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ОКИСЛЕННЫХ ЗОЛОТЫХ КЛАСТЕРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ ПОМОЩИ ВЧ-РАЗРЯДА В АТМОСФЕРЕ КИСЛОРОДА

Стадниченко А.И.^{1,2}, Кибис Л.С.¹, Боронин А.И.^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, 630090,
пр. Академика Лаврентьева, 5, stad@catalysis.ru

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

В последние 10-20 лет наибольшее распространение среди металл-оксидных катализаторов окисления получили золотые нанесенные высокодисперсные системы, проявляющие исключительно высокую активность в реакциях окисления при низких температурах. Однако природа активных центров Au/MeOx катализаторов, состав и электронная структура до сих пор остаются предметом дискуссии. Во многом это связано со сложностью применения современных физико-химических методов, включая методы фотоэлектронной спектроскопии, для исследования кислородных форм активного компонента в системах на основе оксидных носителей, линия кислорода которых маскирует полезный сигнал. Исследование активных кислородных форм возможно с применением модельных систем, таких как нанесенные на подложку окисленные кластеры золота.

В данной работе было проведено изучение окисленных наночастиц золота, нанесенных на поверхность танталовой фольги. Для приготовления модельных образцов использовалась методика распыления золотой антенны в атмосфере кислорода, активированного ВЧ-разрядом. При помощи метода РФЭС было показано, что при плазменном напылении действительно образуются окисленные наночастицы с высоким содержанием кислород/золото. Для установления точной электронной структуры данных кластеров в качестве эталонного образца был использован наноструктурированный оксид золота, получаемый на поверхности золотой фольги с применением также ВЧ- разряда в O₂. Применение процедуры разложения линии O1s на индивидуальные компоненты, позволило установить состояния кислорода в составе кластеров, а также их реакционную способность в ходе ступенчатого титрования совмещенного со спектрокинетическими измерениями. Данные эксперименты позволили связать состояния кислорода с его реакционной способностью и установить характер взаимодействия с оксидом углерода.

РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ И АЛЮМИНИИ

Устинов А.Ю., Руднев В.С., Тырина Л.М., Лукиянчук И.В., Васильева М.С.

*Институт химии Дальневосточного отделения РАН,
690022, Владивосток, пр-т 100-летия Владивостока, 159,
E-mail: les@ich.dvo.ru*

Методом рентгеноэлектронной спектроскопии исследованы особенности состава и химического строения широкого ряда металло-оксидных покрытий, сформированных на титане и алюминии методом плазменно-электролитического оксидирования. Разнообразие покрытий регулировалось составом используемых электролитов, параметрами режимов оксидирования и последующей обработки. В зависимости от этого были сформированы покрытия, содержащие в различных сочетаниях Al, Ti, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Pd, Pt, Zr, Ce, C, O, P и др., обладающие спектром самых разных физико-химических свойств, в частности, каталитической активностью в ряде химических реакций, ферромагнетизмом, гидрофобностью [1-3].

Полученные методом РЭС экспериментальные данные позволили установить содержания и состояния элементов в поверхностных слоях покрытий и в более глубоко лежащих, обнажаемых с помощью ионной бомбардировки, особенности их структурной организации, в частности, наличие в ряде покрытий наноразмерных образований. Выявлены некоторые закономерности изменений состава и строения в зависимости от разных факторов, таких как время процессов, температура, особенности химических реакций (физических воздействий) и т.п. Установлены корреляции ряда физико-химических свойств с особенностями состава и строения поверхностных и глубинных слоев.

- [1]. Васильева М.С., Руднев В.С., Устинов А.Ю. и др., Журн. неорг. химии, 2009, т. 54, № 11, с. 1787-1791.
- [2]. Руднев В.С., Устинов А.Ю., Лукиянчук И.В. и др., Докл. Академии наук, 2009, т. 428, № 3, с. 349-352.
- [3]. Руднев В.С., Лысенко А.Е., Устинов А.Ю., Физикохимия поверхности и защита металлов, 2009, т. 45, № 5, с. 546-550.

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-03-95511 и Президиума ДВО РАН.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 5

**ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКИХ УГЛЕРОДНЫХ СЛОЕВ,
СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ ФТОРИДА ГРАФИТА**

**Асанов И.П., Окотруб А.В., Юданов Н.Ф., Булушева Л.Г.,
Гусельников А.В., Бабин К.С.**

Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск

E-mail: asan@che.nsk.su

В работе проведено исследование тонких углеродных слоев, полученных на поверхности диэлектрической подложки из фторида графита состава C_2F_x ($x < 1$). Исходный фторид графита получен фторированием графита парами $B r F_3$ при комнатной температуре. Структурно фторид графита представляет собой интеркалированное соединение фторированного графита II ступени. Каждый слой состоит из атомов углерода в гексагональной упаковке, а с обеих сторон каждого слоя к атомам углерода присоединены атомы фтора. Период идентичности составляет 15.3 Å при интеркаливании молекулами $B r F_3$. В данной работе проведено восстановление поверхности фторграфитовой матрицы при облучении пучком электронов с энергией 500 эВ. При этом происходит удаление атомов фтора и на поверхности матрицы формируется тонкий углеродный слой. Проведено исследование поверхностных слоев методами рамановской спектроскопии, РЭС с угловым разрешением и XANES. Изучен состав, структура, электронное строение углеродных слоев, сформированных на фторграфитовых матрицах различного состава. Показано, что при воздействии электронным пучком с энергией 500 эВ происходит формирование углеродного слоя толщиной менее 2 нм. Дефектность углеродных слоев зависит от структуры и состава исходных фторграфитовых матриц.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ АПАТИТОВ

Карбовский В.Л., Шпак А.П., Курган Н.А.

*Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, Киев,
бульв. Ак. Вернадского, 36, Киев-142, 03680, Украина, karb@imp.kiev.ua*

Исследовано электронное и атомное строение стехиометрических, изоморфно-модифицированных в анионной и катионной подрешетках по гетеровалентной схеме 3d-металлами, лантаноидами и щелочноземельными металлами апатитов $M_{10}(AO_4)_6X_2$, ($M=Ca, Sr, U, Fe, Ni, Cu, Mg$; $A=P, V, As$; $X=OH, F, Cl$) и неупорядоченных апатитоподобных структур. Спектральными и квантово–механическими методами установлены закономерности формирования электронного строения и химических связей в исследуемых соединениях. Определены изменения электронного строения, обусловленные динамикой топологического порядка в апатитах. Установлены эффекты в эволюции структуры валентных полос и зарядовых состояний атомов в зависимости от химического состава, неупорядоченности и действия внешних факторов. Показана детерминирующая роль тетраэдрических кислородных матриц XO_4^{3-} в формировании главных особенностей валентной полосы исследуемых соединений. Установлено, что электронная структура стехиометрических апатитов малочувствительна к типу аниона на оси с, что на практике проявляется в лабильности структуры относительно этой позиции.

Установлены основные закономерности электронно-энергетической организации нанодисперсных кристаллов апатитов биогенного происхождения. Показано, что распределение p- и d- электронных состояний кальция в образцах апатитов различного происхождения практически совпадает.

Установлено, что изоморфное модифицирование лантаноидами и щелочными элементами в решетке фосфато- и ванадатоapatита (по схеме $2Me^{2+}=Ln^{3+}+A^+$, $Ln=La, Nd, Sm, Gd, Ho$; $A=Li, Na, K, Rb, Cs$) приводит к существенному перераспределению электронной плотности кристалла и, как следствие, изменению формы кривой валентной полосы. Местом структурной локализации допантов является $Ca_{(2)}$ -позиция кристалла апатита.

Разработаны схемы практического биомедицинского и экологического применения нанодисперсного апатита кальция. Предложена технология надежного удаления радионуклида ^{90}Sr из водных растворов.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА С ПОЛИМЕРНЫМИ МАТРИЦАМИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ КОНЦЕНТРАЦИИ

Козинкин А.В.

*НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, kozinkin@ip.rsu.ru*

Методом рентгеновской эмиссионной и ЯГР - спектроскопии исследовано электронное строение наночастиц железа в различных полимерных матрицах с различной концентрацией от 5 до 50 мас.% металла.

Установлено, что взаимодействие химически активных поверхностных атомов наночастиц железа с атомами окружения конденсированных сред приводит к изменению состава, электронного и атомного строения наночастиц, которые зависят от полимерной матрицы, в которой стабилизируется рост наночастиц, и от концентрации железа в полимерной матрице.

Показано, что металлические наночастицы образуются только в полиэтиленовой матрице и в инертной атмосфере. С течением времени наночастицы железа окисляются. Взаимодействие наночастиц с другими полимерными матрицами, такими как, политетрафторэтилен, поликарбосилан или полистирол, может приводить к образованию наночастиц дифторида железа, силицида или карбида железа соответственно.

Взаимодействие наночастиц железа с полиэтиленовой матрицей приводит к дегидрированию полиэтилена и образованию химических связей валентных р-электронов поверхностных атомов железа с электронами молекулярных орбиталей полиэтилена. Полиэтилен не изолирует кластерные частицы железа от окисления. Основной состав наночастиц при концентрациях металла в полиэтиленовой матрице от 5 до 40 мас.% оксид железа, а при концентрациях 40 - 50 мас.% - карбид железа.

В политетрафторэтилене входящие в состав наночастиц атомы железа частично образуют металл-металл связи и дефторируют полимер, образуя при концентрациях железа в полимере до 20% мас. в основном связи железо - фтор, аналогичные связям в дифториде железа. С ростом концентрации от 30 до 50% мас. образуются связи железо - углерод, характерные для карбидов железа. Число неспаренных 3d-электронов, локализованных на атомах железа в наночастицах $\approx 4e$ и $2e$, при концентрациях до 30% и свыше 30%, соответственно.

ЭЛЕКТРОННОЕ СОСТОЯНИЕ АТОМОВ АЗОТА В АЗОТСОДЕРЖАЩИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Окотруб А.В., Булушева Л.Г., Асанов И.П.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, Новосибирск,
пр-т. Ак. Лаврентьева, 3, E-mail: spectrum@niic.nsc.ru*

Азотсодержащие углеродные нанотрубки (CN_x УНТ) были синтезированы аэрозольным CVD методом из смесей толуола и ацетонитрила, взятых в разных пропорциях, что позволило получить CN_x УНТ с разным содержанием азота. Структура углеродных и CN_x нанотрубок была охарактеризована методами электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Содержание и химическое состояние азота в продуктах синтеза определялось по данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Анализ данных выявил, что энергетически наиболее предпочтительным является образование трехкоординированных азотных дефектов, при достижении их концентрации ~1 ат.%, начинается более активное образование пиридиноподобного азота. Общая концентрация азотных дефектов составляет ~ 2 ат.%, избыток атомов азота формирует молекулы N₂. Обнаружена угловая зависимость рентгеновских спектров вблизи НК-края поглощения массивов CN_x УНТ, что указывает на наличие ориентации молекул азота в образцах. «Выстраивание» молекул N₂ вдоль оси нанотрубки может происходить только в результате их интеркаляции между слоями стенок трубы. Анализ КРС спектров образцов нанотрубок показал, что образование пиридиноподобного азота приводит к большей дефектности слоев CN_x нанотрубок, чем образование трехкоординированного азота.

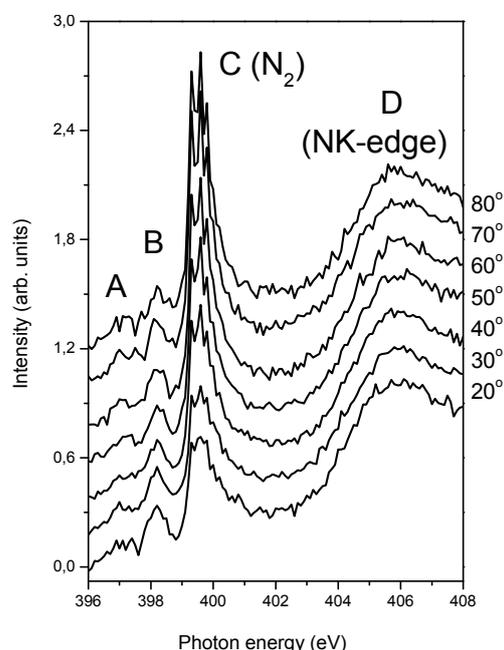


Рис. 1. Зависимость формы НК – спектров поглощения от угла падения рентгеновского излучения на пленку из CN_x УНТ, ориентированных перпендикулярно поверхности подложки.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РОСТА НАНОФОРМ В НАНОРЕАКТОРАХ**Теребова Н.С., Шабанова И.Н.***Физико-технический институт УрО РАН,
42600, Ижевск, Кирова 132, xps@fti.udm.ru*

Для проведения систематических исследований электронной структуры наносистем синтезированы модельные образцы наноструктур, в которых в качестве модификаторов использовались переходные металлы IV, V, VI периодов с различным числом d электронов и s-р элементы II, III периодов с различным числом p электронов. Это позволило развить метод рентгеноэлектронной спектроскопии для контроля и изучения строения наночастиц, разработать модель определения форм, получаемых в результате синтеза наноструктур. На основе проведенных рентгеноэлектронных исследований была выработана концепция изучения формирования наноструктур определенной формы и их свойств по межатомному взаимодействию исходных компонент, возможности образования гибридной химической связи d электронов атомов металла с p электронами атомов s-р элементов.

Разработана методика определения атомного магнитного момента d металлов и изменения расстояния между атомами металла и s-р элемента по параметрам рентгеноэлектронных спектров переходных металлов, что позволяет установить степень гибридизации валентных электронов в химической связи соседних атомов (Me-X). В результате исследований установлены закономерности, которые способствуют развитию новых направлений в синтезе наноструктур с уникальными свойствами.

Полученные закономерности позволили дать рекомендации по модифицированию чугунов, сталей, композиционных материалов наноструктурами для улучшения их эксплуатационных свойств.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС МЕХАНОХИМИЧЕСКИ
ИММОБИЛИЗОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ
ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ**

**Низовский А.И.¹, Калинин А.В.¹, Шахтшнейдер Т.П.^{2,3},
Дьяконова М.А.^{2,3}, Болдырева Е.В.^{2,3}, Kumar Rakesh⁴**

¹*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск 630090,
пр. Акад. Лаврентьева, 5, E-mail: alex niz@inbox.ru*

²*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

³*Научно-образовательный центр «Молекулярный дизайн и экологически
безопасные технологии» при НГУ, Новосибирск*

⁴*Национальная металлургическая лаборатория, Джемшедпур, Индия*

Несмотря на то, что механическое воздействие на смеси твердых веществ в настоящее время широко используется в практических целях – для изменения свойств веществ (растворимость, каталитическая активность и др.) и для получения новых материалов, природа взаимодействий между фазами и механизмы механохимических реакций остаются недостаточно понятыми. Настоящая работа посвящена исследованию взаимодействия компонентов в композитах мелоксикам – оксид алюминия, полученных при механической обработке. Мелоксикам – современное противовоспалительное лекарственное средство, плохо растворимое в воде. Известно, что механическая обработка лекарственных веществ с вспомогательными веществами приводит к получению механокомпозитов с контролируемой скоростью выделения лекарственного вещества в раствор [1, 2].

Механическую обработку мелоксикама с оксидом алюминия ($S_{уд.} 350 \text{ м}^2/\text{г}$) в соотношениях 1:1 и 1:3 проводили в планетарно-центробежной мельнице АГО-2. Спектры РФЭС были получены с использованием рентгеновского фотоэлектронного спектрометра SPECS. В спектральных районах S2p и N1s обнаружены изменения для механоактивированных образцов по сравнению с исходными, что может свидетельствовать о наличии связей иммобилизованного соединения с поверхностью оксида через серу- и азотсодержащие группы.

[1]. Boldyrev V.V., J. Mater. Sci., 2004, v. 395, p. 117.

[2]. Shakhshneider T.P., Myz S.A., Mikhailenko M.A., Drebushchak T.N., Drebushchak V.A., Fedotov A.P., Medvedeva A.S., Boldyrev V.V., Mater. Manufact. Proc., 2009, v. 24, p. 1064.

Работа поддержана грантами CRDF (RUX0-008-NO-06), РФФИ (09-03-92658) и программой Президиума РАН «Фундаментальные науки – медицине».

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 1

**НОВЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В ОПИСАНИИ
ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ. НОВЫЕ РАЗРАБОТКИ
ЛАБОРАТОРНЫХ ПРИБОРОВ**

РАСЧЁТ ЭНЕРГИИ АКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАРГАНЦА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ НАНОДИНАМИКИ

Безносюк С.А.¹, Жуковский М.С.¹, Беляева Н.А.¹, Фомина Л.В.²

¹Алтайский государственный университет, Барнаул,
пр. Ленина, 61, bsa1953@mai.ru

²Ангарская государственная техническая академия, Ангарск

В настоящее время открывается путь к созданию новых типов наноструктур, включающих активные наночастицы марганца с большим магнитным моментом и большой величиной запрещенной зоны, удобных для создания поверхностей с магнитными свойствами [1]. Кристаллический марганец наилучшим образом описывается методами расчётов из первых принципов. Несмотря на правильно описываемую закономерность в целом по периоду, для марганца наблюдается наибольшее расхождение между теорией и экспериментом. Так, энергия связи Mn по расчетам составила 5 эВ/ат, а экспериментальная – 2,9 эВ/ат. Модуль всестороннего сжатия Mn , определенный экспериментально, составил 100 ГПа, а теоретический – 290 ГПа. В данной работе методами нелокального функционала плотности [2] и квантовой нанодинамики [3] проведен поиск устойчивых форм наночастиц Mn_N для исследования зависимости энергии наночастиц марганца от их нуклеарности N и спина S . В табл. 1 представлены полученные результаты: N – нуклеарность, E_a – энергия связи на атом (эВ/ат).

Таблица 1. Зависимость энергия связи от нуклеарности наночастиц Mn

N	32	72	108	256	500	864	1372	2048	2916	4000	5324
E_a	1.72	1.99	2.13	2.35	2.48	2.58	2.64	2.69	2.73	2.77	2.79

Видно, что высокая насыщенность энергией наночастиц марганца в пределе кристалла приближается к экспериментальному значению: $E_a = 2,9$ эВ/ат.

- [1]. Wang J. Journal of Physics: Condencend Matter., 2008. Jss. 33. Art. 20.
 [2]. Beznosjuk S.A., Dajanov R.D., and Kuljanov A.T. Int. J. Quant. Chem., 1990. V. 38(5), p.691-698.
 [3]. Безносюк С.А., Потекаев А.И., Жуковский М.С., Жуковская Т.М., Фомина Л.В. Многоуровневое строение, физико-химические и информационные свойства вещества. / Томск: Изд-во НТЛ, 2005, 264 с.

ДЫРОЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВОЙНЫХ ВЕРТИКАЛЬНО-СОПРЯЖЕННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ Ge/Si II-го ТИПА

Блошкин А.А., Якимов А.И., Двуреченский А.В.

*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск,
пр. Академика Лаврентьева, 13, bloshkin@isp.nsc.ru*

Система из двух вертикально связанных квантовых точек моделировалась двумя пирамидами Ge, встроенными в матрицу Si. Размер основания пирамид варьировался от 10 до 20 нм, высота составляла 1/10 основания пирамиды. Каждая пирамидка располагалась на смачивающем слое Ge, толщиной 4 монослоя Ge. Расстояние между пирамидками варьировалось от 2 до 8 нм от смачивающего слоя до смачивающего слоя. Такая ситуация соответствует реальным структурам, получаемым в результате гетероэпитаксии германия на кремний. Распределение упругих деформаций вычислялось с помощью программного пакета Comsol Multiphysics в приближение сплошной среды в сочетании с методом конечных элементов. Моделирование дырочного спектра производилось в 6-зонном приближении. Эффекты связанные с деформациями были включены в рассмотрение с помощью гамильтониана Бира-Пикуса. Обнаружено, что асимметрия распределения деформаций в такой структуре и спин-орбитальное взаимодействие в валентной зоне приводят к появлению асимметрии одночастичных состояний даже если квантовые точки одинаковы по размеру и форме. Во-первых, расщепление между связывающей и антисвязывающей молекулярными орбиталями не является симметричным: Средняя энергия дырки уменьшается с уменьшением расстояния между квантовыми точками, что свидетельствует о наличии внутренней структурной асимметрии. Во-вторых, увеличение толщины слоя Si между квантовыми точками Ge приводит к пересечению энергетических уровней, соответствующих одночастичным состояниям различной симметрии. В результате, при большой дистанции между нанокластерами Ge основным состоянием становится антисвязывающая дырочная орбиталь. Показано, что кроссинг одночастичных состояний является следствием локализации дырок в противоположных квантовых точках, вызванной асимметрией распределения деформационных полей.

**ВОЗМОЖНОСТИ ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОГО
РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА В ИССЛЕДОВАНИИ
СОСТАВА КРИСТАЛЛОВ GaAs, ИМПЛАНТИРОВАННЫХ
ИОНАМИ Te И S И ОБЛУЧЕННЫХ СИЛЬНОТОЧНЫМ
ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ**

Веригин А.А., Наумик А.И.

*ТОО «ТехноАналит», Республика Казахстан,
Усть-Каменогорск, ул. Крылова, 85, daltek@ukg.kz*

Целью настоящей работы является изучение возможности энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа в измерении стехиометрии арсенида галлия и концентрации имплантированной примеси до и после облучения сильноточным электронным пучком (СЭП).

В экспериментах использовались монокристаллы арсенида галлия, имеющего ориентацию (100) марки АГП-2. Все образцы проходили стадию шлифовки и химического травления. Имплантацию проводили в геометрии, исключающей влияние эффекта каналирования на распределение имплантированных ионов. Внедрялись ионы, являющиеся основными легирующими примесями: теллур и сера. Облучение импульсным пучком электронов осуществляли на установках, созданных в институте сильноточной электроники СО АН СССР.

Эксперименты были выполнены на энергодисперсионном спектрометре типа СРВ-1. В спектрометре используется полупроводниковый детектор с энергетическим разрешением 160 эВ (на линии $MnK_{\alpha 1}$) и толщиной бериллиевого окна 8 мкм.

Результаты данной работы убедительно показывают, что для относительных измерений поведения примеси и изменения стехиометрии поверхности при воздействии сильноточных электронных пучков может быть использован метод рентгенофлуоресцентного анализа с энергетической дисперсией.

Результаты, полученные методом Резерфордского обратного рассеяния, могут быть использованы для градуировки РФА.

Дефектообразование в имплантированных кристаллах арсенида галлия зависит от типа внедренной примеси и может быть связано с более интенсивным испарением тяжелых ионов (Te) с поверхности кристалла.

ПРОЦЕССЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ ВНУТРЕННИХ УРОВНЕЙ АТОМА ВЕЩЕСТВА ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ФОРМИРОВАНИИ ПРОТЯЖЕННЫХ ТОНКИХ СТРУКТУР СПЕКТРОВ ЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ 3d-МЕТАЛЛОВ И ИХ ОКСИДОВ

Гай Д.Е.

*Физико-технический институт Уральского отделения РАН, Ижевск,
lasas@fti.udm.ru*

Разработано теоретическое описание протяженных тонких структур спектров энергетических потерь электронов (EELFS) и протяженных тонких структур спектров вторичных электронов (SEEFs) с учетом мультипольности процесса возбуждения внутреннего уровня атома вещества электронным ударом и процессов первого и второго порядка по безрадиационным электронным переходам. Проведены расчеты спектров Fe, Ni, Cu (при температурах 300 и 900°K) и их стехиометрических оксидов. Хорошее соответствие расчетных и экспериментальных данных (как на качественном, так и на количественном уровне) показало, что физическая природа этих процессов описывается в рамках предложенного подхода, а используемые методы расчетов удовлетворительно описывают экспериментальные результаты.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Химический состав и локальная атомная структура сверхтонких поверхностных слоев 3d-металлов и их соединений по данным электронной и рентгеноэлектронной спектроскопии».

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В УГЛОВОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ И ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ

Демехин Ф.В.¹, Петров И.Д.¹, Демехина Л.А.²,
Шморанцер Х.³, Эресманн А.⁴, Сухоруков В.Л.¹

¹Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, e-mail: vl@rgups.ru

²Педагогический институт, Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону

³Физический факультет, Университет г. Кайзерслаутерн, Германия

⁴Институт Физики, Университет г. Кассель, Германия

Угловое распределение фотоэлектронов и флуоресценции в области резонансного $1s^{-1}\pi^*$ возбуждения остовных оболочек молекул CO и NO исследовано теоретически и экспериментально. В качестве объектов исследования выбраны резонансные оже-спектры, соответствующие заселению конечных ионных состояний $\text{NO}^+(\text{A } ^1\Pi)$ и $\text{CO}^+(\text{A } ^2\Pi)$, а также спектры последующей молекулярной флуоресценции $\text{NO}^+(\text{A } ^1\Pi \rightarrow \text{X } ^1\Sigma^+)$ и $\text{CO}^+(\text{A } ^2\Pi \rightarrow \text{X } ^2\Sigma^+)$. В расчетах учтена интерференция между амплитудами резонансной и прямой фотоионизации молекулы. Энергии и вероятности перехода между колебательными уровнями электронных состояний, определяющих возбуждение и оже-распад резонансов, а также последующий радиационный распад молекулярного иона, рассчитаны из первых принципов как описано в работе [1]. Эксперименты выполнены методом фотонно-индуцированной флуоресцентной спектроскопии [2] с использованием источника синхротронного излучения BESSY II, г. Берлин.

Установлено, что учет прямой фотоионизации приводит к энергетическим зависимостям рассчитанных параметров углового распределения фотоэлектронов и флуоресценции в широкой области энергии возбуждающего излучения, прилегающей к резонансу. Интерференция перекрывающихся колебательных уровней промежуточного резонанса, а также интерференция электронных состояний, соответствующих мультиплетному расщеплению промежуточного резонанса (в случае молекулы NO), приводит к существенным вариациям рассчитанных параметров углового распределения фотоэлектронов и флуоресценции при сканировании энергии через резонанс. Результаты расчета хорошо согласуются с полученными экспериментальными данными.

[1]. Ph. V. Demekhin *et al.*, Phys. Rev. A. **80** (2009) 063425.

[2]. H. Schmoranzer *et al.*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **467-468** (2001) 1526.

ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И ТЕРМОДИНАМИКИ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМОЙ В КАЧЕСТВЕ СИСТЕМЫ СРАВНЕНИЯ

Дубинин Н.Э., Юрьев А.А.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург,
Амундсена, 101, yurev_anatolii@mail.ru*

Количественное описание свойств структурно-неупорядоченных, в том числе жидких, металлов зависит от успешного решения двух задач: корректного учета электронной структуры жидкого металла и проведения усреднение по всем возможным атомным конфигурациям. Мы выбрали в качестве объекта исследования щелочные металлы, так как для них метод псевдопотенциала во втором порядке теории возмущений в локальном приближении обеспечивает точное описание всех взаимодействий: электрон-электронного, электрон-ионного и эффективного межионного. Поэтому эти металлы удобны для изучения точности различных моделей жидкости, так как для них можно провести численные расчеты практически исчерпывающего числа свойств.

В работе используется новая система сравнения для описания атомной структуры жидких металлов, основанная на модели прямоугольной ямы, впервые предложенная нами в работе [1]. Дополнительно выбрано приближение случайных фаз, так как для него существует аналитическое решение для прямой корреляционной функции. Основываясь на выбранных приближениях, нами получено выражение для энтропии системы сравнения и в дальнейшем применяется стандартный вариационный подход для определения трех параметров: диаметра твердой сферы, ширины и глубины прямоугольной ямы. В настоящей работе подход используется для детального исследования жидких Na и K: рассчитываются и сравниваются с экспериментом их структурные факторы и термодинамические свойства, а также их температурная зависимость. Оценивается точность предложенного подхода в сравнении с другими методами.

[1]. Dubinin N., Yuryev A., Vatolin N. The Gibbs-Bogoliubov Variational Procedure with the Square-Well Reference System, J. Non-equilib. Thermodynamics, 2010, в печати.

АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЦИНКОВОГО КОМПЛЕКСА $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$: АНАЛИЗ НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Евсюкова М.А.¹, Кравцова А.Н.¹, Щербаков И.Н.¹, Туполова Ю.П.¹,
Зубавичус Я.В.², Солдатов А.В.¹

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону,
ул. Зорге, 5, marina-evsukova@mail.ru

²Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий, Москва

Проведено изучение локальной атомной и электронной структуры цинкового комплекса на основе анализа ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (XANES) за *K*-краем цинка и теоретических расчетов на основе методов многократного рассеяния, конечных разностей и теории функционала плотности. Получены экспериментальные спектры за *K*-краем цинка комплекса $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$. Измерения проводились в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий.

Проведены расчеты теоретических спектров XANES за *K*-краем цинка на основе метода полного многократного рассеяния с помощью программного комплекса FEFF8.4 и метода конечных разностей с помощью программного комплекса FDMNES2009, при этом расчет потенциала был выполнен как в рамках muffin-tin приближения, так и вне его.

Геометрическая оптимизация структуры и расчет электронного строения комплексов проведены на основе теории функционала плотности (DFT), реализованного в программном комплексе ADF2009, с использованием обменно-корреляционного функционала OPBE в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) и базисного набора TZP. Так же исследована электронная структура комплекса $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$.



Рис. 1. HOMO для цинкового комплекса $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$.

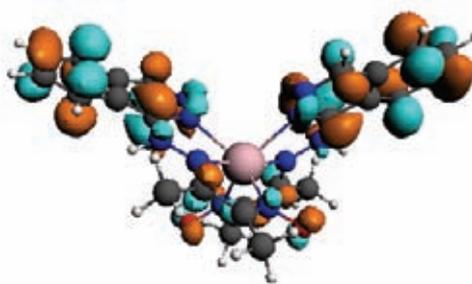


Рис. 2. LUMO для цинкового комплекса $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$.

**РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ
ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФЕРРОЦИАНИДОВ**

Зарубин И.А., Власенко В.Г., Шуваев А.Т.[†]

*НИИ Физики Южного федерального университета,
344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194,
E-mail: zarubin@e-mail.ru*

Электронная структура серии ферроцианидных комплексов $A_4Fe(CN)_5X$ ($A=H, K, Na$; $X=CN, SNO, NO_2, NO, NH_3$) была изучена на базе современных квантовохимических расчетов методом теории функционала плотности (DFT) с использованием программного комплекса Gaussian-03. Использовался гибридный трехпараметрический функционал Бекке с корреляционными функциями Ли-Янга-Парра (B3LYP). Были взяты расширенный валентно-расщепленный базис 6-311G(d) и базис на основе эффективного псевдопотенциала LANL2DZ. Полученные результаты расчетов электронного строения указанных комплексов были использованы для построения теоретических рентгеновских эмиссионных линий $FeK\beta_5$, $FeL\alpha$ и $СК\alpha$, которые были сопоставлены с экспериментальными эмиссионными спектрами.

Проведенные расчеты продемонстрировали хорошую воспроизводимость всех характерных особенностей соответствующих экспериментальных спектров, а также их энергетических характеристик.

Анализ результатов расчетов монозамещенных ферроцианидных комплексов позволил определить особенности изменений их электронного строения в зависимости от замещающего лиганда и проинтерпретировать изменения характеристик тонкой структуры соответствующих рентгеновских эмиссионных спектров.

СИСТЕМА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕГИСТРАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ НА ОСНОВЕ ПЗС МАТРИЦЫ ДЛЯ МАГНИТНОГО ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА

Исупов Н.Ю.

*Физико-технический институт УрО РАН,
Кирова 132, 42600, Ижевск, xps@fti.udm.ru*

В электронных магнитных спектрометрах применяется классический режим последовательной во времени регистрации фотоэлектронных спектров.

Этот режим не позволяет отслеживать быстропротекающие процессы динамического изменения структуры вещества при внешнем воздействии т.к. недостаточно разрешение по времени. При использовании системы параллельной регистрации на основе ПЗС появляется возможность одновременной регистрации протяженного участка энергий фотоэлектронного спектра одновременно. Для ПЗС матрицы в отличие от других систем параллельной регистрации решена проблема неоднородности коэффициента усиления сигнала от регистрирующих элементов. За счет большой плотности регистрирующих элементов на единицу площади детекторы на основе ПЗС обладают хорошим пространственным разрешением.

На данный момент ведутся работы по созданию аппаратуры управления системой параллельной регистрации на основе ПЗС матрицы удовлетворяющим таким требованиям, как «неограниченное» время накопления заряда в матрице, управление электронным затвором, оцифровка аналоговых данных поступающих с усилителя матрицы, ввод данных в компьютер для последующей обработки.

МОДЕРНИЗАЦИЯ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ ЭС-2401 И ЭС-3201 ДЛЯ РЕШЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Кожевников В.И.¹, Мерзляков П.Г.², Трапезников В.А.¹

¹*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
ул. Кирова, 132, uds@pti.udm.ru*

²*ООО «Чистые технологии», Ижевск*

Сверхвысоковакуумное научное оборудование, к которому относятся фотоэлектронные спектрометры, является чрезвычайно дорогостоящим и его приобретение может позволить себе не каждый потребитель. Поэтому, в настоящее время зарубежные ведущие фирмы – изготовители высоковакуумного научного оборудования практикуют модернизацию устаревших моделей спектрометров собственного производства, выпущенных в 70-80 г.г. прошлого века. В нашей стране существует значительный парк отечественных электростатических фотоэлектронных спектрометров, выпущенных в конце 70-х и 80-е годы 20 века. Для проведения исследований в области материаловедения, связанных с влиянием внешних воздействий на поверхностные слои материалов проведена модернизация спектрометра ЭС-2401:

- рассчитана и изготовлена вакуумная система включающая: шлюзовую камеру и сверхвысоковакуумную систему дозированного напуска газов;
- разработаны шлюзовая камера для загрузки образца и шлюзовая-реакционная камера для загрузки и термообработки образцов в агрессивных средах;
- разработаны технологические приставки для контролируемого нагрева образца в газовой среде и вакууме и для механического удаления поверхностного слоя;
- расширен диапазон возбуждающих излучений в область ультрафиолета и мягкого рентгена.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФЕРРИТА ВИСМУТА

**Козаков А.Т.¹, Гуглев К.А.¹, Илясов В.В.², Ершов И.В.²,
Никольский А.В.¹, Смотрakov В.Г.¹, Еремкин В.В.¹**

¹НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, kozakov_a@mail.ru

²Донской государственной технической университет,
Ростов-на-Дону, 344000, пл. Гагарина, 1, viily@mail.ru

Представлены результаты исследования электронного строения валентных полос монокристаллов BiFeO_3 и Fe_2O_3 методом высокоразрешающей рентгеноэлектронной спектроскопии совместно с данными расчета электронной структуры. Монокристаллы феррита висмута выращивались в температурном диапазоне кристаллизации 820-930 °С по методике [1] и имели кубическую форму с размером ребра ~ 1мм. Кроме того, в интервале температур 1000-850 °С из системы $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5$ (82.4 : 13.1 : 4.5 % вес.) получены черные изометрические кристаллы Fe_2O_3 псевдокубического габитуса со структурой гематита. Рентгеноэлектронные спектры α -железа, висмута, окисных пленок на поверхности железа и висмута, монокристаллов гематита и феррита висмута получались на рентгеновском фотоэлектронном микрозонде ESCALAB 250 при возбуждении электронов монохроматизированным излучением $\text{AlK}\alpha$ – линии. Выполнены ab initio расчёты зонной структуры, полных и парциальных плотностей электронных состояний (DOS) системы Fe-O-Bi в ряду Fe – FeO – Fe_2O_3 – $\text{Bi}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_3$ – BiFeO_3 . Ab initio расчёты выполнены полнопотенциальным методом псевдопотенциала в рамках теории функционала плотности (DFT) [2]. Используются современные программные пакеты (коды Quantum-Espresso и Wien2k) [3,4].

Расчитанные электронные энергетические спектры системы Fe-O-Bi сопоставлены с XPS спектрами. Согласно расчетов первый максимум в валентной полосе феррита висмута в основном состоит из Fe3d, Bi4p и O2p гибридизированных состояний, а второй – в основном из Bi 6s состояний. Обсуждаются закономерности и природа эволюции электронной структуры в рядах: Fe – FeO – Fe_2O_3 – $\text{Bi}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_3$ – BiFeO_3 и Bi – Bi_2O_3 – $\text{Bi}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_3$ – BiFeO_3 .

[1]. Раков Д.Н., Мурашов В.А., Буш А.А., Веневцев Ю.Н. Кристаллография, 1988, т. 33, № 2, с. 445.

[2]. Kohn W., Sham L.J., Phys. Rev., 1965, A **140**, p. 1133.

[3]. Baronu S., Dal Corco A., de Gironcoli S. et al. <http://www.pwscf.org/>.

[4]. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J., wien2k, An Augmented-Plane-Wave+Local Orbitals Program for Calculating Cristal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn Wien, Austria, 2001).

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ
НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В
АРИЛВИНИЛОВЫХ ЭФИРАХ**

Кукуева В.В.¹, Фесак А.Ю.²

¹*Академия пожарной безопасности им. Героев Чернобыля, Черкассы, Украина,
kukueva@yahoo.com*

²*Черкасский национальный университет им. Б. Хмельницкого, Черкассы,
Украина*

Путем проведения экспериментов [1] было замечено, что винилалкиловые эфирные соединения, в присутствии солей диазония и CuCl_2 в качестве катализаторов, дают продукт присоединения радикалов по двойной связи винилоксигруппы, который выделен с незначительным выходом. Виниларилловые эфиры в аналогичных условиях тоже присоединяют радикалы из диазосолей по двойной связи, но продукты присоединения не выделяются, а образуется арилуксусный альдегид вследствие легкого отщепления атома Cl от образуемого продукта в водной среде. Было сделано предположение, что алкиловые эфиры должны быть более реакционноспособны, чем ариловые, что должно вытекать из зарядов на атомах углерода в α и β положении винилоксигруппы $-\text{O}-\text{CH}=\text{CH}_2$. Проанализирована возможность существования двух устойчивых конформеров (плоского и ортогонального) алкиларилловых и виниларилловых эфиров. Путем использования полуэмпирических квантово-химических методов МПДП (модифицированного пренебрежения двухатомным перекрыванием) и ППДП/С (полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием со спектроскопической параметризацией) были исследованы их геометрии и осуществлена оценка влияния донорных и акцепторных заместителей в параположении бензольного кольца на разность их энергий и заселенности. В результате расчетов, было показано, что акцепторные паразаместители увеличивают заселенность плоского конформера, а донорные – наоборот, уменьшают. Отмечено также, что поляризация винильной группы существенно меняется под влиянием паразаместителей в плоском конформере, но остается практически постоянной в ортогональном. Для дальнейшего исследования конформеров с различными заместителями в бензольном ядре проведены квантово-химические расчеты неэмпирическим методом Хартри-Фока в базисе 6-31*G.

РЕНТГЕНОВСКИЙ МИКРОЗОНД-МИКРОСКОП РАМ-30 μ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ

Николаев В.И., Бахвалов А.С., Чижова Е.В.

*ЗАО «Научные приборы», Санкт-Петербург, Рижский пр., д. 26,
nikolaevw@sinstr.ru*

Для исследования микрообъектов, микрообластей, а также образцов с неоднородным распределением элементов по поверхности применяется метод рентгенофлуоресцентного микроанализа (микро-РФА), позволяющий проводить качественный и количественный элементный анализ, а также - элементное картирование поверхности. Одним из актуальных направлений применения метода является определение элементного состава и структуры полупроводниковых систем.

Лабораторный рентгеновский аналитический микрозонд-микроскоп РАМ-30 μ , разработанный ЗАО «Научные приборы», открывает широкий круг возможностей для исследователя-аналитика.

В качестве оптического элемента, формирующего рентгеновский микрозонд, в приборе применяется поликапиллярная рентгеновская линза, которая фокусирует рентгеновский пучок в точку диаметром от 30 мкм.

Регистрация спектров рентгеновской флуоресценции осуществляется полупроводниковым дрейфовым энергодисперсионным детектором с электроохлаждением. Элементное картирование осуществляется для всего диапазона регистрируемых элементов – от Na до U одновременно.

Рентгенографический детектор позволяет получать изображения поверхностной и внутренней структуры образца в просвечивающем режиме.

Обзорная видеокамера позволяет выбрать область микроанализа. Объектив микроскопа, оптическая ось которого совмещена с осью рентгеновского зонда, обеспечивает увеличение видимого изображения исследуемого участка объекта до 100 крат. Для большей детализации оптических снимков применяется дополнительный микроскоп с увеличением до 200 крат.

Сочетание методов оптической микроскопии, локального элементного микроанализа, элементного картирования и рентгенографии позволяет получать наиболее полную и точную информацию об элементном составе исследуемого объекта, а так же его поверхностной и внутренней структуре.

АКТИВНОЕ ПРОСТРАНСТВО ДЛЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ИОНИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ, ОПРЕДЕЛЯЕМОЕ ТЕОРЕМОЙ КУПМАНСА

Новиков А.В.¹, Бреславская Н.Н.², Москвин А.В.¹, Плахутин Б.Н.¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск 630090.

E-mail: Plakhutin@catalysis.ru

²Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

В соответствии с общей (вариационной) формулировкой теоремы Купманса в методе ROHF [1,2], энергия и волновая функция ионов, возникающих в соответствующих одноэлектронных процессах $X \rightarrow X_j^\pm$, могут быть определены как в приближении «замороженных» орбиталей, полученных каноническим методом ROHF [3] для исходной системы X , так и методом конфигурационного взаимодействия (КВ).

Принципиальный вопрос состоит в точном определении активного пространства КВ для ионов, удовлетворяющего условиям теоремы Купманса [1,3] и требованию инвариантности волновой функции КВ относительно произвольных унитарных преобразований орбиталей внутри соответствующих оболочек (замкнутой, открытой и виртуальной) [2].

Нами разработан алгоритм для построения активного КВ пространства для расчетов ионизированных систем. Этот алгоритм представляет собой модификацию метода ORMAS-CI (Occupation Restricted Multiple Active Spaces - CI) [4], реализованного в программе GAMESS [5]. Проведены тестовые расчеты для проверки эквивалентности канонической [3] и вариационной [1] формулировок теоремы Купманса.

Работа поддержана грантами РФФИ (09-03-00113) и ОХНМ РАН (2009/5.1.9).

[1]. B.N. Plakhutin and E.R. Davidson, J. Phys. Chem. A. **113**, 12386 (2009).

[2]. E.R. Davidson and B.N. Plakhutin, *in press*.

[3]. B.N. Plakhutin, E.V. Gorelik and N.N. Breslavskaya, J. Chem. Phys. **125**, 204110 (2006).

[4]. J. Ivanic, J. Chem. Phys. **119**, 9364 (2003).

[5]. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

СОСТОЯНИЯ ОКИСЛЕНИЯ ИОНОВ МЕДИ В НАНОСТРУКТУРНОМ CuO, ПОЛУЧЕННОМ УДАРНО-ВОЛНОВЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

Овечкина Н.А.¹, Шкварин А.С.¹, Галахов В.Р.¹, Семенова А.С.²,
Taubitz С.³, Cioroianu A.R.³, Neumann M.³, Козлов Е.А.⁴

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: ovechkina@ifmlrs.uran.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³Fachbereich Physik, Universität Osnabrück, Osnabrück, Germany

⁴Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, Снежинск, Россия

Высокоплотные нанокерамики привлекательны для функционального применения благодаря высокому уровню дефектности и стабильности.

Нанокерамический монооксид меди с плотностью 99 % получен воздействием сферически-сходящихся ударных волн на поликристаллический однофазный порошок CuO. Размер частиц полученного сферического образца монотонно уменьшался от 100 nm у края сферы до 5 nm на расстоянии $r/r^* = 0.7$ (r^* – радиус сферы, r – расстояние от центра). Для определения состояния окисления ионов меди, связанных с отклонением от стехиометрического состава были использованы методы рентгеновской спектроскопии на внешней части образца: $0.6 \leq r/r^* \leq 0.9$.

Рентгеновские фотоэлектронные Cu 2p-спектры (анализ поверхности), полученные с помощью рентгеновского фотоэлектронного спектрометра PHI 5600 ci Multitechnique System с использованием Al K α -излучения, обнаружили наличие ионов Cu⁺, хотя рентгенофазовый анализ не показал других фаз (Cu₂O, Cu) в полученном образце. Рентгеновские абсорбционные Cu 2p-спектры в режиме полного электронного выхода получены на Российско-Германской линии BESSY. Рентгеновские эмиссионные O K α - спектры (объемные), а также рентгеновские абсорбционные Cu 2p-спектры в режиме полного электронного выхода (поверхностно-чувствительные) и выхода флюоресценции (объемный анализ) измерены на линии I511-3 Max-lab. Установлено наличие ионов Cu⁺ в нанокерамическом CuO, концентрация которых возрастает от внешнего края вглубь сферического образца. Полученные результаты позволяют сделать вывод о локализации дефектов, связанных с ионами Cu⁺ в некоторой приповерхностной области наночастиц без образования объемной фазы Cu₂O.

Работа поддержана РФФИ (проект 08-03-99071) и двусторонним проектом «Российско-Германская лаборатория на BESSY».

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ОКСИДОВ И
ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ С ЗАПОЛНЕННОЙ d-ОБОЛОЧКОЙ**

**Скориков Н.А.¹, McLeod J.A.², Финкельштейн Л.Д.¹,
Курмаев Э.З.¹, Moewes A.²**

¹*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург,*

skorikov@ifmlrs.uran.ru

²*University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada*

Электронная структура щелочноземельных оксидов (BeO, MgO, CaO, SrO, BaO) и оксидов металлов с заполненной d-оболочкой (d^{10}) – ZnO, CdO и HgO исследована методами рентгеновской спектроскопии и вычислительной физики. На основе сопоставления рентгеновских K-спектров эмиссии и поглощения кислорода и зонных расчетов делается вывод, что в BeO, SrO и BaO положение главного максимума O 2p-плотности состояний (DOS) определяется положением np-возбужденных состояний катиона. Для других оксидов – положением (n-1)d или nd-возбужденных состояний. Такое различие определяется распределением возбужденных парциальных плотностей состояний катионов. Из рентгеновских K-спектров эмиссии и поглощения кислорода определены ширины запрещенной зоны в исследованных оксидах, которые сопоставлены с расчетными данными.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ для ведущих научных школ (грант НШ-3572.2010.2) и РФФИ (проект 08-02-00148).

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ МУЛЬТИПЛЕТОВ В ТЕОРИИ ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗА

Смоленский Е.А., Рыжов А.Н., Чуваева И.В., Чувылкин Н.Д., Лапидус А.Л.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук, Российская федерация, 119991 Москва,
Ленинский просп., 47. E-mail: smolensk@server.ioc.ac.ru*

Определённый вид каталитической активности согласно мультиплетной теории А.А. Баландина объясняется существованием на каталитической поверхности определенных структур, содержащих k атомов и образующих систему с фиксированной геометрией. Такие структуры названы Баландиным мультиплетами.

Развиваемый нами способ описания молекул с помощью троек атомов ($k = 3$) можно применить для формального представления мультиплета в виде набора треугольников. Так, триплет – это просто треугольник. Квартет атомов ($k = 4$) представляется набором из четырёх треугольников, обладающих тем свойством, что любая пара из них имеет одну и только одну общую сторону. Квintет атомов ($k = 5$) описывается набором из десяти треугольников, причем каждая пара из них имеет, по крайней мере, одну общую вершину. Аналогично можно охарактеризовать с помощью треугольников секстет ($k = 6$) и т.д.

В свою очередь, сами каталитические поверхности можно описать набором треугольников следующим образом. Пусть S – площадь поверхности катализатора, выраженная в кв. нм. Обозначим число треугольников вида Δ_{ijk} на 1 кв. нм поверхности через $\alpha_{ijk}(S)$ (i, j, k – символы атомов, образующих треугольник). Это число можно найти с помощью выражения:

$$\alpha_{ijk} = \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{n_{ijk}(S)}{S}, \quad (1)$$

где n_{ijk} – число таких треугольников на поверхности с площадью S . При этом рассматриваемой поверхностью могут быть, например, круги или квадраты, охватывающие при увеличении площади все большее число возможных треугольников. Таким образом, выражение (1) позволяет для твердых поверхностей получать аналоги химических формул и математически однотипно описывать как адсорбируемые молекулы, так и каталитически активные центры.

**ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
НЕКОТОРЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ,
КОБАЛЬТА И МАРГАНЦА**

**Сухарина Г.Б.¹, Кравцова А.Н.¹, Солдатов А.В.¹, Зубавичус Я.В.²,
Мазалов Л.Н.^{3,4}, Крючкова Н.А.³**

¹*Южный федеральный университет, 344090, Ростов-на-Дону,
ул. Зорге, 5, sukharina@mail.ru*

²*Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий, Москва*

³*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск*

⁴*Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

Проведено исследование атомной и электронной структуры комплексов Ni(EtOCS₂)₂, Ni(-i-Bu₂PS₂)₂, Ni(2,2'-bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Ni(Phen)(i-Bu₂PS₂)₂, Co(i-Bu₂PS₂)₂, Co(2,2'-Bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Co(phen)(i-Bu₂PS₂)₂, Mn(2,2'-Bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Mn(Phen)(i-Bu₂PS₂)₂ на основе рентгеновской спектроскопии поглощения в ближней к краю области (XANES) и теории функционала плотности (DFT).

Спектры рентгеновского поглощения за K-краем никеля в комплексах Ni(EtOCS₂)₂, Ni(-i-Bu₂PS₂)₂, Ni(2,2'-bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Ni(Phen)(i-Bu₂PS₂)₂, за K-краем кобальта в комплексах Co(i-Bu₂PS₂)₂, Co(2,2'-Bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Co(phen)(i-Bu₂PS₂)₂, а также за K-краем марганца в комплексах Mn(2,2'-Bipy)(i-Bu₂PS₂)₂, Mn(Phen)(i-Bu₂PS₂)₂ зарегистрированы в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий (г. Москва).

Теоретический анализ экспериментальных данных выполнен на основе метода полного многократного рассеяния (программный комплекс FEFF8.4) и метода конечных разностей (программный код FDMNES). Получено хорошее согласие теоретических и экспериментальных данных.

Оптимизация атомной геометрии исследуемых комплексов выполнена на основе метода DFT с использованием программы ADF2008. Полученные структуры в дальнейшем были использованы для получения информации об электронной структуре комплексов. Так, выполнены расчеты молекулярных уровней комплексов, заселенности валентных орбиталей комплексов.

ФОТОИОНИЗАЦИЯ Хе В ОБЛАСТИ 5s ПОРОГА

**Сухоруков В.Л.¹, Петров И.Д.¹, Лагутин Б.М.¹, Демёхин Ф.В.¹,
Демёхина Л.А.², Шморанцер Х.³, Эресманн А.⁴**

¹*Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, пл. Народного Ополчения, 2, vis@rgups.ru*

²*Педагогический институт ЮФУ, Ростов-на-Дону*

³*Технический университет Кайзерслаутерн, Германия*

⁴*Институт физики университета Кассель, Германия*

Первые измерения сечений фотоионизации атомов благородных газов были начаты в начале 60х годов (см., например работы [1,2] и ссылки в них). Однако до настоящего времени интерпретация парциальных спектров фотопоглощения Хе отсутствовала в виду их сложности.

В настоящей работе рассчитаны полные и парциальные сечения фотоионизации атома Хе в области 5s порога с учетом основных многоэлектронных эффектов. В предпороговой области результаты расчета сопоставлены с измерениями, имеющимися в литературе [2]. Расчет позволил впервые идентифицировать резонансы, наблюдаемые в сечениях фотоионизации 5p- оболочки.

В ближней запороговой области сечения измерены с использованием синхротронного излучения. Сечения фотоионизации 5s- оболочки и 9-ти сателлитов измерены с разрешением 20 мэВ при сканировании в широкой (23-28 эВ) области и 1.8 мэВ при сканировании в узкой (23.25-23.50) области энергий.

Хорошее согласие теоретических и экспериментальных сечений фотоионизации позволило сделать заключение о большом влиянии на рассмотренные процессы межоболочечных и внутриоболочечных корреляций, межканального взаимодействия и состояний двойного возбуждения.

[1]. J.A.R. Samson, *The measurement of the photoionization cross sections of the atomic gases*. Advances in Atomic and Molecular Physics (Academic Press, New York, 1966).Vol. 2.

[2]. K. Codling, R.P. Madden, *J. Res. Natl. Bur. Stand. (Sect.A)* **76**, 1 (1972).

ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И ГИБРИДИЗАЦИЯ В 5p-ОКСИДАХ

Финкельштейн Л.Д.¹, McLeod J.A.², Скориков Н.А.¹,
Курмаев Э.З.¹, Moewes A.²

¹*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург,*
skorikov@ifmlrs.uran.ru

²*University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada*

Мы представляем результаты измерений рентгеновских К-спектров эмиссии и поглощения кислорода и расчетов электронной структуры в 5p-бинарных оксидах (In_2O_3 , SnO , SnO_2 , Sb_2O_3 , Sb_2O_5 и TeO_2). Установлено, что занятые электронные состояния катионов сильно гибридизованы с O 2p-состояниями и сопоставление экспериментов с расчетами позволило установить симметрию гибридизованных состояний катионов. Для оксидов с $5s^0$ основным состоянием (In_2O_3 , SnO_2 и Sb_2O_5) механизм химической связи π -типа и распределение катионных состояний качественно следует правилам для водородоподобных атомов. Для оксидов с $5s^2$ основным состоянием (SnO , Sb_2O_3 , и TeO_2) механизм химической связи σ -типа. Из комбинации рентгеновских К-спектров эмиссии и поглощения кислорода оценены ширины запрещенной зоны, которые сопоставлены с расчетами и имеющимися экспериментальными данными для 5p-оксидов.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ для ведущих научных школ (грант НШ-3572.2010.2) и РФФИ (проект 08-02-00148).

РАЗЛОЖЕНИЕ СЛОЖНЫХ РЕНТГЕНОФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ

Шаков А.А.

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
ул. Кирова, 132, uds@pti.udm.ru*

Обсуждается методика математической обработки рентгенофотоэлектронных спектров (РФЭС), основанная на преобразовании Фурье с регуляризацией и улучшенной итерационной процедурой. Индивидуальные особенности спектрометра автоматически учитываются применением в качестве ядра уравнения свертки экспериментально полученной на этом спектрометре одиночной спектральной C1s-линии от предельного углеводорода н-докозана $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{CH}_3$, атомы углерода в молекуле которого находятся в одном химическом окружении. При среднем уровне шума 0.7% (легко достижимом технически) количественно разрешаются линии, находящиеся на расстоянии 0.6 эВ.

Также показано:

- в широкой области кинетических энергий фотоэлектронов (в режиме постоянства энергии пропускания энергоанализатора) форма одиночных линий C1s, O1s, F1s практически одна и та же (различается только ширина);
- огибающие, полученные с применением одиночной 1s-линии и соответствующих значений спин-орбитальных констант расщепления, хорошо аппроксимируют экспериментальные спин-дублетные линии Si2p, K2p, Fe3p, Br3d, Pb4f, Au4f. Поэтому можно проводить разложение РФЭС-спектров многих других элементов, также используя в качестве ядра C1s-линию н-докозана.

Кроме того, реализован учет уширения спектральных линий вследствие неоднородной зарядки дисперсного или диэлектрического образца.

Предложенная процедура разложения спектров не требует введения априорной информации о числе, положении и амплитуде линий и может оказаться полезной и в других спектральных методах. Достоверность полученных результатов подтверждена как модельными исследованиями, так и РФЭС-исследованиями аттестованных образцов ряда неорганических и органических соединений различных классов.

СЕЧЕНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ САТЕЛЛИТОВ ВБЛИЗИ ПОРОГА

Яржемский В.Г.¹, Амусья М.Я.², Авальди Л.³, Болоньези П.³

¹Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Ленинский пр., 31, E-mail: vgyar@igic.ras.ru

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.Петербург, Политехническая, 26, E-mail: amusia@012.net.it

³Институт неорганической методологии и плазмы, Рим. Via Салариа 29.

Вследствие кулоновского межэлектронного взаимодействия фотоэлектронный спектр содержит наряду с основной линией дополнительные (спутниковые) линии. Их теоретическое описание основано на формализме диаграмм Фейнмана. Сечение фотоионизации спутника $j^{-1}s$ при ионизации атомной оболочки i за счет релаксации дается формулой:

$$\sigma_s(\omega) = \frac{D_{iq}^2(\omega)\delta(\omega - \varepsilon_q + \varepsilon_i - \varepsilon_s + \varepsilon_j)U_{si,ji}^2}{(\varepsilon_s - \varepsilon_j)^2} \quad (1)$$

Где $U_{si,ji}$ – матричный элемент кулоновского взаимодействия, а $D_{iq}(\omega)$ – сечение фотоионизации i -оболочки вне энергетической поверхности, которое рассчитывается методом ПСФО для однократной ионизации [1].

Другим каналом возбуждения такого же состояния $i^{-1}j^{-1}s$ является кулоновское взаимодействие фотоэлектрона с электронами атома, и сечение такого процесса дается формулой:

$$\sigma_k = \left(\int \frac{D_{iq'}(\omega)U_{q's,qj}\delta(\omega - \varepsilon_q + \varepsilon_i - \varepsilon_s + \varepsilon_j)d\varepsilon_{q'}}{\omega - \varepsilon_{q'} + \varepsilon_i} \right)^2 \quad (2)$$

Вблизи порога возбуждения спутника оба канала сравнимы по величине и, если конечные состояния совпадают, между ними происходит интерференция.

В настоящей работе экспериментально измерены интенсивности спутников ионизации $Ne\ 2s^2p^5(^3P)3s(^2P)$, $2s2p^5(^3P)3p(^2S)$ и $2s2p^5(^3P)3p(^2D)$ от порога ионизации до кинетической энергии 80 эВ и произведены теоретические расчеты. Интенсивности первых двух из них определяются интерференцией двух рассмотренных каналов возбуждения, а интенсивность третьего связана только со вторым каналом возбуждения.

Работа выполнена при поддержке пректа двухстороннего сотрудничества CNR-РАН.

[1]. Амусья М.Я., Чернышева Л.В., Яржемский В.Г. Поглощение фотонов, рассеяние электронов, распад вакансий. С.Петербург, Наука, 2009.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОРБИТАЛЕЙ НАНОЧАСТИЦ

Яржемский В.Г.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва,
Ленинский пр., 31, E-mail: vgyar@igic.ras.ru*

В работах академика В.И. Нефедова и Е.Ф. Кустова [1] были рассмотрены все возможные симметричные наноструктуры с точечными группами симметрии. Анализ молекулярных орбиталей (МО) для случая малой локальной симметрии атома и высокой симметрии наноструктуры выявил появление кратных неприводимых представлений (НП). Для классификации таких МО использован метод индуцированных представлений и теорема о транзитивности индукции [2,3].

Свойство транзитивности индукции означает, что два пути индуцирования НП (в нашем случае построения МО) – прямой и через промежуточную подгруппу, дают эквивалентные с точностью до унитарного преобразования НП. При этом каждая линейная комбинация приобретет дополнительное квантовое число – индекс НП промежуточной группы.

При симметрии O_h и расположении 24 атомов на диагональных плоскостях куба полный набор σ -орбиталей включает следующие НП: $A_{1g} + A_{2u} + E_g + E_u + 2T_{1u} + 2T_{2g} + T_{1g} + T_{2u}$. В качестве промежуточной подгруппы можно выбрать группу C_{3v} или C_{4v} . Индуцирование НП A из группы C_s в группу C_{3v} дает НП A_1 и E . Дальнейшее индуцирование из C_{3v} в O_h дает перечисленный выше набор МО. Однако теперь повторяющиеся НП полной группы различаются по НП промежуточной группы C_{3v} . Таким образом, получаем дополнительную классификацию повторяющихся МО по НП промежуточной группы C_{3v} : $T_{1u}(A_1), T_{1u}(E), T_{2g}(A_1)$ и $T_{2g}(E)$. Аналогично, если физически выделена группа C_{4v} , то полная классификация повторяющихся НП по промежуточной группе C_{4v} имеет вид: $T_{1u}(A_1), T_{1u}(E), T_{2g}(B_2)$ и $T_{2g}(E)$. Построены базисы МО, иллюстрирующие введенные квантовые числа и обсуждается физический смысл дополнительных квантовых чисел в наноструктурах симметрии O_h и I_h .

- [1]. Кустов Е.Ф., Нефедов В.И. Докл. РАН. 2006, Т. 410, №2, С.211.
 [2]. Altman S.L. Induced Representation in Crystals and Molecules. Point, space and nonrigid molecule groups. London: Academic Press, 1977, 387 p.
 [3]. Yarzhemsky V.G., Nefedov V.I. Int.J.Quant.Chem. 2004, V.100. P.519.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 08.03.00350.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 2

**ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И
ЭЛЕКТРОННАЯ ОЖЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ.
ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ**

ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ ФОТОИОНИЗАЦИИ ИХ ВНУТРЕННИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК

Борисенко Е.С., Кривосенко Ю.С., Мистров Д.А., Павлычев А.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, 198504, Петродворец, ул. Ульяновская, 1,
andrey.pavlychev@gmail.com*

Фотоионизация внутренних электронных оболочек свободных молекул сопровождается их колебательными и вращательными возбуждениями. Экспериментальные исследования свидетельствуют, что распределение колебательных возбуждений отклоняется от франк-кондоновского распределения, а интенсивность вращательных возбуждений возрастает с ростом кинетической энергии фотоэлектронов.

Проведено детальное исследование колебательных и вращательных возбуждений простых молекул при ионизации их К-оболочек. Показано, что основными механизмами не-франк-кондоновского поведения колебательных переходов являются (1) зависимость интерференции первичной и рассеянных фотоэлектронных волн от нулевых молекулярных колебаний [1, 2] и (2) автоионизация многоэлектронных возбуждений в континуум остовно-ионизованной молекулы [3]. Изучена зависимость интенсивности колебательных переходов от симметрии молекулярных колебаний.

Показано, что вращательные возбуждения возникают в результате отдачи при удалении фотоэлектрона и зависят от колебательно-вращательного взаимодействия и многоэлектронных возбуждений ионизируемой молекулы.

Получены аналитические соотношения и проведены расчеты вращательных и колебательных возбуждений молекул CO, N₂ и CO₂ при ионизации C, N и O 1s оболочек. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными.

- [1]. Mistrov D.A., De Fanis F., Kitajima M., et. al. Phys. Rev. A, 2003, v. 68, 022508 (6p).
- [2]. Pavlychev A.A., Mistrov D.A. J. Phys. B: At, Mol, Opt. Phys., 2009, v.42, 055103 (8p).
- [3]. Krivosenko Yu.S., Pavlychev A.A. Chem. Phys. Lett., (submitted).

**РЕЗОНАНСЫ В СПЕКТРАХ НЕПРЕРЫВНОГО
ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ ВНУТРЕННИХ
ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ И 1D
СТРУКТУР ВНЕДРЕННЫХ В УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ**

Брыкалова К.О., Виноградов А.С., Павлычев А.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, 1, 198504,
ksenia_olegovna@mail.ru*

Резонансные явления в рентгеновских абсорбционных спектрах и в спектрах фотоионизации внутренних электронных оболочек в эндоэдральных молекулах и одномерных кристаллических структурах внедренных в одно- и многостенные нанотрубки привлекают к себе повышенное внимание. В рамках приближения двухбарьерного оптического потенциала [1] проведены теоретические исследования и расчеты спектральной зависимости фотопоглощения и фотоионизации $SF_6@C_{60}$, $SF_6@C_{240}$, $SF_6@C_{540}$, $SF_6@SWCNT$ и $CO@SWCNT$ вблизи $C\ 1s$, $S\ 1s$ и $2p$ порогов ионизации. Особое внимание уделено интерференции первичной фотоэлектронной волны и волн, рассеянных на соседних атомах внедренной молекулы и атомах углерода, образующих нанотрубку. Обнаружено, что наряду с резонансами формы и конфайнмент-резонансами возникает новый тип резонансных явлений, получивших название «окон прозрачности». Показано, что, например, в $SF_6@C_{60}$ «окна прозрачности» возникают в результате образования квазистационарных состояний пространственно локализованных между фторным октаэдром и C_{60} и последующего резонансного туннелирования $S\ 1s$ и $S\ 2p$ фотоэлектронов сквозь указанную область. Спектральные особенности фотопоглощения и фотоионизации вблизи «окон прозрачности» в $1D@SWCNT$ обсуждаются. Проведен анализ экспериментальных спектров $1D@SWCNT$ с целью обнаружения указанных резонансных явлений.

[1]. Pavlychev A.A., Brykalova X.O., R. Flesch, E. Ruehl, Phys.Chem.Chem.Phys. 2006, v.8, 1914 – 1921.

Авторы благодарят РФФИ, грант № 09-02-01278а.

ОБРАТИМЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫХ C1s – СПЕКТРАХ ФУЛЛЕРИТОВ C₆₀, C₇₀ И ИХ СМЕСИ ПРИ ИХ НАГРЕВЕ И ПОСЛЕДУЮЩЕМ ОХЛАЖДЕНИИ

Гильмутдинов Ф.З., Никонова Р.М., Михайлова С.С., Ладьянов В.И.

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
ул. Кирова, 132, lasas@fti.udm.ru*

Проведенные ранее исследования фуллеритов C₆₀, C₇₀ и смеси C₆₀/C₇₀ показали значительные отличия их термической стабильности и окислительной способности. Фуллерит C₆₀ имеет меньшую термическую стабильность по сравнению с C₇₀. Еще меньшей стабильностью характеризуется смесь C₆₀/C₇₀. В данной работе методом рентгеноэлектронной спектроскопии исследованы фуллериты C₆₀, C₇₀ и их смесь (C₆₀ – 18% C₇₀) при нагреве в вакууме (10⁻⁵ Па) в интервале температур от 20 до 400 °С. Обнаружено, что экспериментально измеренные значения энергий связи C1s – спектров порошков фуллеритов в исходном состоянии при комнатной температуре существенно отличаются от известных величин для широкого класса углеродных материалов и составляют 279,4 эВ для C₆₀, 278,3 эВ для C₇₀ и 281 эВ для смеси. E_{св} C1s – спектра графита высокой чистоты в тех же экспериментальных условиях составляет 284,3 эВ. При нагреве порошков фуллеритов в камере спектрометра выше 50-100 °С наблюдается уширение и сдвиг C1s – спектров в сторону больших E_{св}. При T ≥ 200 – 400 °С значение E_{св} (C1s) стремится к характерной для углеродных материалов области 284,5-285,0 эВ, при этом C₇₀ наиболее устойчив, а смесь наименее устойчива к термическому воздействию, что согласуется с данными, полученными структурными методами. Прекращение нагрева приводит к обратимому изменению параметров C1s спектров, при этом время возврата к исходным значениям через промежуточное положение максимума спектра с E_{св} = 282 эВ зависит от температуры нагрева. В работе обсуждаются причины наблюдаемых изменений C1s – спектров и взаимосвязь полученных методом РФЭС результатов со свойствами исследованных материалов.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН.

РФЭС-ИССЛЕДОВАНИЕ ТИОМОЧЕВИННЫХ КОМПЛЕКСОВ Pt НА ПОВЕРХНОСТИ ТИОКАРБОМОИЛПОЛИСИЛОКСАНА

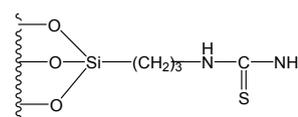
Голуб А.Я.¹, Неудачина Л.К.¹, Кузнецов М.В.², Ятлук Ю.Г.³

¹Уральский государственный университет им. А.М. Горького, Екатеринбург, Ленина, 51, alegolub@yandex.ru

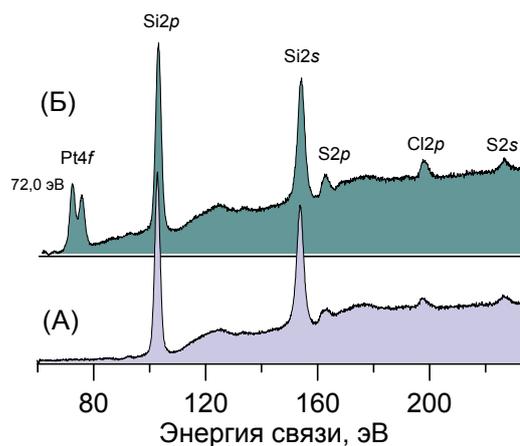
²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

³Институт органической химии УрО РАН, Екатеринбург

В Институте органического синтеза впервые золь-гель методом получен тиокарбомоилированный полисилоксан, который может быть использован для селективного извлечения благородных металлов из промышленных растворов. Нами изучены основные закономерности и установлены оптимальные условия сорбции платины (IV) синтезированным сорбентом [1]. Однако, дискуссионным остается вопрос о природе координационного центра в функциональной группе сорбента, поскольку в качестве донорных могут выступать как атомы азота, так и атом серы тиокарбамидной группы.



РФЭС-спектр полисилоксана с сорбированной платиной (рис. Б) регистрирует появление дублета Pt4f с энергией связи 72,0 эВ. Энергетическое положение спектра и соотношение энергии связи с табличными значениями свидетельствуют о существовании металла на поверхности в форме Pt²⁺.



При координации донорные атомы отдают часть своей электронной плотности центральному иону, в связи с чем следует ожидать увеличения энергии связи электронов в атомах, участвующих в комплексообразовании. Линия N1s сохраняет свою позицию при сорбции платины ($399,5 \pm 0,1$ эВ), в то время как полоса серы S2p сдвигается в сторону больших энергий связи от 161,8 эВ до 162,2 эВ. Это свидетельствует о координации платины к атому серы. Таким образом, платина (IV) взаимодействует с функциональными группами тиокарбомоилированного полисилоксана с образованием связи Pt–S, при этом платина (IV) восстанавливается до двухвалентного состояния.

[1]. Голуб А.Я., Неудачина Л.К., Ятлук Ю.Г., Бердюгин Ю.А. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2006. Т. 6. Вып. 6. С. 1151–1156.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРОВ АЛЮМИНИЯ, СОДЕРЖАЩИХ ПРИМЕСНЫЕ АТОМЫ 3d-МЕТАЛЛОВ ПОДГРУППЫ ЖЕЛЕЗА

Горбунов В.А.

*Вологодский государственный технический университет,
160000, Вологда, ул. Ленина, 15, Россия
E-mail: vagor@mh.vstu.edu.ru*

Представления о магнитных свойствах 3d-примесей в алюминиевых сплавах до сих пор имеют различные точки зрения. Как известно, свободные атомы 3d-металла имеют конечный магнитный момент, вызванный корреляцией между электронами незаполненных 3d-оболочек. Однако, этот магнитный момент значительно изменяется или практически исчезает в разбавленных 3d-примесью металлах. Причиной является результат взаимодействия между 3d-электронами и электронами проводимости металла матрицы (модель Фриделя-Андерсона виртуальных зонных состояний, virtual-bound-state (VBS) или модель кристаллического поля примесных ионов Шрифферра-Хеста. Предпринятые исследования магнитных свойств 3d-атомов в алюминии дают противоречивую информацию. Теоретическое изучение электронной структуры и магнитных свойств 3d-примесей в Al/разделилось на два типа:

- - расчеты на конечных кластерах;
- - расчеты с примесями внутри объема твердого тела (модель примесь в желе) и метод функций Грина.

Учитывая вышеописанные особенности, мы рассчитали электронную структуру [1], локальные магнитные моменты и магнитную восприимчивость примесных атомов Fe, Co, Ni в Al-х кластерах. При этом использовалась теория функционала плотности в приближении локальной спиновой плотности Vosko.

[1]. Горбунов, В.А. Электронная структура кластеров алюминия, содержащих примеси 3d-атомов Fe, Co и Ni / В.А. Горбунов, Л.И. Куркина // Известия РАН. Серия физическая, 2008 г, том 72, № 4, с.547 - 550.

РЕНТГЕНОФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ 3d-МЕТАЛЛОВ

Иванова Т.М.¹, Кочур А.В.², Шукарев А.В.³, Линко Р.В.⁴, Кискин М.А.¹,
Сидоров А.А.¹, Новоторцев В.М.¹, Еременко И.Л.¹

¹Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119991, Москва, Ленинский пр., 31, tiva@igic.ras.ru

²Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону

³Университет Умея, Химический факультет, Швеция

⁴Университет Дружбы народов, Москва

Карбоксилаты с высокоспиновыми атомами переходных металлов являются удобными объектами для исследования возможностей варьирования магнитных свойств как функции молекулярного строения комплексов. Метод рентгенофотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) был впервые использован для изучения электронной структуры и магнитного состояния гетерометаллических комплексов $MFe_2(O)(Piv)_6(HPiv)_3$, где $M=Co, Ni$. РФЭС-спектры были получены на спектрометре Kratos Axis Ultra с монохроматическим AlK_{α} излучением при температуре жидкого азота. Были записаны линии металла $M2p$, $M3p$, $M3s$, кислорода $O1s$ и углерода $C1s$. Найденная корреляция между разницей в энергии связи линий $M2p_{3/2} - M2p_{1/2}$, относительной интенсивностью сателлитов и энергиями связи, позволила идентифицировать комплексы как высоко спиновые с состоянием металла $M(II)$ и $M(III)$. Идентификация спинового состояния ионов переходных металлов проведена на основе квантовомеханических расчетов фотоэлектронных спектров в приближении изолированного иона. Выявлено влияние замены атома Ni на Co в гетерометаллических комплексах на структуру РФЭС-спектров железа и их магнитное состояние. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с данными рентгеноструктурного анализа и результатами, полученными ранее [1].

[1]. T. Ivanova, A. Naumkin, A. Sidorov, I. Eremenko, M. Kiskin, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 156-158, 200 (2007).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 09-03-00157, 08-03-00091), Программы фундаментальных исследований Президиума РАН и ОХНМ РАН.

ЭВОЛЮЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И XPS СПЕКТРОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ Fe-Bi-КОМПОЗИТАХ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ

**Илясов В.В.¹, Ершов, И.В.¹, Ляхов Н.З.², Григорьева Т.Ф.², Козаков А.Т.³,
Гуглев К.А.³**

¹ДГТУ, Ростов-на-Дону, 344000, пл. Гагарина, 1, viily@mail.ru

²ИХТТuM СО РАН, Новосибирск, 630128, ул. Кутателадзе, 18, grig@solis.nsc.ru

³НИИ Физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194,
kozakov_a@mail.ru

Изучено электронное строение вершины валентной полосы синтезированных авторами работы [1] наноструктурированных Fe-Bi-композиатов. Выполнены *ab initio* расчёты зонной структуры и DOS системы Bi-Fe для различных структурных позиций атома Bi: на поверхности (атом Bi - адсорбат); в поверхностных слоях (001) и (010) α -Fe. Расчёты выполнены методом псевдопотенциала в рамках DFT [2] с использованием пакетов (Quantum-Espresso и Wien2k) [3,4]. Изучен вероятный механизм атомарной стадии хемосорбции Bi с заполнением октапозиций ячейки α -Fe. Выполнена оптимизация атомной структуры «адсорбат Bi-Fe(001)» и получены равновесные длины связи. Для нерелаксированного состояния системы Bi/Fe(001) с атомом висмута в октапозиции (010) и в центре грани монослоя Fe(001) полная энергия составила -871,98 Ry/cell и -874,99 Ry/cell соответственно [5]. Можно предположить, что разность значений этих энергий должна соответствовать по порядку величины энергии активации процесса. Полные DOS рассмотренных выше атомных структур сопоставлены с XPS спектрами, полученными на рентгеновском фотоэлектронном микрозонде ESCALAB 250. Рассчитанные электронные энергетические спектры системы Fe-Bi выявляют тонкую структуру валентной полосы, обнаруживая её трансформацию в ряду Fe-Bi/Fe-FeBi(001)-FeBi(010)-Bi. Обсуждаются закономерности и природа эволюции электронной структуры в Fe-Bi-композиатах наноструктурированных при механической активации.

[1]. N. Lyakhov, T. Grigorieva, A. Barinova et al. J. Mat. Sci. **39**, 5421 (2004).

[2]. W. Kohn, and L.J. Sham. Phys. Rev. A **140**, 1133 (1965).

[3]. S. Baronu, A. Dal Corco, S. de Gironcoli et al. <http://www.pwscf.org/>.

[4]. P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, Wien2k, An Augmented-Plane-Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn Wien, Austria, 2001).

[5]. В.В. Илясов, И.В. Ершов, Н.З. Ляхов, Т.Ф. Григорьева. Тр. конф. FBMT-2009, Novosibirsk.

**РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫЙ АНАЛИЗ АТОМНОГО СТРОЕНИЯ
ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИЛИКАТНЫХ ПЛЕНОК**

Канунникова О.М., Шаков А.А., Карбань О.В., Сурнин Д.В.

*Физико-технический институт УрО РАН,
Россия, 426000, Ижевск, ул. Кирова, 132. e-mail: uds@pti.udm.ru*

В настоящее время золь–гель–технология является одним из наиболее интенсивно развивающихся и перспективных методов получения силикатных пленок. Тонкие пленки, полученные этим методом, широко используются в технике и микроэлектронике в качестве отражающих и защитных покрытий, основных компонентов газовых сенсоров. Эксплуатационные свойства устройств с силикатными пленками определяются составом и структурой этих пленок.

В данной работе методами рентгено- и орбитально-электронной спектроскопии, атомно-силовой микроскопии, растровой электронной микроскопии, определения краевого угла смачивания исследованы морфология, состав и тонкая структура поверхностных слоев золь-гель силикатных пленок. Обсуждается зависимость атомной структуры силикатных пленок (статистика кремнийкислородных структурных единиц среднего порядка) от состава исходного золя (тетраэтоксисилан, краунэфир), режимов термообработки, легирующих элементов (Pt, Pd, Mn).

Авторы выражают благодарность д.х.н. О.А. Шиловой и к.х.н. Хамовой Т. (Институт химии силикатов, г. С.-Петербург) за приготовление образцов силикатных пленок.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА ИНТЕРФЕЙСНЫХ ОБЛАСТЕЙ ОКСИДНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ КЕРАМИК МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ И ФОНОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Карбань О.В.^{1,2}, Саламатов Е.И.¹, Хазанов Е.Н.², Канунникова О.М.¹,
Хасанов О.Л.³

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, E-mail: uds@pti.udm.ru*

² *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*

³ *Томский политехнический университет, Томск*

Плотные керамические материалы с высокой степенью дисперсности обладают большим соотношением поверхность/объем, что, как правило, приводит к увеличению роли физико-химических процессов, протекающих в интерфейсных областях на всех этапах изготовления керамики (исходный порошок – компактирование – спекание). Формирование структуры керамических материалов в процессе синтеза во многом зависит от свойств интерфейсных областей, отличных от объема зерен и выполняющих роль второй фазы, поэтому контроль формирования состава и структуры межзеренного слоя представляется одним из ключевых моментов создания микро- и наноструктурных материалов с заданными свойствами.

В данной работе методами рентгеноэлектронной и фононной спектроскопии исследованы механизмы формирования интерфейсных областей наноструктурных керамик TiO_2 , $\text{ZrO}_2:\text{Y}_2\text{O}_3$, $\text{BaTi}_4\text{O}_9+\text{BaWO}_4$, полученных методом компактирования, в зависимости от условий синтеза. Определены химический и структурно-фазовый состав, толщина, плотность и акустический импеданс интерфейсных областей. Оценено влияние состава интерфейсных областей на рост зерен. Для адекватной интерпретация экспериментальных данных фононной спектроскопии нами развита модель описания фононной подсистемы таких материалов, построенная на основе решения задачи рассеяния фононов на случайно распределенных в пространстве сферических оболочках, плотность и упругость которых отличаются от параметров среды, что является принципиальным отличием от модели рассеяния фононов, например, на однородных сферах.

**РЕНТГЕНОВСКИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ПОЛИ- И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИХ
СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ**

**Коротаев Е.В.¹, Федоренко А.Д.¹, Мазалов Л.Н.¹, Крючкова Н.А.¹,
Диков Ю.П.², Соколов В.В.¹, Филатова И.Ю.¹**

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, 630090, E-mail: Jodow@rambler.ru*

²*Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и
геохимии РАН, Старомонетный пер., 35, Москва, 119017*

В настоящее время одним из развивающихся направлений электроники является спинтроника. Большие надежды в данной области связаны с использованием отрицательного магнетосопротивления ОМС некоторых соединений. Примером соответствующих новых материалов могут служить слоистые дисульфиды хрома-меди, допированные ванадием или железом $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0.1-0.25$), механизм возникновения ОМС в которых в настоящее время обсуждается.

В ходе проведенных ранее исследований было установлено, что по мере увеличения массовой доли ванадия происходят процессы перераспределения зарядовой плотности в данных веществах. В то же время результаты исследования этих веществ различными физическими методами показывают, что их свойства в сильной степени определяются условиями синтеза, физическим состоянием (порошок, керамика, монокристалл), способами приготовления образцов для исследования. В этой связи в настоящей работе были проведены рентгеновские фотоэлектронные исследования данных веществ с высоким разрешением. Были получены $\text{Cu-}2p_{3/2}$, $\text{Cr-}2p_{3/2}$, $\text{S-}2p_{3/2}$, и $\text{V-}2p_{3/2}$ -линии исследуемых порошковых, поли- и монокристаллических веществ.

Было проведено послойное исследование веществ, получены рентгеноэлектронные и Оже-спектры.

Результаты рентгеноэлектронных исследований допированных слоистых дисульфидов хрома-меди показывают, что обнаруженное ранее электронное фазовое расслоение, приводящее к наличию двух зарядовых состояний атомов меди и хрома ($\text{Cu}^{1+}\text{Cr}^{3+}\text{S}$) и ($\text{Cu}^{2+}\text{Cr}^{2+}\text{S}$) характерно только для порошкообразных и керамических образцов.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТИАКАЛИКС[n]АРЕНОВ МЕТОДАМИ РФЭС, РЭС И КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Крючкова Н.А.¹, Мазалов Л.Н.¹, Коротаев Е.В.¹, Федоренко А.Д.¹,
Торгов В.Г.¹, Костин Г.А.¹, Кальченко В.И.²

¹Учреждение Российской академии наук Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, E-mail: knatali@ngs.ru

²Институт органической химии НАН Украины, Киев, Украина

Тиакаликсарены представляют большой интерес для создания макроциклических металлорецепторов благодаря новым возможностям, связанным с введением мостиковых атомов серы, которые являются дополнительными донорными центрами и влияют на геометрию и электронное строение молекулы в целом. В настоящей работе проведено комплексное исследование электронного строения (РФЭС, РЭС, квантово-химические расчеты) ряда тиакаликсаренов и комплексов на их основе. Рентгеновские фотоэлектронные $S2p_{3/2}$, $O1s$, $P2p_{3/2}$ спектры атомов, входящих в состав изучаемых комплексов тиакаликсаренов, а также спектры $Pd3d_{5/2}$ и $Cl2p_{3/2}$ для комплексов тиакаликсаренов с палладием были получены на электронном спектрометре ESCA-Specs с использованием немонохроматизированного излучения $AlK\alpha$ ($h\nu = 1486.6$ эВ). В данной работе также были получены мягкие рентгеновские эмиссионные $K\alpha_{12}$ и $K\beta$ -спектры атомов серы, входящих в состав изучаемых комплексов тиокаликсаренов. В рамках теории DFT/B3LYP проведены квантовохимические расчеты электронной структуры изучаемых соединений. На основании полученных результатов были построены теоретические рентгеновские $K\beta$ -спектры атомов серы, позволяющие определить энергии связи ВЗМО и степень участия валентных АО атомов комплексов в соответствующие МО.

Анализ РФЭС, РЭС и квантово-химического исследования показал, что зарядовое состояние атомов серы в тиакаликсаренах меняется незначительно. В комплексах тиакаликсаренов с палладием электронная плотность на атомах серы увеличивается вследствие их координации к палладию.

**РЕЗОНАНСНЫЙ ОЖЕ-ЭФФЕКТ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ,
ИССЛЕДОВАННЫЙ В РАМАНОВСКОМ РЕЖИМЕ**

Лагутин Б.М.¹, Петров И.Д.¹, Демёхин Ф.В.¹, Демёхина Л.А.²,
Сухоруков В.Л.¹, Шморанцер Х.³

¹*Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, пл. Ростовского Стрелкового Полка
Народного Ополчения, 2, bml@rgups.ru*

²*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

³*Технический университет Кайзерслаутерн, Германия*

Разработана теория резонансной фотоионизации атомов под действием поляризованного синхротронного излучения при энергии возбуждения, соответствующей автоионизационным резонансным состояниям. Рассчитаны интенсивности линий в фотоэлектронном спектре, параметры углового распределения фотоэлектронов, параметры ориентации и выстраивания ионов в конечном состоянии фотоионизации. Учтена интерференция между резонансными и нерезонансными каналами фотоионизации. Амплитуда перехода рассчитана с учетом немонотонной корреляции в движении электронов, что существенно перераспределяет амплитуды переходов между парциальными каналами фотоионизации. Результаты нашего расчета находятся в существенно лучшем согласии с недавними экспериментами, чем опубликованные ранее расчеты других авторов.

В то же время, в ряде случаев отличие измеренных и вычисленных значений существенно, доходя до различия в знаке.

В работе сделано предположение и теоретически показана важная роль резонансных состояний многократного возбуждения, которая до сих пор не учитывалась в резонансном оже-эффекте. Физическая причина этого заключена в специфике их корреляционного взаимодействия с резонансами однократного возбуждения через непрерывный спектр конечных состояний. Оно аномально велико и не дает обычно возникающего порядка малости в рассчитываемые амплитуды перехода. Влияние исследованных состояний многократного возбуждения может быть велико и в других физических процессах.

РФЭС – ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕВРАЩЕНИЙ, ПРОИСХОДЯЩИХ ПРИ ИММОБИЛИЗАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ Pd В ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦАХ

Ляхович А.М.

*Учреждение Российской академии наук,
Физико – технический институт УрО РАН,
426001, Ижевск, ул. Кирова, 132, E-mail: alalam@mail.ru*

Материалы, содержащие наноразмерные частицы металлов, интенсивно исследуются в последние годы в связи с проявлением ими уникальных физико-химических свойств при переходе в область нанометровых размеров. Особый интерес такие системы представляют для катализа благодаря большой доле поверхностных атомов по отношению к общему числу атомов, составляющих наноразмерную частицу, и возможности управлять каталитическими свойствами, варьируя размерами наночастицы. Нуль-валентные комплексы и наночастицы Pd широко известны как эффективные и селективные катализаторы многих органических реакций. Основная проблема при использовании таких активных наночастиц металлов – их агрегативная неустойчивость и склонность к образованию агломератов, поэтому их обычно закрепляют на поверхности носителей или стабилизируют лигандами. Одним из перспективных методов получения металлополимерных нанокомпозитов является полимер-опосредованный синтез, основанный на термической поли- и сополимеризации металлосодержащих мономеров с последующим контролируемым термолизом образующихся продуктов, что позволяет совмещать в одну стадию формирование наночастицы металла и стабилизирующую ее полимерной оболочки *in situ* [1].

Методом РФЭС исследованы превращения полимер-иммобилизованных наночастиц Pd на поверхности неорганического носителя (сажа и SiO₂) в процессе фронтальной полимеризации акриламидного комплекса нитрата Pd.

[1]. Г.И. Джардималиева, В.Г. Дорохов, Н.Д. Голубева и др. // Известия РАН, сер. хим., 2009, № 10, с. 1057.

РФЭС И АСМ ИЗУЧЕНИЕ ОТОЛИТОВ РЫБ ОЗЕРА БАЙКАЛ**Михлин Ю.Л.¹, Романченко А.С.¹, Сапожникова Ю.П.²**¹*Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск,
ул. К. Маркса, 42, alexrom@icct.ru*²*Лимнологический институт СО РАН, Иркутск*

Природные бионеорганические композитные материалы привлекают все большее внимание широкий интерес не только в биологии, но и в материаловедении. Нами были изучены отолиты омуля, голомянки, широколобки и желтокрылки, обитающих в озере Байкал. Оtolиты, минеральная часть которых представляет собой карбонат кальция различных полиморфных модификаций, были охарактеризованы методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, XANES, а также атомно-силовой микроскопии (АСМ), в компактном состоянии и после дробления. АСМ показывает, что отолиты образованы кристаллинами шарообразной или вытянутой формы и пластинками, с поперечными размерами от 50 до нескольких сотен нанометров. Спектры показывают присутствие на поверхности С, О, Са, а также Na, N, P и следов Si и Mg, которые входят в состав как минеральной части, так и биологических веществ, доля которых выше на поверхности неизмельченных отолитов. В спектрах С 1s полосы сопоставимой интенсивности принадлежат органическому веществу (около 285 эВ) и карбонат-ионам (289,8 эВ). Ионное травление изменяет их соотношение в пользу карбоната, но интенсивной первой линии остается на уровне 40-50%, то есть органическое вещество входит в состав отолита. После ионной бомбардировки наблюдается разложение карбоната с образованием оксида кальция. Различия между отолитами разных рыб состоят, прежде всего, в различном содержании органической части. В литературе сообщалось, что РФЭС позволяет различить полиморфные модификации карбоната кальция (кальцит, ватерит, арагонит) по энергиям связи Са 2р, однако конкретные значения приводились противоречивые. Линии Са 2р_{3/2} отолитов имеют энергии связи в пределах 347.5 ± 0.2 эВ, что находится между сообщавшимися в литературе для арагонита и ватерита, но заметно выше, чем у кальцита (346.5 эВ). Надежно различать ватеритовую и арагонитовую форму отолитов не удастся, по-видимому, и потому, что в отолитах содержится смесь нескольких модификаций СаСО₃ и органическое вещество. На поверхности неизмельченных отолитов большая часть кальция находится не в карбонатной, а в какой-то другой форме.

Работа выполнена при поддержке ИП СО РАН №95.

ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИЯ КАК СЛЕДСТВИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО РАСПАДА РАЗЛИЧНЫХ ИЗОМЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛЫ

Морозов В.А., Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991 Москва, morozov@mail.ioc.ac.ru*

В связи с ростом требований теории молекулярной электроники в последнее время много внимания уделяется совершенствованию теоретических подходов при описании электронной структуры молекул, в частности, при изучении возможности установления новых механизмов фотоизомеризации. Изучение такой возможности подразумевает, прежде всего, учет не принимавшихся во внимание ранее видов взаимодействия между различными изомерными состояниями молекулы, которое приводит к переходам между ними. Цель настоящего сообщения – обратить внимание на возможность фотоизомеризации, осуществляющейся вследствие переходов между разделёнными энергетическим барьером различными изомерными состояниями молекулы в её возбужденном электронном состоянии при коллективном нерадиационном распаде этих изомерных состояний в общий тепловой резервуар, образуемый внутримолекулярными колебательными модами. Проведено математическое моделирование динамики заселённости состояний 6-ти уровневой модели молекулы с двумя изомерными формами, взаимодействующей со световым импульсом, который приводит к электронному возбуждению молекулы. Моделирование основано на численном решении уравнений для редуцированной матрицы плотности молекулы с релаксационным оператором в наиболее общей известной форме (по Линдбладу). Результаты моделирования иллюстрируют действие механизма фотоизомеризации за счет упомянутого коллективного распада состояний изомеризации при различных значениях параметров модели молекулы и импульса облучения. Эффективность действия такого механизма фотоизомеризации максимальна при вырождении колебательных подуровней энергии начального и конечного изомерных состояний в резонансно возбужденном электронном состоянии молекулы.

**РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ КОНЬЮГАТОВ АЛЬБУМИНА ЧЕЛОВЕКА**

Наймушина Е.А.¹, Кожевникова О.В.¹, Шабанова И.Н.², Барсуков А.К.¹

¹*Удмуртский государственный университет, Ижевск, 426034,
Университетская, 1, E-mail: xps@fti.udm.ru*

²*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

Проведено изучение влияния температуры и степени модификации на форму рентгеноэлектронных спектров альбумина человека. Исследовались нативная форма белка и модифицированная совиалем (сополимер винилпирролидона с диацеталем акролеина).

Исследования проводились на уникальном рентгеноэлектронном магнитном спектрометре. Преимущество электронного магнитного спектрометра по сравнению с электростатическими спектрометрами заключается в конструктивном отделении энергоанализатора магнитного типа от вакуумной камеры спектрометра, что позволяет применять различные способы воздействия на образец (сопровождающиеся интенсивным выделением агрессивных газовых потоков) в вакуумном объеме спектрометра без ущерба для фокусирующих свойств прибора.

Изучались C1s, N1s, O1s спектры внутренних уровней образцов нативной и модифицированных форм альбумина при комнатной температуре, а также полученные в ходе нагрева до 200°C. Для нагрева образца служила печь, находящаяся в контакте с образцом по всей его площади.

Немодифицированный альбумин изменяет структуру, определяемую по спектрам C1s и N1s при нагреве выше 70-80°C. В его составе уменьшается содержание азота, ковалентно связанного с водородом (NH₃, NH₂). При модифицировании альбумина совиалем (конъюгат) термостабильность альбумина повышается, и изменение структуры рентгеноэлектронных спектров наблюдается лишь при температуре ~ 200°C.

На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что одним из следствий ковалентного связывания белка с совиалем является повышение устойчивости сополимера к термоинактивации.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ И ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРЕДМЕТОВ АРХЕОЛОГИЧЕСКОГО КЛАДА ЮВЕЛИРА КУЗЕБАЕВСКОГО ГОРОДИЩА

Останина Т.И.¹, Маратканова А.Н.², Канунникова О.М.²

¹ *Национальный музей Удмуртской Республики им. К. Герда, Ижевск*

² *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

Контакты пришлых народов и местного финно-угорского населения оказали взаимное влияние на формирование этносов, оказавшихся впоследствии на больших расстояниях друг от друга. Именно поэтому нерешенные проблемы смешанных культур остаются актуальными для археологов, историков, лингвистов, занимающихся историей удмуртского и венгерского народов. Данная работа является частью комплексного исследования материалов Кузебаевского городища, которое относится к немногочисленным памятникам северно-восточной окраины ареала именьковской и северо-западной окраины ареала кушнаренковской и караякуповской культур, которые сформировались во времена Великого переселения [1,2].

Исследованы составы некоторых материалы, обнаруженные на месте мастерской ювелира – печать, мастика на поверхности наковальни, обломок стеклянного сосуда и остатки масла на внутренней стороне осколка, небольшой слиток из отходов цветного металла.

На основании анализа составов исследованных предметов обсуждаются предположения об их происхождении.

Работа поддержана грантом РФФИ-урал 10-06-9607.

[1]. Останина Т.И. Кузебаевское городище (IV-V, VII вв.). Каталог археологической коллекции. Ижевск, 2002, 112 с.

[2]. Останина Т.И. Finno-Ugrica, 2007, №10Б с.125-127.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РФЭС ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФОРМ
НАХОЖДЕНИЯ ЗОЛОТА В МИНЕРАЛАХ****Смагунов Н.В., Таусон В.Л.***ИГХ СО РАН, Иркутск. E-mail: nicksm@igc.irk.ru*

Известно, что РФЭ-спектроскопия недостаточно чувствительна для определения золота в рудных минералах. Самородное золото и поверхностные пленки металла являются тривиальными исключениями, поскольку Au в них находится в нуль-валентной форме и ничего не говорит об условиях образования самих рудных минералов. В связи с исследованиями по растворимости золота в минеральных матрицах возник вопрос, каково должно быть минимальное содержание Au в минерале, чтобы его можно было обнаружить на стандартной аппаратуре РФЭС. Критерием считали достаточно четкий дублет Au 4f, надежно превосходящий фон и мало искаженный (в смысле соотношения интенсивностей компонентов 7/2 и 5/2). Объектами исследования были синтетические кристаллы Au-содержащего аргентита (Ag_2S), синтетические и природные (с золоторудных месторождений) кристаллы пирита (FeS_2) и магнетита (Fe_3O_4). Содержания золота устанавливали методами ААС и РСМА. В Ag_2S золото обнаруживается вполне надежно при средних его содержаниях 0,2-0,5 мас.% (0,08-0,2 ат.%). Разложение спектра позволяет установить две его формы – Au(0) и Au(I). В природном пирите слабые пики 4f обнаруживаются только в образцах с содержаниями Au более ~0,3 мас.% (0,06 ат.%); они лишь незначительно превышают фон. По данным РСМА, в поверхностных слоях кристаллов синтетического пирита Au находится на уровне предела обнаружения метода (~0,01 %); дублет 4f выражен локальным повышением фона. Эти данные относятся к поверхностной неавтономной фазе (~0,5 мкм), и если учесть глубину анализа РСМА (~10 мкм), то получим, что ~0,2 мас.% Au (0,04 ат.%) еще недостаточно для появления четкого дублета Au 4f. В магнетите при тех же условиях дублет надежно превосходит фон, но имеет нарушенное соотношение компонент. Таким образом, для применения РФЭС к анализу форм золота в минералах необходимо, чтобы его содержания были не ниже 0,06-0,08 ат.%; при этом надежность определения зависит от однородности распределения элемента. *Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант № 10-05-00473-а).*

**ПРОТЯЖЕННЫЕ ТОНКИЕ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ВТОРИЧНЫХ
ЭЛЕКТРОНОВ И СПЕКТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ
ОКСИДОВ 3d-МЕТАЛЛОВ**

Сурнин Д.В., Бакиева О.Р., Гай Д.Е.

*Физико-технический институт Уральского Отделения РАН, Ижевск
lasas@fti.udm.ru*

Получены протяженные тонкие структуры спектров вторичных электронов (SEEFs) и спектров энергетических потерь (EELFS) 3d-металлов и их стехиометрических оксидов (Fe, Ni, Cu). Проведено сравнение между спектрами вторичных электронов и спектрами энергетических потерь как 3d-металлов, так и их оксидов. Показано различие между механизмами формирования протяженных тонких структур спектров вторичных электронов и спектров энергетических потерь электронов.

**РФЭС-ИССЛЕДОВАНИЯ ПАССИВНЫХ ПЛЕНОК НА
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ Fe
И КАРБИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

**Сюгаев А.В.¹, Канунникова О.М.¹, Агафонов А.Н.², Лялина Н.В.¹,
Решетников С.М.²**

¹Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
ул. Кирова, 132, e-mail: uds@pti.udm.ru

²Удмуртский государственный университет, Ижевск,
ул. Университетская, 1, e-mail: smr41@mail.ru

Карбидостали, которые представляют собой композиты с карбидной упрочняющей фазой в вязкой металлической матрице, относятся к числу перспективных композиционных материалов. Физико-химические свойства карбидосталей определяются дисперсностью и объемным содержанием карбидной фазы. С этой точки зрения представляет интерес получение и исследование наноструктурированных аналогов карбидосталей, полученных методом механического сплавления.

Объектами исследования являлись нанокристаллические компактированные материалы Fe – карбиды железа, титана, ванадия и ниобия, полученные магнитно-импульсным прессованием порошковых систем, приготовленных методом механоактивации.

Установлено существенное влияние наноразмерных включений карбидных фаз на пассивационные характеристики железной матрицы. В частности, для систем Fe-TiC в нейтральных средах наблюдалось значительное снижение токов в области активного растворения, что свидетельствует о более легкой пассивации материалов. РФЭС-исследованиями установлено присутствие в пассивных пленках смешанных оксидов FeO·TiO₂. Механизм стабилизирующего действия FeO·TiO₂ обсуждается.

Работа поддержана программой ОФН «Физика новых материалов и структур» «Научные основы создания объемных наноконпозиционных коррозионно-стойких материалов на основе железа с тугоплавкими фазами внедрения».

СТРУКТУРА РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫХ, РЕНТГЕНОВСКИХ О(F)K α -ЭМИССИОННЫХ И ОКLL ОЖЕ-СПЕКТРОВ ThF₄ И ThO₂

Тетерин А.Ю.¹, Рыжков М.В.², Тетерин Ю.А.¹, Курмаев Э.З.³, Маслаков К.И.¹,
Иванов К.Е.¹, Федоренко В.В.³, Елохина Л.В.³

¹РНЦ «Курчатовский институт», Москва, teterin@ignph.kiae.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, ryz@ihim.uran.ru

³Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, kurmaev@ifmls.uran.ru

В настоящей работе проанализирована структура рентгеноэлектронных (РЭС), рентгеновских О(F)K α -эмиссионных (РСЭ) и ОКLL Оже-спектров ThF₄ и ThO₂ с учетом результатов релятивистских расчетов их электронного строения с целью изучения плотности состояний О(F)2s,2p-электронов в этих соединениях. На основании данных РЭС и РСЭ показано, что заполненные состояния О(F)2p-электронов в основном наблюдаются в диапазоне энергий связи внешних валентных молекулярных орбиталей от 0 до ~13 эВ, а заполненные состояния О(F)2s-электронов – в пределах энергий связи внутренних валентных молекулярных орбиталей от ~13 до ~35 эВ. Найдено, что спектр ОКLL Оже-электронов кислорода ThO₂ состоит из трех структурированных линий, отражающих ОКL₂₋₃L₂₋₃ (O1s ← O2p), ОКL₁L₂₋₃ (O1s ← O2s,2p) и ОКL₁L₁ (O1s ← O2s) электронные переходы. Ширина ОКL₂₋₃L₂₋₃ Оже-линии, в частности, отражает ширину полосы заполненных состояний O2p-электронов ($\Gamma = 3.1$ эВ) и O1s-электронов ($\Gamma = 1.4$ эВ) в спектре РЭС. Ширина с наиболее сложной структурой ОКL₁L₂₋₃ Оже-линии отражает ширину полосы заполненных состояний O2s-, O2p-электронов и O1s-электронов, а ширина ОКL₁L₁ Оже-линии – O2s- и O1s-электронов спектров РЭС. В связи с этим, следует ожидать, что структура ОКL₁L₁ Оже-линии будет более сложной для оксидов, для которых наблюдается образование ВВМО. Так, для ThO₂ диапазон энергий для заполненных состояний O2s-электронов из-за образования ВВМО увеличивается примерно от 1 до 9.1 эВ (данные РЭС). В этом случае наблюдается заметное уширение линий в спектре Оже-электронов, отражающих их переходы с состояний O2s-электронов. Действительно, в ОКL₁L₁ Оже-спектре ThO₂ наблюдается вместо одиночной линии явно выраженная более сложная структура, чем в соответствующем спектре Al₂O₃. Это – еще одно экспериментальное подтверждение образования ВВМО в ThO₂.

Работа поддержана грантами РФФИ: № 08–03–00314 и № 08-02-00148.

**СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ЭМИССИИ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
UO₂, UO_{2+x} И U₃O₈ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ СИ
ВБЛИЗИ O_{4,5}(U)-ПОРОГА ПОГЛОЩЕНИЯ**

**Тетерин А.Ю.¹, Рыжков М.В.², Тетерин Ю.А.¹, Маслаков К.И.¹,
Райх Т.³, Молодцов С.Л.⁴**

¹РНЦ «Курчатовский Институт», Москва, teterin@ignph.kiae.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

³Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Mainz, Germany

⁴Technical University Dresden, Dresden, Germany

Изучена структура спектров резонансной эмиссии валентных электронов (РЭЭ) оксида UO₂, возникающая при возбуждении синхротронным излучением вблизи O_{4,5}(U)-порога поглощения при ~ 100 эВ и ~ 110 эВ [1], с учетом рентгеновского O_{4,5}(U)-спектра поглощения UO₂ и количественной схемы молекулярных орбиталей, полученной на основании данных рентгеноэлектронной спектроскопии и результатов релятивистского расчета электронной структуры UO₂. Для сравнения была изучена структура спектров РЭЭ UO_{2+x} и U₃O₈ и обнаружено влияние на нее химического окружения урана в оксидах. Возникновение такой структуры отражает процессы возбуждения и распада с участием U5d- и электронов внешних валентных МО (ВМО, от 0 до ~13 эВ) и внутренних валентных МО (ВВМО, от ~13 до ~ 35 эВ) изученных оксидов. Отмечается, что спектры РЭЭ отражают парциальную плотность состояний U6p- и U5f-электронов. На основании структуры спектров РЭЭ показано, что U5f-электроны участвуют непосредственно в химической связи оксидов урана и локализованы в пределах ВМО, что приводит к увеличению интенсивности спектров электронов ВМО при резонансах. Найдено, что U6d-электроны локализованы у дна внешней валентной зоны при 10.8 эВ. Подтверждено, что U6p-электроны эффективно участвуют в образовании ВВМО, что приводит к возникновению при резонансах структуры в области энергий электронов ВВМО, которая зависит от химического окружения урана в рассмотренных оксидах.

- [1]. Teterin Yu.A., Utkin I.O., Teterin A.Yu., Reich T., Hillibrecht F.U., Molodtsov S.L., Varyahalov A.Yu., Gudat V., Proc. of the 5th International YUNSC-2004, Belgrade, Serbia and Montenegro, Sep. 27 – 30, 2004. Ed. D.P. Antic. Belgrade: VINCA INS, YuNS, 2005. P. 249 – 252.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08–03–00314.

СТРУКТУРА РЕНТГЕНОВСКОГО СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВБЛИЗИ $O_{4,5}(\text{Th})$ -ПОРОГА И РЕЗОНАНСНОЙ ЭМИССИИ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ThO_2

Тетерин А.Ю.¹, Рыжков М.В.², Тетерин Ю.А.¹, Маслаков К.И.¹,
Райх Т.³, Молодцов С.Л.⁴

¹РНЦ «Курчатовский Институт», Москва, teterin@ignph.kiae.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, ryz@ihim.uran.ru

³Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Mainz, Germany,

tobias.reich@uni-mainz.de

⁴Technical University Dresden, Dresden, Germany,

molodtsov@physik.phy.tu-dresden.de

С учетом тонкой структуры рентгеноэлектронного спектра, рентгеновского $O_{4,5}(\text{Th})$ -спектра поглощения, содержащего низкоэнергетическую компоненту при ~ 90 эВ, связанную с вакантными состояниями $\text{Th}5f$ -электронов, и данных релятивистского расчета электронного строения диоксида тория проанализирована структура его спектров резонансной эмиссии валентных электронов. Такие спектры наблюдаются при возбуждении синхротронным излучением ($70 < h\nu < 140$ эВ) вблизи $O_{4,5}(\text{Th})$ -порога поглощения в диапазоне энергий связи электронов ThO_2 от 0 до ~ 35 эВ [1]. Вблизи $O_{4,5}(\text{Th})$ -порогов резонансного поглощения при ~ 90 эВ и ~ 102 эВ происходит сильное возрастание интенсивности линий такого спектра. Возникновение интенсивной структуры спектра при резонансе отражает процессы возбуждения и распада с участием $\text{Th}5d$ - и электронов внешних валентных (ВМО, от 0 до ~ 13 эВ) и внутренних валентных (ВВМО, от ~ 13 до ~ 35 эВ) молекулярных орбиталей. Эти процессы связаны с гигантскими Костера-Кронига переходами с участием электронов валентных и внутренних оболочек. Структура резонансных спектров эмиссии отражают парциальную плотность состояний $\text{Th}5f$ - и $\text{Th}6p$ -электронов. Увеличение интенсивности линии электронов ВМО подтверждает предположение о присутствии в этой области энергий заполненных состояний $\text{Th}5f$ -электронов, а наличие и размытие структуры в области энергий связи электронов от ~ 13 до ~ 35 эВ связано с состояниями $\text{Th}6p$ -электронов ВВМО в ThO_2 .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08–03–00314.

- [1]. Teterin Yu.A., Utkin I.O., Teterin A.Yu., Reich T., Hillibrecht F.U., Molodtsov S.L., Varyahalov A.Yu., Gudat V., Proc. of the 5th International YUNSC-2004, Belgrade, Serbia and Montenegro, Sep. 27 – 30, 2004. Ed. D.P. Antic. Belgrade: VINCA INS, YuNS, 2005. P. 249 – 252.

ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НЕКОТОРЫХ β -ДИКЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА

Тихонов С.А., Вовна В.И., Львов И.Б.

Дальневосточный государственный университет, Владивосток,
ул. Суханова, 8, vovna@vido.dvqu.ru

Изучено электронное строение относительно простых представителей обширного класса комплексов дифторида бора, обладающих интенсивной люминесценцией. Метод УФ фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) совместно с квантово-химическими расчетами дают обширную информацию о природе верхних электронных уровней соединений I-VI.

$F_2B - OCR_1 - CX - CR_2O -$

- | | |
|---|--|
| I. X=H, R ₁ =R ₂ =CH ₃ | IV. X=H, R ₁ =R ₂ =C ₆ H ₅ |
| II. X=Br, R ₁ =R ₂ =CH ₃ | V. X=H, R ₁ =CH ₃ , R ₂ =4-MeC ₆ H ₄ |
| III. X=H, R ₁ =CH ₃ , R ₂ =C ₆ H ₅ | VI. X=H, R ₁ =CH ₃ , R ₂ =2.4-Me ₂ C ₆ H ₃ |

Соединение II позволяют изучить влияние Br на уровни хелатного цикла, а III – VI – взаимодействие π -систем хелатного цикла и заместителей.

Спектры получены на спектрографе ЭС-3201 с источником излучения HeI, расчет выполнен в приближении ТФП (функционал V3LYP). В таблице приведены значения вертикальных ЭИ и расчетные энергии орбиталей Кона-Шема (с поправкой на 2 эВ) для двух верхних уровней хелатного цикла, атома Br и фенильных циклов. Метод ТФП показал разрешенное симметрией значительное смешивание как обеих n -орбиталей кислорода с несвязывающими АО фтора, так и орбиталей заместителей Br и Ph с π -, n -, и σ -орбиталями хелатного цикла.

Таблица. Вертикальные ЭИ и энергии МО Кона-Шема (эВ) для соединений I – IV

МО	I		II		III		IV	
	ЭИ	ϵ_i	ЭИ,	ϵ_i	ЭИ,	ϵ_i	ЭИ,	ϵ_i
$b_1(\pi)$	9.84	9.40	9.43	9.48	9.28	9.10	8.99	8.98
$b_2(n)$	11.38	10.77	11.9	11.50	11.6	10.73	11.03	10.78
Br(3p) C ₆ H ₅ (π)			11.06	10.66	9.82	9.60	10.2	9.62
			11.9	11.66	10.15	9.93	10.2	9.63
							10.2	9.80
							10.4	10.08

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 3

**РЕНТГЕНОВСКАЯ ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ.
EXAFS И NEXAFS (XANES)**

**К-СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ АЛЮМИНИЯ И КРЕМНИЯ
В РЯДЕ ЦЕОЛИТОВ И МИНЕРАЛОВ.
АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ ИСКАЖЕНИЙ.**

Авакян Л.А., Храпко В.В., Срабионян В.В., Жучков Д.В., Бугаев Л.А.

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5,
laavakyan@sfedu.ru*

К-спектры поглощения алюминия и кремния в ряде цеолитов и минералов рассчитаны как с использованием МТ-приближения для потенциала многоатомной системы, так и с помощью более общего подхода, реализованного в программном комплексе FDMNES [1] и основанного на решении уравнения Шредингера методом конечных разностей. Получено хорошее согласие теоретических спектров, рассчитанных в не МТ-приближении, с экспериментальными, что позволило использовать FDMNES для расчёта спектров, соответствующих различным искажениям локальной атомной структуры в цеолитах бета и морденитах при увеличении содержания алюминия. Модели структурных искажений, сопоставляемые в ходе прямых расчетов спектров, использовались также при Фурье-анализе Si K-XANES спектров изучаемых цеолитов. С помощью такого подхода установлено, что при увеличении концентрации алюминия эти атомы появляются среди «вторых ближайших соседей» поглощающего атома кремния, что приводит к искажению координирующего кислородного тетраэдра и к изменению расстояний Si-O-Al. Структурные параметры Si-O связей для первой координационной сферы поглощающего атома кремния, а также параметры Si-Si и Si-Al связей для вторых соседей, определены с помощью разработанной методики, при которой неструктурные параметры оптимизации устанавливались для модельных образцов с пренебрежимо малым содержанием алюминия.

[1]. Joly Y., Phys. Rev B, 2001, v.63, p.125120.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ЗА $L_{2,3}$ КРАЕМ РУТЕНИЯ

Альперович И.Г.¹, Пушкарь Ю.Н.², Душе М.², Солдатов А.В.¹

¹*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону,*

Alperovich.igor@gmail.com

²*Университет Пердью, США, шт. Индиана*

Несмотря на значительный прогресс в изучении спектров рентгеновского поглощения в ближней области (международный термин «XANES»), анализ L-краев переходных металлов до сих пор остается теоретически не до конца решенной задачей. В отличие от XANES-спектров K-краев элементов, когда 1s-электрон сильно связан с ядром и одноэлектронное приближение оправдано, на L-спектры оказывают влияние прочие эффекты. Особый интерес представляют $L_{2,3}$ -спектры рентгеновского поглощения переходных металлов, несущие информацию о валентной полосе, происходящей от d-уровней металла. При этом, на форму спектров оказывают влияние как т.н. «мультиплетные» эффекты, так и спин-орбитальное взаимодействие. В данной работе были рассчитаны и сопоставлены с экспериментом $L_{2,3}$ -спектры рутения в некоторых металлоорганических соединениях. Расчеты проводились тремя методами с целью вывести наилучший способ теоретического анализа указанных спектров: методом многократного рассеяния в маффин-тин потенциале (реализован в программе «FEFF 8.4»), методом конечных разностей в полном потенциале (реализован в программе «FDMNES2009») и методом расчета мультиплетных состояний в кристаллическом поле (программа «STM4XAS»). На примере 4d-элемента рутения были сделаны выводы о влиянии поля лигандов, спин-орбитальной связи и многоэлектронных эффектов на $L_{2,3}$ XANES-спектры рутения. Показано, что ни одна из опробованных теоретических методик расчета не дает полного описания всех особенностей спектров. Например, молекула $Ru(NH_3)_6$ имеет в качестве активного центра трехвалентный атом рутения в октаэдрическом поле лигандов (NH_3). Ее $L_{2,3}$ XANES-спектры Ru характеризуются интересным расщеплением «белой линии», зависящим от степени окисления рутения и его окружения, и которое отлично описывается учетом мультиплетных переходов в теории кристаллического поля, тогда как особенности спектра за краем поглощения можно получить в рамках стандартных одноэлектронных методик.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ 3d-МЕТАЛЛ – КИСЛОРОД ПО ДАННЫМ EELFS СПЕКТРОСКОПИИ

Бакиева О.Р., Сурнин Д.В., Гай Д.Е.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, ftiran@mail.ru

Получены экспериментальные протяженные тонкие структуры энергетических потерь электронов (EELFS – Extended Energy Loss Fine Structure) чистых поверхностей Fe, Ni, Cu и их тонких стехиометрических оксидных пленок. Проведены теоретические расчеты соответствующих спектров с учетом однократного и двукратного когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном атомном окружении возбуждаемого атома в мультипольном приближении для процесса возбуждения внутреннего уровня вещества электронным ударом. Предложено эмпирическое выражение, описывающее вклады от процессов многократного возбуждения электронов валентных состояний в формирование фона, в области EELFS спектра. Использование предложенной методики позволяет на количественном уровне (длины химической связи, парциальные координационные числа, параметры изменений длин химических связей) проводить анализ параметров ближайшего атомного окружения в бинарных сплавах на основе 3d-металл–легкий элемент.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Химический состав и локальная атомная структура сверхтонких поверхностных слоев 3d-металлов и их соединений по данным электронной и рентгеноэлектронной спектроскопии».

ПРИМЕНЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ БИОГЕННЫХ И АБИОГЕННЫХ АПАТИТОВ

Бельская Л.В., Голованова О.А.

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Омск, Проспект Мира, 55а, LudaB2005@mail.ru*

Гидроксилapatит $[\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$ – минерал, который является основным строительным материалом для костей и зубов, входит в состав патогенных минеральных образований в организме человека (зубные, слюнные, почечные камни, кальцификаты сердечных клапанов и др.), причины и механизм образования которых до сих пор не выявлены. Данный материал обладает свойством биосовместимости. Это обуславливает возможность применения гидроксилapatита при изготовлении имплантантов для протезирования, в медицине в виде керамики, цементов и композитов. Поэтому важным и перспективным направлением является изучение процесса кристаллизации из прототипов биологических жидкостей, а также установление связи между составом и структурой биоминералов (патогенного и физиогенного происхождения) и условиями их формирования, вызванными аномальными изменениями состояния организма и окружающей среды.

Для решения поставленной задачи разработан комплексный материаловедческий подход, включающий, в частности, отработку схемы и методики проведения модельного эксперимента для получения фосфатных биоматериалов, приемы обработки и интерпретации результатов, полученных методами рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа (рентгеновские порошковые дифрактометры типа ДРОН). Особое внимание уделено вопросам контроля качества и технических характеристик получаемых образцов. На основе реализованного комплексного материаловедческого подхода изучены закономерности изменения состава и структуры гидроксилapatита (перераспределение макро- и микроэлементов, изменение степени кристалличности, схем вхождения микропримесей в кристаллическую решетку и др.); полученные данные используются для поиска веществ-ингибиторов нежелательной кристаллизации гидроксилapatита на основании результатов модельных экспериментов.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО АТОМНОГО ОКРУЖЕНИЯ Cu, Ni, Co И Zn В МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСАХ ПИРАЗОЛЬНЫХ АЗОМЕТИНОВ МЕТОДОМ XAFS

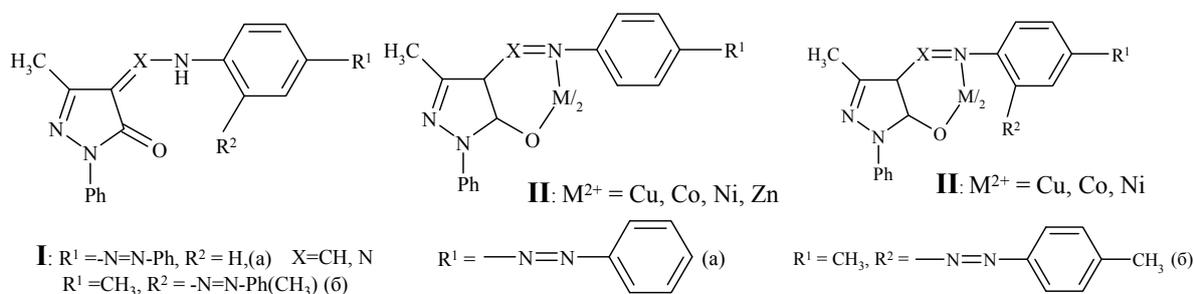
**Власенко В.Г.¹, Зубавичус Я.В.², Бурлов А.С.³, Ураев А.И.³, Мащенко С.А.³,
Гарновский Д.А.³, Васильченко И.С.³, Тригуб А.А.², Гарновский А.Д.³**

¹НИИ Физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, 344090,
просп. Стачки, 194, E-mail: vlasenko@ip.rsu.ru

²КЦСИ и ИТ, РИЦ «Курчатовский институт», Москва

³НИИ физической и органической химии Южного федерального
университета, Ростов-на-Дону

С целью создания потенциально фотохромных магнитоактивных металлокомплексов получены новые азосоединения I. На их основе методами химического (из ацетатов металлов) и электрохимического (анодное растворение металлов в степени окисления нуль) получены металлохелаты II.



Локальное окружение атомов Cu, Ni, Co и Zn в металлокомплексах II изучена методом EXAFS-спектроскопии. Рентгеновские Cu, Ni, Co и Zn К-края поглощения получены в режиме пропускания на станции «Структурного материаловедения» в Курчатовском синхротронном центре (г. Москва). Обнаружено, что комплексы меди IIa(Cu) и IIб(Cu) имеют близкое локальное строение, где Cu находится в тетраэдрическом окружении O/N с $R = 1.94-198 \text{ \AA}$. Комплекс цинка IIa(Zn) также имеет тетраэдрическое строение металлоузла с $R_O = 1.90 \text{ \AA}$ и $R_N = 2.01 \text{ \AA}$. В комплексе кобальта IIб(Co), в отличие от IIa(Co), где атом металла имеет тетраэдрическое окружение с $R = 1.95-198 \text{ \AA}$, обнаружено октаэдрическое строение с координацией по металлу атомов азота азогруппы ($R_N = 2.07 \text{ \AA}$), находящейся в орто-положении азометинового фрагмента, и реализацией двух пяти и двух шестичленных металлоциклов. Такая же структура характерна и для комплекса IIб(Ni), где осуществляется дополнительная координация азота азогруппы лиганда с $R_N = 2.16 \text{ \AA}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 08-03-00154, 10-03-00434 и Президента РФ ИШ-3233.2010.3.

**МАГНИТНЫЕ И НЕМАГНИТНЫЕ ПРИМЕСИ ДЛЯ РМП
НА ОСНОВЕ ZnO****Гуда А.А., Солдатов А.В., Солдатов М.А., Мазалова В.Л.***Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, guda_sasha@mail.ru*

В настоящей работе проводится сравнительный анализ локальной атомной, электронной и магнитной структуры вокруг примесей внутри разбавленных магнитных полупроводниках (РМП) на основе ZnO [1,2]. В качестве исходно немагнитной примеси рассматривается углерод, а в качестве магнитной – марганец. Изучение структуры основывается на теоретическом анализе [3] спектров рентгеновского поглощения за К-краями кислорода, углерода, L2,3 краями цинка (для образцов ZnO:C); и за L2,3 краями марганца для образцов ZnO:Mn. Измерение спектров поглощения было проведено на российско-немецкой линии синхротрона BESSY-II в Берлине. Моделирование спектров и расчёты спин-поляризованной электронной структуры проведены в центре высокопроизводительных вычислений ЮГИНФО ЮФУ.

Построены карты распределения магнитного момента вокруг примесных атомов в позициях замещения кислорода и цинка. Рассчитаны индуцированные магнитные моменты на внедрённых атомах и их ближайших соседях. Наиболее энергетически выгодными дефектами является замещение марганцем цинка и замещение углеродом кислорода в ZnO. Спектроскопические исследования подтверждают, что в образцах ZnO:Mn основным типом дефектов Mn является замещение цинка, в то время как в образцах ZnO:C только часть атомов углерода внедряются в матрицу ZnO, а остальные образуют абсорбированный слой на поверхности.

[1]. T.S. Herng, S.P. Lau, L. Wang et.al., Appl. Phys. Lett. **95**, 012505, 2009.

[2]. T.S. Herng, S.P. Lau, C.S. Wei et.al., Appl. Phys. Lett. **95**, 133103, 2009.

[3]. Smolentsev G., Soldatov A.V., Feiters M.C., Phys. Rev. B. **75**, 144106 (2007).

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ (грант РНПВШ 2.1.1.5932).

**РАСЧЕТЫ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЭМИССИИ
АТОМОВ Si И O В КРИСТАЛЛЕ КВАРЦА И К-СПЕКТРОВ
ПОГЛОЩЕНИЯ АТОМОВ Al В МЕТАЛЛЕ И В КОРУНДЕ**

Даниленко Т.Н., Новакович А.А., Ведринский Р.В.

*НИИ Физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону 344090,
пр. Стачки, 194, E-mail: vedr@jp.rsu.ru*

Методом полного многократного рассеяния в кластерном приближении с использованием ранее разработанных в НИИ физики ЮФУ программы XKDQ и схемы построения полуэмпирического МТ потенциала проведены расчеты К-спектров эмиссии и поглощения атомов Si и O в кристалле кварца и К-спектров поглощения атомов алюминия в металлическом алюминии и корунде. Определены размеры представительных кластеров. Показано, что при разумном выборе параметров МТ потенциала удастся получить расчетные спектры в разумном согласии с экспериментальными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 2.1.1/3690).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТОЯНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ И БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ТОНКИХ МОСVD ПЛЕНКАХ

Жерикова К.В.¹, Морозова Н.Б.¹, Гельфонд Н.В.¹, Максимовский Е.А.¹, Доровских С.И.¹, Якимчук Е.П.², Новгородов Б.Н.², Кривенцов В.В.², Просвирин И.П.²

¹*Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

²*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск*

В настоящее время, различные варианты метода химического осаждения из паровой фазы (МОСVD), широко применяют для формирования наноструктурированных пленок и покрытий с заданными структурно-функциональными свойствами. Использование разных исходных соединений и варьирование параметров осаждения: (рабочих температур, давлений и т.д.) позволяет получать разнообразные металлические, оксидные и композитные слои, которые представляют значительный интерес для современной фундаментальной науки и технологических применений. Уникальные свойства пленок определяются фазовым составом, наличием примесей, степенью кристалличности, размером и морфологией нанокристаллитов. Однако такие объекты достаточно сложны для физико-химического исследования и контроля стандартным набором рентгеноспектральных и дифракционных методов. Тогда как метод XAFS спектроскопии, как мощный инструмент для исследования локальной структуры и состояния металлов может обеспечить достоверную информацию, необходимую для развития методов осаждения и контроля функциональных свойств получаемых слоев.

Серия образцов никель- и рутенийсодержащих пленок были получены методом МОСVD на модифицированных кремниевых и кварцевых подложках при варьировании параметров осаждения. Химический состав полученных пленок был исследован методом РФЭС, структурное состояние пленок и морфология определялись методами СЭМ и рентгеновской дифракции. Локальная атомная структура и состояние металлов в полученных образцах исследовалась методом XAFS-спектроскопии. Определены длины химической связи и координационные числа. Данные, полученные разными методами, согласуются друг с другом. Рассмотрены возможные варианты структурных моделей.

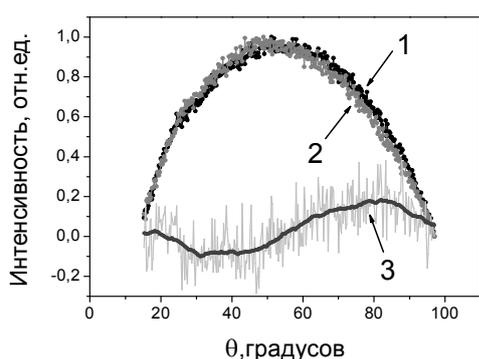
Работа проводилась при поддержке ФАНИ РФ (№ 02.518.11.7128), РФФИ (09-03-01012а, 08-03-01150а, 10-03-01005а, 10-03-01209а), Президиума РАН (программа 27), Интеграционных проектов СО РАН 70, 97.

УГЛОВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВЫХОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПЛЕНОК ОРИЕНТИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ

Каныгин М.А., Окотруб А.В., Куреня А.Г., Гусельников А.В.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3, mkanygin@gmail.com

Углеродные нанотрубы (УНТ), в силу своей цилиндрической структуры, обладают специфическими особенностями по взаимодействию с рентгеновским излучением. В литературе неоднократно рассматривалась возможность пропускания рентгеновского излучения, нейтральных и заряженных наночастиц во внутренней полости УНТ [1-2]. В данной работе проведено измерение угловой зависимости интенсивности выхода рентгеновской флуоресценции пленок многослойных углеродных нанотрубок, ориентированных перпендикулярно поверхности подложки. Было обнаружено влияние УНТ на направление распространения рентгеновского излучения. Сравнение экспериментальных данных с модельной кривой рассеяния рентгеновской флуоресценции, полученной в приближении учета поглощения излучения веществом, выявило наличие особенностей для ориентированной структуры в направлении роста УНТ. Угловое распределение интенсивности рассеянного рентгеновского излучения близко по величине к относительной разориентации нанотрубок в пленке, определенной из Фурье-анализа электронно-микроскопического



Кривые интегральной интенсивности рассеянного рентгеновского излучения (1) ориентированных и (2) разориентированных УНТ, а также (3) их разность, увеличенная в 3 раза.

изображения боковой поверхности образцов. Рассмотрены различные причины ориентационного влияния УНТ на направления выхода рентгеновской флуоресценции. Одной из возможных причин ориентирующего влияния на распространения $S K_{\alpha}$ -излучения вдоль нанотрубок является наличие условия аномальной дисперсии и полного внутреннего отражения.

[1]. S.B. Dabagov, *Physics Uspekhi* **46**, 1053-1075 (2003).

[2]. N.K. Zhevago, V.I. Glebov, *Phys. Lett. A* **250**, 360-368 (1998).

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТЫ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ХРОМА И КОБАЛЬТА

Козинкин Ю.А., Новакович А.А., Ведринский Р.В.

*НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, Kozinkin_U@mail.ru*

Исследованы механизмы формирования тонкой околопороговой структуры в рентгеновских К-спектрах поглощения металлов Cr и Co. Выявлены зависимости этих спектров от размеров кластеров. С этой целью проведены расчеты спектров для кластеров от 40 до 800 атомов. Расчеты XANES – спектров для различных размеров кластеров использованы для детального анализа электронного строения наночастиц, синтезируемых на основе этих металлов. Сопоставление полученных результатов с экспериментальными XANES-спектрами позволило подобрать оптимальные одноэлектронные потенциалы для кластеров исследованных металлов.

Расчеты проводились с использованием метода полного многократного рассеяния и реализующей его программы XKDQ. Сопоставление полученных результатов с экспериментальными XANES-спектрами позволило подобрать оптимальные одноэлектронные потенциалы для кластеров исследованных металлов. Была исследована зависимость спектра от числа учитываемых при расчете орбитальных моментов на каждом атоме и изучены зависимости спектра от силы атомного потенциала. Расчеты и их сравнение с экспериментальными спектрами были проведены для гранцентрированной кубической (ГЦК) структуры металлов. Поскольку для кобальта такая структура является высокотемпературной (выше 420 °С), также было проведено сравнение расчетных и экспериментальных спектров для гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структуры кобальта. Параметры расчетных моделей, дающих наилучшее согласие расчетных и экспериментальных К-спектров поглощения атомов Cr и Co в объемном металле - 459 атомов в кластере (455 для гексагональной структуры Co). Пики, на расстоянии 40 эВ от края поглощения, обусловлены f - состояниями атомов металла, что соответствует учету максимального орбитального момента равного 3. Сдвиги к атомному потенциалу для ГЦК структур Cr и Co составили 0.1 Ry, для ГПУ структуры кобальта 0.5 Ry.

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ

Коротаев Е.В.¹, Федоренко А.Д.¹, Мазалов Л.Н.¹, Крючкова Н.А.¹,
Диков Ю.П.², Соколов В.В.¹, Филатова И.Ю.¹, Пичугин А.Ю.¹

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, 630090, E-mail: Jodow@rambler.ru

²Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и
геохимии РАН, Старомонетный пер., 35, Москва, 119017

В настоящее время одним из развивающихся направлений электроники является спинтроника (раздел электроники, где при создании приборов, наряду с зарядом электрона, используется его спин). Перспективным, в этой области, считается применение отрицательного магнетосопротивления ОМС некоторых соединений. Примером соответствующих новых материалов могут служить слоистые дисульфиды хрома-меди, допированные ванадием или железом $\text{CuCr}_{1-x}\text{Me}_x\text{S}_2$ ($x=0.1-0.25$, $\text{Me}=\text{V}, \text{Fe}$), механизм возникновения ОМС в которых в настоящее время обсуждается.

Ценную информацию об энергетическом спектре данных веществ могут дать рентгеновские методы исследования. В этой связи были проведены комплексные рентгеноспектральные и рентгеноэлектронные исследования $\text{CuCr}_{1-x}\text{Me}_x\text{S}_2$ ($x=0.1-0.25$, $\text{Me}=\text{V}, \text{Fe}$): получены $K\alpha_{1,2}$ -линии (переход $2p-1s$) серы, ванадия, хрома, несущие информацию об изменении зарядового состояния соответствующих атомов, K -края поглощения меди, несущие информацию о свободных энергетических состояниях атомов меди, $K\beta_{1,x}$ -линии серы (переход $3p-1s$) и $L\alpha_{1,2}$ -линии меди (переход $3d-2p$), несущие информацию о занятых энергетических состояниях соответствующих атомов. Построены полные рентгеновские спектры, изученных соединений, позволяющие оценить основные параметры экспериментального спектра валентных электронов, а также степень участия атомов-допантов в построении занятых и свободных зон катион-замещенных соединений.

Проведенные таким образом исследования, позволили получить новые интересные данные о данном классе веществ.

ИЗУЧЕНИЕ СТАБИЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ И ПАЛЛАДИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРИРОДЫ НОСИТЕЛЯ

**Кривенцов В.В., Бекк И.Э., Иванов Д.П., Якимчук Е.П., Новгородов Б.Н.,
Зайковский В.И., Просвирина И.П., Бухтияров В.И.**

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
e-mail: kriven@mail.ru*

Представленная работа посвящена исследованию стабилизации поверхностных форм платиновых металлов в низкопроцентных монодисперсных платиновых и палладиевых катализаторах на оксидных носителях различной природы (Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 , ZrO_2) методами XAFS и РФЭС. Подобные каталитические системы находят широкое применение в окислительно-восстановительных процессах с участием CO и/или углеводородов. Достоверная информация о состоянии активного компонента и стабилизации его различных поверхностных форм позволит оптимизировать методы приготовления и активации катализаторов с определенными структурно-функциональными характеристиками, что приведет к повышению эффективности системы.

Нанесенные монодисперсные катализаторы готовились из безхлоридных предшественников методом сухой или влажной пропитки оксидных носителей. Для обеспечения контроля и регулирования размеров частиц нанесенного металла проводились различные предобработки носителей и варьировался состав пропиточных растворов. Зарядовое состояние активного компонента и поверхностный элементный состав катализаторов изучены методом РФЭС, морфология и размер наночастиц определены по данным ПЭМВР. С помощью XAFS исследована структура локального окружения и состояние платиновых металлов в образцах. Предложена методика оценки фазового состава с учетом нано-размерных эффектов и изменения степени окисления металла активного компонента по данным XAFS, РФЭС и ПЭМ. Показано влияние природы носителя на морфологию и фазовый состав наночастиц активного компонента, представляющих собой высокодисперсные дефектные металлические или многофазные металл-оксидные системы. Рассмотрены возможные варианты структурных моделей и причины стабилизации различных поверхностных форм активного компонента под воздействием носителя и предыстории катализатора.

Авторы благодарят ФАНИ РФ (№ 02.518.11.7128), РФФИ (08-03-01016а, 09-03-01012а, 08-03-01150а, 10-03-01005а, 10-03-01209а, 08-03-92502-НЦНИЛ_а), Президиум РАН (программа 27).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ И СОСТОЯНИЯ Pd В МОДЕЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ ПО ДАННЫМ XAFS

Кривенцов В.В.¹, Якимчук Е.П.¹, Новгородов Б.Н.¹, Кочубей Д.И.¹,
Бекк И.Э.¹, Симакова И.Л.¹, Максимовский Е.А.², Нечепуренко С.Ф.³,
Чистяков А.В.⁴, Жмакин В.В.⁴, Цодиков М.В.⁴

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

²Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск

³Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск

⁴Институт нефтехимического синтеза РАН, Москва

В настоящее время, алкоксо-метод признан весьма перспективным для приготовления наноструктурированных металлоксидных каталитических систем. Например, для модификации внутренней поверхности пористых мембранных носителей высокодисперсными металлсодержащими каталитически активными покрытиями. Подобные системы (на основе ацетатных Pd-Mn(Co) гетеро-комплексов и тетраэтоксититана) обладают высокой активностью в процессах углекислотного риформинга CH_4 и парового риформинга продуктов переработки биомассы. Для изучения генезиса выполнено исследование особенностей локального окружения и состояния Me на всех этапах формирования активного компонента (включая импульсное воздействие СВЧ поля) модельных катализаторов. Установлено, что в активный компонент состоит из высокодисперсной Pd-содержащей нанофазы. Формирование стабильной катионной подрешетки относительно начинается на стадии образования геля, по-видимому происходит образование фазы зарождения оксида палладия. В исследованных оксидах Pd находится в окисленном состоянии, преимущественно в виде PdO. В Pd-Mn наносистеме, при переходе от геля к оксиду, наблюдаются значительные изменения, связанные с локальным окружением и состоянием Mn, так меняется степень окисления значительной части ионов марганца. Для Pd-Co наносистемы формирование стабильной анионной подрешетки происходит уже на этапе формирования геля, при прокалке последующие изменения возможны только по катионной подрешетке. Данные методов ПЭМ, РФЭС, РФА не противоречат данным XAFS. Рассмотрены все возможные варианты структурных моделей стабилизации Pd и Mn(Co) на оксидной матрице TiO_2 .

Работа проводилась при поддержке ФАНИ РФ (№02.518.11.7128), РФФИ (09-03-01012а, 08-03-01150а, 10-03-01005а, 08-03-00458а, 10-03-01209а, 08-03-92502-НЦНИЛа, 09-03-00089а, 09-03-00133а, 09-03-00328а), Президиума РАН (программа 27).

**РАСЧЁТ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ АССОЦИАТОВ
5,10,15,20-ТЕТРАМЕТАГИДРОКСИФЕНИЛХЛОРИНА
В ВОДНО-ЭТАНОЛОВОЙ СМЕСИ**

Кривулько К.Ф., Клищенко А.П.

*Белорусский государственный университет, Республика Беларусь,
Минск, 220030, пр. Независимости, 4, kf.kriv@mail.ru*

Используя метод модифицированной ω -техники [1] был проведён расчёт электронных спектров ассоциатов 5,10,15,20-тетраметагидроксифенилхлорина (мТГФХ) в водно-этаноловой смеси. Несмотря на то, что в мТГФХ полоса $Sore$ характеризуется значительно большей зависимостью положения от природы растворителя, чем длинноволновая полоса, из представленных расчётов следует, что для ассоциатов J-типа степень агрегации в значительно большей степени влияет на положение длинноволновой полосы. Для «гипотетических» структур H-типа характеристичной является полоса $Sore$.

	Димер		Тример		Тетрамер	
	J-тип	H-тип	J-тип	H-тип	J-тип	H-тип
Полоса $Sore$, λ_s , нм	431.4	407.7	631.4	615.8	431.4	407.8
Длинноволновая полоса, λ_r , нм	654.7	643.5	650.8	643.5	654.7	643.5
Экспериментальные данные	$\lambda_s=431.4; \lambda_r=654.5$		$\lambda_s=444.7$			

Полученные результаты для линейных тримеров и тетрамеров подтверждают предположение многих авторов [2] о том, что полоса 444,7 нм обусловлена ассоциатами более высокого порядка. Более того, учитывая, не монотонность и незначительность (при переходе от димера к тетрамеру) изменений положения полос при увеличении длины цепочки естественно предположить, что отличия в оптических центрах соответствующих полосам в 431.4нм и 444.7нм не только в степени ассоциации, но и в структуре.

[1]. Роль полярности в структуре межмолекулярных комплексов красителей с растворителем / К.Ф. Кривулько, А.П. Клищенко / Журн. приклад. Спектроскопии. – 2008. – Т.75, №4. – С.495-502.

[2]. Physical and chemical studies to the development of m-THPC (FOSCAN ®) for the photodynamic therapy (PDT) of tumors / R. Bounett, D.D. Birgul, A. Nguyen // J. Porphyr. Phthalocya. – 2001. – Vol. 5, № 8. – P. 652–661.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОБАЛЬТИТА LiCoO_2

Месилов В.В.¹, Галахов В.Р.¹, Гижевский Б.А.¹, Овечкина Н.А.¹,
Семенова А.С.², Келлерман Д.Г.², Neumann M.³

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, mesilov@imp.uran.ru

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

³Universität Osnabrück, Germany

В работе представлены данные по исследованию особенностей электронной структуры нанокристаллического кобальтита LiCoO_2 – перспективного катодного материала для химических источников тока.

Нанокристаллический образец LiCoO_2 был получен размолом крупнозернистого исходного кобальтита лития с помощью метода квазистатических деформаций (сдвиг под давлением). Рентгеновские абсорбционные O 1s- и Co 2p-спектры нанокристаллического кобальтита LiCoO_2 были измерены на Российско-Германской линии синхротрона BESSY (Берлин) и на линии I511.3 накопительного кольца MAX II (MAX-lab, Лунд) в режимах полного выхода фотоэффекта (поверхностно-чувствительном) и выхода флуоресценции (объемно-чувствительном). Рентгеновские фотоэлектронные Co 3p и Li 1s-спектры нанокристаллического кобальтита LiCoO_2 были получены с помощью фотоэлектронного спектрометра PHI 5600 CI Multichnigue System с использованием монохроматизированного Al K α -излучения.

Из рентгеновских абсорбционных O 1s- и Co 2p-спектров показано, что для LiCoO_2 , деформированного под давлением до 5 ГПа, электронная конфигурация ионов кобальта $3d^6$ сохраняется; при больших деформациях появляются ионы кобальта в конфигурации $3d^7$ и дырочные состояния в 2p-полосе кислорода в объеме образца. Из рентгеновских фотоэлектронных Co 3p и Li 1s-спектров следует, что внутри деформированного материала происходит распад LiCoO_2 на Co_3O_4 и Li_2O , затем молекулы Li_2O перемещаются к поверхности образца. Таким образом, в сильнодеформированном образце LiCoO_2 найдено колоссальное увеличение фотоэлектронного Li 1s-сигнала за счет обогащения приповерхностного слоя Li_2O и возникновения дефектов по литию в объеме материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 07-02-00540, 08-02-00148 и 08-03-99071) и НШ-3572.2010.2.

**РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ И ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ
ЛИТИЙ-НАТРИЕВОГО КОБАЛЬТИТА $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$**

**Месилов В.В.¹, Галахов В.Р.¹, Семенова А.С.²,
Келлерман Д.Г.², Елохина Л.В.¹**

¹*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, mesilov@imp.uran.ru*

²*Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург*

Для нестехиометрического кобальтита $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ – нового перспективного термоэлектрического материала – выполнен комплекс рентгеноспектральных исследований электронной структуры и особенностей строения.

Кобальтит $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ (плотная керамика) был получен твердофазным методом из кобальтитов $\text{Na}_{0.7}\text{CoO}_2$ и LiCoO_2 . Отжиг проводили в кислороде при температуре 1050 °С в течении 8 часов. В соответствии с данными, полученными с помощью метода индуктивно связанной плазмы, образец соответствует составу $\text{Li}_{0.42}\text{Na}_{0.36}\text{CoO}_2$.

Рентгеновские абсорбционные O 1s- и Co 2p-спектры спектры кобальтита $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ были сняты на линии I511.3 накопительного кольца MAX II (MAX-lab, Лунд) в режимах полного выхода фотоэффекта (поверхностно-чувствительном) и выхода флуоресценции (объемно-чувствительном). Рентгеноспектральным микроанализом, проведенным на микроанализаторе Superprobe JCHA-733, были получены распределения элементов Co и Na вдоль выбранной линии в направлении перпендикулярно краю одной из сторон торца.

На основании распределения элементов по глубине материала была установлена однородность состава в центральной части образца и наличие областей с формированиями Li_2CO_3 и Na_2CO_3 в приповерхностном слое толщиной до нескольких мкм. Из рентгеновских абсорбционных O 1s-спектров найдено, что образец $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ вблизи поверхности стехиометричен по щелочному металлу, а внутри – дефектен. С помощью рентгеновских абсорбционных O 2p-спектров показано, что зарядовая компенсация в $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ осуществляется за счет дырок в 2p состояниях кислорода, в то время как электронная конфигурация ионов кобальта остается неизменной.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 07-02-00540, 08-02-00148 и 08-03-99071) и НШ-3572.2010.2.

МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ОКОЛОПороГОВОЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ В К-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ АТОМОВ МЕТАЛЛОВ И КИСЛОРОДА В КРИСТАЛЛАХ ТИТАНАТОВ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА

Назаренко Е.С., Новиковский Н.М., Новакович А.А., Ведринский Р.В.

НИИ Физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону 344090,
пр. Стачки, 194, E-mail: vedr@ip.rsu.ru

Методом полного многократного рассеяния в кластерном приближении с использованием ранее разработанных в НИИ физики ЮФУ программы XKDQ и схемы построения полуэмпирического МТ потенциала проведено подробное исследование околопороговой тонкой структуры в К-спектрах поглощения атомов Ti, O, Ca и Sr в кристаллах $PbTiO_3$, $BaTiO_3$, $CaTiO_3$ и $SrTiO_3$. Расчетные спектры оказались в хорошем согласии с экспериментом. Были изучены: сходимость спектров при увеличении размеров кластеров, влияние на спектры сил атомных потенциалов и зависимость спектров от учитываемых при расчетах процессов рассеяния фотоэлектронов атомами. Полученные результаты позволили выявить механизмы, ответственные за возникновение большинства элементов тонкой структуры исследованных спектров. Наиболее подробно изучена предкраевая структура в К-спектрах поглощения титана. Установлено, что в общем случае эта структура включает 5 особенностей, имеющих различную природу. Показано, что для ее правильного описания в согласии с полученными ранее результатами [1, 2] необходимо использовать модель неполной экранировки $1s$ дырки. Этот результат может быть объяснен многоэлектронным эффектом влияния фотоэлектрона на процесс перестройки волновых функций электронов в валентной полосе под влиянием поля дырки.

[1]. Vedrinskii R.V., Kraizman V.L., Novakovich A.A., Demekhin Ph.V., Urazhdin S.V. J. of Phys.: Condens. Matte, 1998, v.10. p.9561-9580.

[2]. Joly Y., Cabaret D., Renevier H., Natoli C.R., Phys. Rev. Lett., 1999, v.82, p. 2398-2401.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 2.1.1/3690).

СМЕШАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ РОДИЯ В Rh/TiO₂ КАТАЛИЗАТОРАХ ПО ДАННЫМ EXAFS И XANES СПЕКТРОСКОПИИ

Нецкина О.В., Кочубей Д.И., Симагина В.И., Комова О.В., Ищенко А.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

E-mail: netskina@catalysis.ru

При использовании нанесенных металлических катализаторов в процессах парциального или полного окисления возможно частичное окисление активной фазы. При этом обычно катализатор рассматривается как двухфазный и металл считается находящимся в двух независимых степенях окисления. Такой вариант является наиболее вероятным, однако возможны случаи образования слоя оксида на поверхности металлической частицы. В случае переходного металла такая пленка оксида может и должна иметь нестехиометрический состав и обладать собственной проводимостью. В данной работе проверялась возможность реализации такой ситуации и получения частиц с усредненным зарядовым состоянием.

Работа выполнялась на Rh/TiO₂ катализаторах гидролиза NaBH₄ приготовленных восстановлением RhCl₃ в реакционной среде. Согласно данным EXAFS катализатор, прокаленный перед восстановлением на воздухе при температуре 300 °С, содержит существенное количество связей Rh-O без образования структуры отвечающей массивному Rh₂O₃. Координационное число для расстояния Rh-O равно 2. Т.е. можно предположить что, на поверхности металлической частицы образуется слой нестехиометрического оксида. Это подтверждают данные ТЕМ, из которых также следует что, частицы металла имеют средний размер 3.3 нм и декорированы оксидной структурой. Однако данные XANES показывают что, первая производная от RhK спектра поглощения имеет один максимум. Это свидетельствует о том что, родий находится в одном усредненном электронном состоянии. Наблюдается также сдвиг края поглощения родия в сторону больших энергий на 1.9 эВ, что больше сдвига в RhCl₃, но меньше чем в Rh₂O₃.

Таким образом, контакт нестехиометрического оксида переходного металла или прочная хемосорбция кислорода приводят к понижению электронной плотности в системе в целом, формируя на поверхности ионы металла в необычном валентном состоянии. Ранее частью авторов работы такой эффект наблюдался при хемосорбции кислорода на частицы металлического рутения.

Авторы работы выражают благодарность РФФИ (грант № 09-08-00546) за финансовую поддержку проводимых исследований.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ КАТАЛИЗАТОРОВ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕНИЯ СО

Радкевич В.З.¹, Вильсон К.², Хаминец С.Г.¹, Сенько Т.Л.¹, Егиазаров Ю.Г.¹

¹*Институт физико-органической химии Национальной академии наук
Беларуси, Минск, ул. Сурганова, 13. E-mail: radkevich_vz@ifoch.bas-net.by*

²*Cardiff University, Cardiff CF10 3AT, UK*

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) исследованы катализаторы низкотемпературного окисления СО, полученные пропиткой солями палладия, меди и железа углеродных носителей: косточкового активированного угля (КАУ, диаметр гранулы – 1-2 мм, $S_{уд}$ – 950 м²/г) и волокнистого материала карбопон (диаметр волокна – 5-10 мкм, $S_{уд}$ – 780 м²/г).

Данные РФЭС получены на приборе «Kratos Axis His» (Англия) с источником Al-K_α-рентгеновских лучей (1486,6 эв), работающем при 169 ватт, с анализатором проходящей энергии 40 эв.

Анализ РФЭС-спектров свидетельствует о том, что в катализаторах на основе углеродных носителей палладий находится в окисленном состоянии, главным образом в виде Pd⁺, медь и железо – в виде Cu²⁺ и Fe³⁺.

Установлено, что в свежеприготовленных катализаторах на основе КАУ палладий распределяется практически равномерно по всему объему гранулы. В то же время в катализаторах на основе карбопона палладий в большей степени концентрируется на внутренней поверхности волокна. Медь и железо в обоих носителях сконцентрированы в приповерхностном слое, причем доля поверхностных атомов меди и железа в карбопоне значительно выше, чем в КАУ. В ходе каталитического опыта при взаимодействии СО и О₂ происходит перераспределение металлов в объеме углеродного носителя с заметным увеличением концентрации палладия в приповерхностном слое.

С использованием данных РФЭС показано, что введение активного компонента в углеродный нетканый материал карбопон методом многократного нанесения с промежуточной активацией в реакционной среде приводит к формированию на поверхности углеродного носителя комплекса с более благоприятным соотношением компонентов активной фазы для протекания реакции окисления СО.

АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ К – КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТИТАНА В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ ГРУППЫ ШПИНЕЛИ

Родина И.С.¹, Кравцова А.Н.¹, Солдатов А.В.¹, Берри А.Дж.²

¹НОЦ «Наноразмерная структура вещества», Южный федеральный университет, 344090, Ростов-на-Дону, Зорге 5, isrodina@inbox.ru

²Лондонский Императорский Колледж, Лондон, Великобритания

В последние годы все большее внимание исследователей уделяется вопросу условий образования земной коры. В получении ответов на эти вопросы помогает изучение строения и образования петрологических индикаторов, к которым относится и титансодержащий минерал группы шпинели с конечным членом Ni_2TiO_4 .

В данной работе проведено исследование особенностей локальной атомной и электронной структуры исследуемого минерала на основе анализа ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (XANES). Экспериментальный спектр рентгеновского поглощения за К-краем титана в шпинели был зарегистрирован на Фотонной Фабрике (КЕК, Япония).

Проведен теоретический анализ К-края поглощения титана в данном геологическом материале для двух моделей:

- 1) $Ni_{2,62}Ti_{0,69}O_4$;
- 2) $Ni_{2,42}Ti_{0,74}Si_{0,05}O_4$, в которой атомы кремния находятся в позиции замещения атомов титана.

С целью изучения электронной структуры минерала выполнены расчеты локальных парциальных плотностей электронных состояний вблизи вершины валентной зоны и вблизи дна зоны проводимости соединения.

РЕТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Семушкина Г.И.¹, Гуляев Р.В.², Крючкова Н.А.¹, Мазалов Л.Н.¹,
Басова Т.В.¹, Пляшкевич В.А.¹, Боронин А.И.²

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

²Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: lala6161@yandex.ru

В настоящее время фталоцианины металлов и их производные являются интенсивно изучаемым классом координационных соединений. Системы на основе фталоцианиновых пленок в настоящее время широко применяются в полупроводниковых, сенсорных электрохромных устройствах. Особый интерес для исследования представляют гексадекафторзамещенные фталоцианины металлов (MPcF_{16}), что связано с обнаружением у этих соединений уникальных электрофизических свойств. В отличие от большинства фталоцианинов они являются полупроводниками n – типа, что значительно расширяет возможности их практического использования в органической электронике.

В настоящей работе проведены рентгеноспектральные и рентгеноэлектронные исследования электронной структуры комплексов незамещенных и гексафторзамещенных фталоцианинов переходных металлов: MePcH_{16} , MePcF_{16} (где Me = Cu, Co, Ni и др.). Получены C(1s), N(1s), Me(2p), Me(3s) – рентгеноэлектронные спектры, L_{α} , K_{β} , $K_{\beta 5}$ эмиссионные спектры, а также K-спектры поглощения металлов (XANES). Методом DFT проведены квантово-химические расчеты энергий внутренних и валентных уровней комплексов, а также эффективных зарядов атомов, входящих в состав изучаемых соединений.

Показано, что введение электроноакцепторных заместителей в бензольные кольца оказывает наибольшее влияние на атомы кольца, и незначительно сказываются на зарядовом состоянии атомов азота, входящих в состав пиррольного цикла.

МАРГАНЦЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ КАК МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ (ФОТОСИСТЕМА II): ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ XANES, РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ XES И ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

Сучкова С.А.¹, Солдатов А.В.¹, Смоленцев Г.Ю.¹, Dau H.², Zaharieva I.²

¹*Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, suchkova_sv@inbox.ru*

²*Free University of Berlin, Берлин, Германия*

Механизм процесса эффективного окисления воды в фотосистеме II на связанном с белком $Mn_4Ca(\mu-O)_n$ комплексе представляет интерес для разработки (биологических) технологических катализаторов со схожими свойствами (высокая эффективность, дешевые материалы, самосборка и восстановление). Искусственные комплексы с активным центром марганцем с различными состояниями окисления и различной координационной геометрией были выбраны для изучения. Используя методы рентгеновской спектроскопии и дополнительные методы, мы планируем внести вклад в изучение механизма окисления воды в ФСII, а также в искусственных системах [1-3].

Были рассчитаны спектры XANES K-края Mn в искусственных комплексах, и на основе анализа спектров XANES были уточнены различия в локальной атомной структуре вокруг активных центров комплексов. Электронная структура каталитического металлического центра представляет большой интерес, для ее изучения была использована комбинация методов: анализ спектров XANES, анализ рентгеновских эмиссионных спектров XES, и расчеты теории функционала электронной плотности, которые позволяют в том числе соотносить происхождение особенностей на XES спектрах с молекулярными орбиталями соответствующих атомов (данный подход был успешно реализован в работе [4]).

[1]. Dau H., Haumann M. (2006) Science 312 (letter section):1471-1472.

[2]. Haumann M., Grundmeier A., Zaharieva I., Dau H. (2008) Proc Natl Acad Sci U S A 105:17384-9.

[3]. Dau H., Haumann M. (2008) Coord Chem Rev 252:273-295.

[4]. Pieter Glatzel, Marcin Sikora, Grigory Smolentsev et. al.// Catalysis Today. 2008.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРФИРИНАТОВ ПЕРЕХОДНЫХ 3d-МЕТАЛЛОВ МЕТОДАМИ XAFS-СПЕКТРОСКОПИИ

Тригуб А.Л.^{1,2}, Аль Ансари Я.Ф.³, Велигжанин А.А.^{1,2}, Зубавичус Я.В.^{1,2},
Чернышов А.А.¹

¹РНЦ «Курчатовский Институт», Москва, пл. Курчатова, 1, trigub85@mail.ru

²Московский физико-технический институт, Москва

³Институт физической химии и электрохимии РАН, Москва

В данной работе исследована корреляция между структурными параметрами и особенностями тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения некоторых порфиринов переходных 3d-металлов. Экспериментальные спектры EXAFS и XANES для соединений MOEP и MTPP (M=Co,Cu,Ni; OEP=октаэтилпорфиринат, TPP=тетрафенилпорфиринат) на К-краях соответствующих металлов измерены в режиме пропускания на станции «Структурное материаловедение» КЦСИиНТ [1]. Фазовая чистота образцов подтверждена с помощью порошковой рентгеновской дифракции. Параметры локального окружения атомов металла, полученные из обработки EXAFS спектров, полностью соответствуют доступным кристаллографическим данным. Небольшие изменения в спектрах околораевой тонкой структуры XANES при варьировании типа лиганда и центрального атома металла отражают баланс электронных и структурных факторов, таких как электронная конфигурация 3d-металла и характер отклонения геометрии металлоцентра MN_4 от идеального плоского квадрата.

На рис. сопоставлены спектры XANES для пары образцов CuTPP и CuOEP.

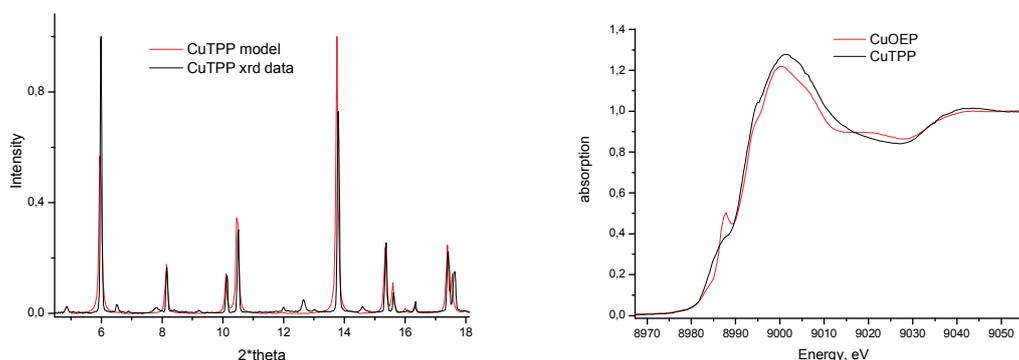


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма(слева) образца CuTPP и спектр XANES(справа) пары CuTPP и CuOEP.

[1]. A.A. Chernyshov, A.A. Veligzhanin, Y.V. Zubavichus, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A 603 (2009) 95–98.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 09-03-12327-офи-м.

EXAFS ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРОВ CdS И Cu_xS, СФОРМИРОВАННЫХ В МАТРИЦЕ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-БЛОДЖЕТТ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Трубина С.В.¹, Эренбург С.Б.¹, Журавлев К.С.²,
Свешникова Л.Л.², Никитенко С.Г.³

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск,
пр. Акад. Лаврентьева, 3, svt@niic.nsc.ru

²Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск,
пр. Акад. Лаврентьева, 13

³NOSR (NOW), DUBBLE at ESRF, Grenoble, France

Исследование низкоразмерных полупроводниковых структур представляет значительный интерес в связи с возможностью их использования для создания новых оптоэлектронных устройств.

Образцы, содержащие нанокластеры CdS и Cu_xS, получены по методу Ленгмюра-Блоджетт. В качестве подложек использовались полированные кремниевые пластины. Матрицу пленок удаляли в вакууме при T=200°C или в атмосфере аммиака при температурах T=150 - 250°C [1]. EXAFS CuK и CdK спектры измерялись в режиме флуоресценции с использованием СИ накопительного кольца VEPP-3 ИЯФ СО РАН (Новосибирск) и канала DUBBLE центра ESRF (Гренобль, Франция). Для образцов с нанокластерами CdS измерения были выполнены при T=295 и 12 К, а также при различной поляризации СИ.

Показано, что при обработке в атмосфере аммиака с увеличением температуры обработки наблюдается увеличение межатомных расстояний Cd-S (~0.03 Å), что может быть связано с некоторым увеличением размера частиц. На графике Фурье трансформанты CdK EXAFS спектра, измеренного при T=12 К, для самого высокотемпературного образца, проявляется вторая сфера Cd-Cd, которая не обнаружена для остальных образцов. Следует отметить, что фотолюминесцентные свойства наночастиц CdS также зависят от температуры их обработки в процессе приготовления. Установлено, что при синтезе наночастиц Cu_xS образуются частицы близкие по структуре к Cu₂S.

[1]. Е.А. Багаев, К.С. Журавлев, Л.Л. Свешникова, Д.В. Щеглов ФТП, 2008, т.42, с. 718-725.

РАСЧЕТ ФОРМЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ ПОЛОС МАГНИЯ И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ

Тупицын И.И., Овчаренко Р.Е., Шулаков А.С.

НИИ физики им. В.А. Фока, Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Петродворец, Ульяновская ул. 1,
shulak@paloma.spbu.ru

Теория функционала плотности в приближении псевдопотенциала использовалась для расчета полных и парциальных плотностей состояний, парциальных эффективных зарядов атомов в различных моделях, спектрального распределения полных и парциальных интенсивностей рентгеновских эмиссионных полос металлического магния и его соединений MgH_2 , MgB_2 , MgO и MgF_2 . Интегральную интенсивность K и $L_{2,3}$ полос магния можно нормировать на интенсивность внутренних K_α и $L_1-L_{2,3}$ линий, соответственно, используемых в качестве внутреннего стандарта интенсивности в эксперименте. Это позволяет оценить абсолютную и относительную интенсивность рентгеновских эмиссионных полос в металле и соединениях и сопоставить их с парциальными заселенностями атомных орбиталей. В докладе описывается методика расчета, процедура нахождения одноэлектронных волновых функций, оценивается связь экспериментальных оценок интенсивности с теоретическими расчетами, анализируется влияние функции вероятности переходов и оже-процессов на получаемые оценки.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕТРАХЛОРОАУРАТА ЦИПРОФЛОКСАЦИНИЯ
МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ**

Чередниченко А.И., Карасёв В.Е., Карасёва Э.Т., Полищук А.В.

*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, 100 лет Владивостоку, 159,
E-mail: les@ich.dvo.ru*

Одним из направлений исследований института химии ДВО РАН является синтез и исследование широкого класса соединений, обладающих антибактериальными свойствами и перспективных для практического применения в качестве антибиотиков нового поколения. Среди них особое место занимают соединения фторхинолонов с различными металлами, в связи с их высокой эффективностью, большими возможностями модификации структуры и свойств, а также полученными данными об их избирательности и щадящем действии на организм человека.

В данной работе приведены результаты исследования моногидрата тетрахлоуроуромата ципрофлоксациния состава $\text{C}_{14}\text{H}_{20}\text{N}_2^+[\text{AuCl}_4]\text{H}_2\text{O}$ методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС).

Исследование проводилось с использованием сверхвысоковакуумной установки производства SPECS, Германия. Установка оборудована методами исследования электронного строения (ФЭС, РФЭС, ОЭС), а также масс-спектрометром для анализа состава остаточных газов в камере энергоанализатора. Наличие масс-спектрометра позволило контролировать изменение состава газа при регистрации РФЭ спектров, отнесенное к частичному разложению исследуемого образца под воздействием рентгеновского излучения.

Совместный анализ РФЭ и масс-спектров позволил установить, что при фотодеструкции изучаемого комплексного соединения золота, в составе исследуемого образца увеличивается доля нейтральных атомов Au. При этом полного восстановления ионов Au^{3+} не зарегистрировано. Облучение образца рентгеновскими фотонами приводит к значительному ухудшению вакуума в камере энергоанализатора и появлению в масс-спектрах иона C_3H_5^+ , что возможно при отрыве циклопропильной группы. Данное предположение подтверждается установленным из РФЭ данных уменьшением относительного содержания углерода до 15%.

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И СОСТАВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ РФЭС И СПЕКТРОСКОПИИ ХПЭЭ

Чередниченко А.И.¹, Сушков Ю.В.¹, Харченко В.И.²

¹Институт химии ДВО РАН, Владивосток, E-mail: saprus@mail.ru

²Дальневосточный государственный технический университет,
Владивосток

Углеродные материалы в настоящее время представлены большим разнообразием наноразмерных структур. Среди методов их получения все чаще в литературе упоминается метод дугового разряда в растворах.

В работе представлены данные по изучению методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и спектроскопии характеристичных потерь энергии электронов (ХПЭЭ) материалов, полученных при дуговом разряде постоянного тока в дистиллированной воде и водном растворе CuSO_4 .

Спектры ХПЭЭ углерода измерены в энергетической области низких потерь (0 – 50 эВ) и в области края поглощения СК_α - линии (260 – 350 эВ). Выявленные различия в структуре полос СК_α - края поглощения для материалов, полученных в разных растворах и при различных условиях их формирования, отнесены к различным аллотропным формам углерода, содержащимся в анализируемых образцах. Количественное отношение материалов с различной гибридизацией атомов углерода (sp^2 , sp^3) оценено по методике [1].

По данным РФЭС определен химический состав материалов, его зависимость от состава раствора и электрических параметров разряда [2]. Проведен анализ сателлитной структуры $\text{C}1\text{s}$ полос РФЭС спектров, выделены полосы, отнесенные к различным формам. Отмечено хорошее согласие результатов, основанных на анализе «Shake up» сателлитов РФЭС, с данными спектроскопии ХПЭЭ.

[1]. Urbonaitė S., Wachtmeister S., Mirguet C., et al, Carbon 45 (2007) 2047–2053.

[2]. Гордиенко П.С., Сушков Ю.В., Чередниченко А.И., и др. Сборник тезисов докладов Второго Международного форума по нанотехнологиям, М.: Роснано, 2009, с. 319-320.

**РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ FeO И MnO₂
В ЖЕЛЕЗОМАРГАНЦЕВЫХ КОНКРЕЦИЯХ****Чубаров В.М., Финкельштейн А.Л.***Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск,
ул. Фаворского, 1а, master-17@rambler.ru*

Железомарганцевые конкреции (ЖМК) содержат железо и марганец преимущественно в виде Fe³⁺ и Mn⁴⁺, и иногда в виде Fe²⁺, Mn³⁺ и Mn²⁺. Содержания FeO и MnO₂ в горных породах обычно находят с помощью метода мокрой химии, который достаточно трудоемок и имеет ряд ограничений при анализе ЖМК. Валентное состояние железа и марганца может быть оценено по линиям K-серии [1] и L-серии [2] рентгеновского эмиссионного спектра.

В работе выполнено сравнение погрешностей определения FeO/Fe₂O₃^{общ} и MnO₂/MnO^{общ} по отношениям интенсивностей линий K_{β2,5}/K_{β1,3} и L_{β1}/La_{1,2} на образцах мономинеральных фракций и оксидов железа и марганца (спектрометр S4 Pioneer, Bruker AXS). Сравнение показало предпочтительность выбора в качестве аналитического сигнала отношения K_{β2,5}/K_{β1,3}.

Оценка погрешности определения содержания MnO₂ проведена на выборке из 4 стандартных образцов ЖМК и стандартного образца марганцевой руды. Учтено спектральное наложение линий железа в области K_{β2,5}-линии марганца. Оценка погрешности определения MnO₂ составила 1,8 отн. %.

Оценку содержания FeO проводили по градуировочной выборке образцов оксидов и мономинеральных фракций железа. Показано, что железо в исследуемых стандартных образцах содержится преимущественно в виде Fe³⁺.

Проанализирован образец ЖМК (Geopt-23), включенный в программу международного межлабораторного эксперимента. Оценка содержания MnO₂ составила 51% при содержании MnO^{общ} 44,38%, а содержания FeO – ниже предела определения.

Метод рентгенофлуоресцентного анализа обладает низкими затратами на пробоподготовку и может быть использован для оценки валентного состояния железа и определения содержания MnO₂ в образцах ЖМК.

[1]. Филиппов М.Н., Куприянова Т.А., Лямина О.И., ЖАХ, 2001, т.56, №8, с.817-824.

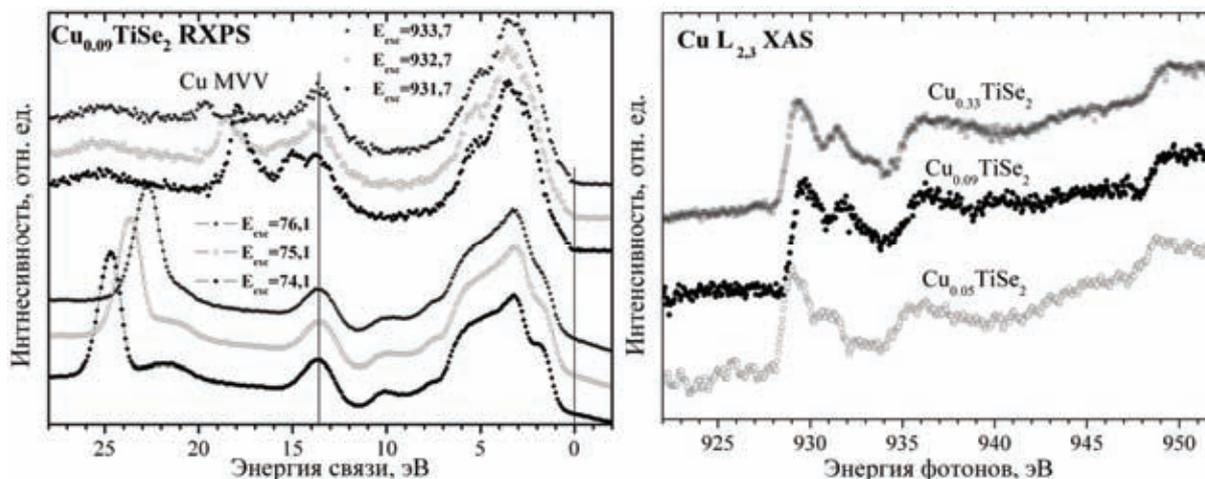
[2]. Albee A.L., Chodos A.A., Amer. Miner., 1970, v.55, N3/4, p.103-107.

РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОЭМИССИЯ И АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ Cu_xTiSe_2

Шкварин А.С., Ярошенко Ю.М., Скориков Н.А., Титов А.А., Титов А.Н.

*Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской, 18, shkvarin@ifmlrs.uran.ru*

Изучены резонансные $\text{Cu}3p$, $\text{Cu}2p$ спектры валентных полос, XPS внутренних уровней, XAS Ti , Cu монокристаллов $1\text{T-Cu}_x\text{TiSe}_2$ как в области устойчивости сверхпроводящего состояния ($x = 0,05$), так и за её пределами ($x=0,09-0,33$). В резонансных $\text{Cu}2p$ XPS валентных спектрах ($E_{\text{exc}}=933.7-935.7$ эВ) определено энергетическое положение $\text{Cu}3d$ состояний в валентной полосе. Вид валентных спектров, полученных в условиях $\text{Cu}3p$ ($E_{\text{exc}}=74-76$ эВ) резонанса радикально отличается от $\text{Cu}2p$ резонанса. Наблюдается несколько полос, соответствующих разным каналам распада возбуждённого состояния, характерных для малой величины энергии возбуждения (левая панель). Результаты модельных расчётов LDOS меди согласуются с экспериментальными данными, $\text{Cu}3d$ плотность электронных состояний занимает такой же энергетический интервал, как и $\text{Se}4p$. Выполнены мультиплетные расчёты $\text{Ti } L_{2,3}$ спектров поглощения. Показано, что атомы титана имеют степень окисления +4. По своей форме спектры титана совпадают со спектрами чистого TiSe_2 в отличие от соединений с другим $\text{Me}3d$ интеркалантом. Энергия связи основных $\text{Cu}2p$ уровней не отличается от металлической. Спектры $L_{2,3}$ поглощения меди отображают смешанное состояние ионизации $\text{Cu}^9-\text{Cu}^{10}$ в кристалле независимо от концентрации (правая панель).



Работа выполнена по проекту РФФИ 09-03-00053, междисциплинарному проекту №36 и двустороннему проекту «Российско-Германская лаборатория на BESSY» №81041.

**РЕНТГЕНОВСКАЯ ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
С РАЗРЕШЕНИЕМ ПО ГЛУБИНЕ: ПРИМЕНЕНИЕ
К ИССЛЕДОВАНИЮ НАНОСЛОЕВ**

Шулаков А.С.

*НИИ физики им. В.А. Фока,
Санкт-Петербургский государственный университет,
198504 Петродворец, Ульяновская ул. 1,
shulak@paloma.spbu.ru*

В докладе описываются физические принципы и модели, позволяющие организовать неразрушающий послойный анализ электронной и атомной структуры поверхностной области твердых тел с использованием мягких рентгеновских эмиссионных спектров, возбуждаемых пучками электронов или фотонов. При фотонном возбуждении спектров эмиссии сканирование по глубине осуществляется изменением угла падения излучения. Этот метод обеспечивает большую, по сравнению с электронным возбуждением, глубину исследования слоев и межфазовых границ, но теряет эффективность при исследовании структур толщиной менее ~10 нм из-за явления полного внешнего отражения рентгеновского излучения. Применение же электронных пучков позволяет исследовать такие структуры эффективно и с хорошим разрешением по глубине. Рекордным в этом отношении является изучение рентгеновских эмиссионных полос одного монослоя редкоземельных металлов.

Приводятся примеры исследования поверхности РЭМ и гетероструктур SiO_2/Si , $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$, HfO_2/Si , $\text{aSi}/\text{Al}/\text{cSi}$.

ИССЛЕДОВАНИЕ π -СОПРЯЖЕНИЯ В ЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛАХ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Юматов В.Д., Давыдова Н.В.

Новосибирский государственный педагогический университет, Новосибирск,
Виллюйская, 28, E-mail: chemistry@ngs.ru

Исследовались монозамещённые бензолы и полифторзамещённые бензолы методом MNDO и расчётами HF/STO-3G/3-21G/6-21G*/6-31G, DFT/6-31G*. Построены теоретические и экспериментальные рентгеновские спектры молекул,

В монозамещённых бензолах π -сопряжение осуществляется со стороны заместителя посредством орбитали, которую, по своей структуре, можно отнести к неподелённой паре электронов или близкой к ней. Перенос электронной плотности этих орбиталей от фенильного радикала к более электроотрицательному заместителю осуществляется, вероятно по σ -системе МО. Результатом проявления индуктивного эффекта является и то, что ВЗМО указанных соединений сильнее стабилизированы, чем вышеуказанная орбиталь молекулы бензола.

π -орбитали в полифторированных бензолах энергетически расположены существенно глубже и возникает преимущественная стабилизация σ -орбиталей по сравнению с таковой для π -орбиталей.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 4

**ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ,
КАТАЛИЗАТОРОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СЕНСОРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ SnO_2 МЕТОДОМ РФЭС

Бувайло А.И., Олексенко Л.П., Максимович Н.П., Матушко И.П.

*Киевский Национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев,
ул. Владимирская, 60, E-mail: crimea1@i.ua*

Известно, что для повышения чувствительности полупроводниковых сенсорных материалов к газам-восстановителям (H_2 , CH_4 , CO и др.), в их состав часто вводятся каталитически активные добавки переходных металлов и их соединений. При этом чувствительность сенсора будет в значительной степени определяться электронным состоянием введенного металла. В некоторых случаях, в процессе работы сенсора может устанавливаться равновесие между степенями окисления элементов в поверхностном слое. Такое поведение свойственно, например, для каталитически-активных добавок палладия на оксиде олова (IV) при их обработке водородно-воздушными газовыми смесями. Поэтому изучение валентного состояния поверхностных элементов в составе сенсорных материалов имеет важное значения для объяснения механизма действия сенсоров.

Целью данной работы было исследование валентного состояния палладия и кобальта в составе полупроводниковых сенсорных наноматериалов на основе SnO_2 с добавлением и без добавления Sb_2O_5 методом РФЭС. Добавки металлов вводились методом пропитки наноматериала растворами хлоридов этих металлов с последующей термической обработкой. Методом РФЭС было показано, что наличие в материале оксида сурьмы (V) (значение энергии связи электронов $\text{Sb } 3d_{5/2} E_{\text{св}} = 530,5$ эВ) способствовало стабилизации катионов палладия Pd^{2+} ($\text{Pd } 3d_{5/2} E_{\text{св}} = 337,4$ эВ), в то время как в случае сенсорного наноматериала без добавления Sb_2O_5 катионы палладия в поверхностном слое находятся в состоянии с меньшей энергией связи ($E_{\text{св}}=336,2$ эВ), что может свидетельствовать о большей степени ковалентности связи Pd-O. Для Co-содержащих наноматериалов, модифицированных сурьмой, зафиксировано наличие только катионов кобальта с энергией связи $3p_{3/2}$ -электронов Co $E_{\text{св}} = 781,4$ эВ, для сенсорных наноматериалов без добавления Sb_2O_5 , которые имеют более высокую чувствительность, характерно наличие двух состояний катионов кобальта с энергией связи 781,8 и 783, 6 эВ.

ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЯ Pd В НИЗКОПРОЦЕНТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ Pd/Al₂O₃ ПО ДАННЫМ XAFS И ЭПР

Володин А.М., Кривенцов В.В., Медведев Д.А., Якимчук Е.П.,
Новгородов Б.Н.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
volodin@catalysis.ru*

Представленная работа посвящена изучению методами XAFS спектроскопии и спиновых зондов (спектроскопия ЭПР) особенностей состояния Pd и центров его стабилизации для низкопроцентных (менее ~1%) Pd/Al₂O₃ катализаторов. В настоящее время подобные палладийсодержащие катализаторы представляют значительный интерес для обезвреживания автомобильных выхлопов и выбросов промышленных газов.

В работе использовались модельные низкопроцентные (менее ~1%) катализаторы Pd/Al₂O₃, приготовленные с использованием метода пропитки по влагоемкости из водных растворов нитрата и хлорида палладия. Спектры XAFS (Pd-K) исследованных образцов были записаны в СЦСИ (Новосибирск). В качестве спиновых зондов для изучения центров стабилизации нанесенного Pd использовались анион-радикалы 1-3-5-тринитробензола.

Методом XANES установлено, что палладий в исследованных образцах находится преимущественно в виде ионов Pd(2+) в плоскоквадратном ближайшем кислородном окружении. Наличие металлической фазы Pd⁰ в пределах точности метода не обнаружено. Методом EXAFS проведено детальное исследование особенностей локальной структуры активного компонента для образцов с различной предисторией. Показана возможность целенаправленного варьирования состояния сформированных на поверхности Al₂O₃ оксидных наноструктур палладия от атомарно-диспергированного до наночастиц PdO и рассмотрены возможные варианты их структурных моделей. Методом ЭПР показана важная роль донорных центров поверхности Al₂O₃ в стабилизации атомарно-диспергированных ионных форм палладия.

Работа проводилась при финансовой поддержке РФФИ (09-03-01012_а, 08-03-01150_а, 10-03-01005_а, 10-03-01209_а, 10-03-00691_а, 08-03-91758-AF_а, 08-03-92502-НЦНИЛ_а), ФАНИ РФ (контракт № 02.518.11.7128), проектов Президиума РАН по программе 27.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МОНОТЕЛЛУРИДА ГАЛЛИЯ (1 0 -2)

Волыхов А.А.¹, Яшина Л.В.¹, Васильев С.Ю.², Чайка А.Н.², Божко С.И.²

¹*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, andyvolikhov@yandex.ru*

²*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка*

Слоистые полупроводники A^3B^6 InSe, GaSe, GaS и GaTe привлекают большое внимание в связи с анизотропией их оптических и электрических свойств. Особое место среди них занимает обладающий низкосимметричной структурой монотеллурид галлия. Кроме того, для него характерна наиболее высокая в данном ряду реакционная способность.

Атомарно-чистая и окисленная поверхность GaTe (1 0 -2) исследовалась методами РФЭС/УФЭС (BESSY), ДМЭ, СТМ/АСМ, а также при помощи расчётов ab initio. Кинетика окисления исследовалась при помощи лабораторного спектрометра на монохроматическом $Al K_{\alpha}$ излучении.

Атомарно-чистая поверхность отвечает моноклинной структуре и характеризуется прямоугольной центрированной ячейкой (2.3x0.4 нм). Половина большого периода отвечает расположению полос димеров Ga-Ga.

Несмотря на неэквивалентное положение атомов Ga и Te в решётке, электронная плотность на них оказывается практически одинаковой (пики Ga 3d и Te 4d описываются единственными компонентами). Структуры валентной зоны хорошо согласуются с расчётными данными [1].

При окислении поверхности GaTe (1 0 -2) сухим воздухом наблюдается окисление атомов Ga до степени окисления +3 и в меньшей степени переход атомов Te в степень окисления +4. Окисление сопровождается сегрегацией атомов галлия на поверхности. Вторая стадия окисления, связанная с интенсивным окислением атомов теллура, сопровождается увеличением шероховатости.

[1]. Yamamoto A., Syouji A., Goto T., Kulatov E., Ohno K., Kawazoe Y., Uchida K., Miura N. Phys. Rev. B, v. 64, p. 035210

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-03-00991-а).

СТРОЕНИЕ, СТРУКТУРА И ОКИСЛЕНИЕ ПЛЁНОК МЕТАЛЛОВ, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ МИШЕНЕЙ ЧИСТЫХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Герасимов И.Н.¹, Акимов В.В.¹, Михлин Ю.Л.², Феоктистова Л.П.¹

¹Институт геохимии СО РАН, Иркутск, E-mail: alive_man@bk.ru

²Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск

Развитие технологий получения тонких плёнок металлов и сплавов является сегодня одним из наиболее актуальных направлений в физике и химии поверхности. В основном это обусловлено возможностями создания новых функциональных тонкоплёночных материалов, обладающих уникальными свойствами. Особый интерес, в этой связи, представляют плёнки благородных и тугоплавких металлов и сплавы на их основе.

Для получения плёнок нами использовались мишени из Au, Cu, W и нержавеющей стали с составом $Fe_{0.55}Cr_{0.29}Ni_{0.16}C_{0.001}$. Методом магнетронного распыления металлы наносились на подложки из высокоориентированного пирографита и термопленки для лазерных принтеров. Синтезированные пленки исследовались методами сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ), рентгеновской дифракции и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) с ионным травлением (после окисления при нормальных условиях на воздухе в течение 48 часов). По данным СЗМ размеры частиц плёнки золота не более 5-7 нм. Методом СЗМ также были изучены процессы перестройки и агрегирования наночастиц Au при нагревании до 550 °С в течение нескольких часов, было зафиксировано изменение линейных размеров частиц с 5 нм до 15-30 нм. Средний размер частиц медных пленок составил 15 нм. Установлено уменьшение параметра решетки 0.35568 нм (стандартное значение – 0.36151 нм). Окисленный слой составил менее 5 нм. Размеры частиц вольфрамовых пленок находились в области 15-20 нм и были представлены нестабильной формой W с гцк решеткой и $a=0.40481$ нм. Окисленный слой ~ 5 нм. Железо представлено α -, γ -Fe и Fe_2O_3 .

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №08-05-00636.

ЭФФЕКТЫ ПОДЗАРЯДКИ ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МЕТОДОМ ФЭС С ПРИМЕНЕНИЕМ СИ

Гуляев Р.В.¹, Стадниченко А.И.^{1,2}, Кощев С.В.¹, Боронин А.И.^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, пр-т Ак. Лаврентьева, 5. gulyaev@catalysis.ru

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Метод фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС) широко используются в гетерогенном катализе с целью получения детальной информации о составе и электронной структуре поверхности катализаторов. В связи с тем, что большинство из используемых сегодня катализаторов представляют собой диэлектрики, то одной из основных проблем, возникающих при использовании методов ФЭС в исследовании гетерогенных катализаторов, является подзарядка поверхности диэлектрического материала под воздействием ионизирующего излучения, приводящая к сдвигу и искажению фотоэлектронных линий относительно своего истинного положения.

В настоящей работе, на примере катализаторов низкотемпературного окисления оксида углерода Pd/CeO₂ показан масштаб данных эффектов подзарядки при использовании СИ в качестве первичного излучения. Используя сравнение с лабораторными источниками характеристического рентгеновского излучения, рассматривается влияние величины освещенности поверхности диэлектрика излучением на величину подзарядки и искажение фотоэлектронных линий. Также проведено изучение влияния способа нанесения порошков катализаторов на различные подложки на величины подзарядки поверхности образцов. Особый акцент в работе сделан на установление эффективности использования нейтрализаторов подзарядки поверхности (flood gun) при исследовании порошков диэлектриков методом ФЭС с применением СИ.

В результате проведенной работы установлены критерии корректного применения СИ к исследованию методом ФЭС диэлектрических образцов. Были найдены оптимальные способы нанесения порошков катализаторов, позволяющие получить неискаженные спектры ФЭС.

Данное исследование было выполнено в рамках двусторонней Российско-Германской программы «Russian-German Laboratory at BESSY», грант № 2010_1_91049.

**ПРИМЕНЕНИЕ ЭСДО ДЛЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ
ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ
PdO НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ**

**Данилова И.Г.¹, Бекк И.Э.^{1,2}, Худорожков А.К.^{1,2}, Зубавичус Я.В.³,
Велигжанин А.А.³, Зайковский В.И.¹, Бухтияров В.И.^{1,2}**

¹*Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН, Новосибирск.*

E-mail: danig@catalysis.nsk.su

²*Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

³*РНЦ «Курчатовский Институт», Москва*

Известно множество факторов, способных повлиять на активность нанесенных катализаторов, наиболее важными из которых являются размер частиц, состояние и структура активного компонента, в свою очередь регулируемые процедурой приготовления катализатора. Разработка методов приготовления Pd-содержащих гетерогенных катализаторов требует неразрушающего экспресс-метода для характеристики геометрических и электронных свойств активного компонента.

В данной работе на примере серии безхлоридных 1-2% Pd катализаторов, различающихся природой предшественника и методом приготовления, изучено влияние размеров частиц на электронные спектры диффузного отражения оксида палладия, нанесенного на SiO₂ и γ -Al₂O₃. С помощью методов РФА, EXAFS и XANES показано, что палладий во всех исследованных образцах катализаторов является двухвалентным и находится в кислородном окружении преимущественно в составе палладинита. Изменение электронных свойств активного компонента в объеме катализатора сопоставлено с соотношением различных форм окисленного палладия на поверхности катализаторов, оцененных по ИК-спектроскопии адсорбированного СО.

Показано, что при переходе от полиядерных оксидных кластеров палладия к кристаллитам PdO в электронных спектрах Pd²⁺ в D_{4h} симметрии происходит возрастание интенсивностей и сдвиг п.п. d-d переходов в длинноволновую область к положению п.п. репера – массивного тетрагонального PdO, а также частичное перекрывание п.п. d-d-переходов и полос переноса заряда L→M.

Использование выявленной закономерности позволит применять электронную спектроскопию для оценки дисперсности и электронного состояния палладия в гетерогенных катализаторах, а также их перспективности в качестве катализаторов окисления углеводородов и СО.

ПРЕДКАРЕВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СТРУКТУРАХ «КРЕМНИЙ НА ИЗОЛЯТОРЕ»

Домашевская Э.П., Турищев С.Ю., Терехов В.А.

*Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru*

Дифракция рентгеновского излучения ультрамягкого (нанометрового) диапазона длин волн в многослойных наноструктурах используется для его фокусировки, монохроматизации и разложения в спектр в соответствии с Брегговским отражением от сверхрешетки. Однако с явлением интерференции синхротронного излучения в нанослое кремния, нанесенного на диэлектрический слой SiO_2 (~150 нм.) на монокристаллической подложке Si (100) (структура кремний на изоляторе «КНИ») мы сталкиваемся впервые. Исследование методом XANES (X-ray adsorption near edge structure) вблизи $L_{2,3}$ – края поглощения кремния были проведены на синхротроне SRC (США). Угловая зависимость спектров XANES с шагом $\theta=2^\circ$ была получена на канале RGBL синхротрона BESSY – II (Германия).

При углах скольжения СИ $\theta < 21^\circ$ в структуре квантового выхода рентгеновского фотоэффекта χ в области энергий, предшествующей положению Si $L_{2,3}$ края поглощения элементарного кремния ≤ 100 эВ обнаружены резкие колебания интенсивности спектров в зависимости от энергии фотонов. При малых изменениях угла $\Delta\theta=2^\circ$ в интервале углов $4^\circ < \theta < 21^\circ$ фаза колебательной структуры спектра изменяется на противоположную. По положению соседних максимумов интерференции ультрамягкого рентгеновского излучения в спектрах XANES проведена оценка толщины нанослоя кремния (~ 80 нм) в трехслойной структуре растянутый Si – SiO_2 – подложка Si.

Дифрактометрическим методом установлено уменьшение параметров кристаллической решетки нанослоя растянутого кремния в нормальном направлении по отношению к подложке. Методом USXES (Ultrasoft X-ray emission spectroscopy) обнаружено увеличение межатомных расстояний Si-Si в искаженной решетке растянутого кремния структуры КНИ.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

**ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И МОДЕЛЬ
ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ
ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСЛОЕВ
ОКСИДОВ ОЛОВА**

**Домашевская Э.П.¹, Чувенкова О.А.¹, Рябцев С.В.¹, Турищев С.Ю.¹,
Кашкаров В.М.¹, Юраков Ю.А.¹, Щукарев А.В.²**

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru*

²*Университет Умея, Швеция*

Представлены результаты XPS (X-ray photoelectron spectroscopy) и XANES (X-ray absorption near edge structure) исследований газочувствительных нанослоев оксидов олова, полученных магнетронным распылением металла и последующим его окислением на воздухе при различных температурах. Данные получены на синхротронных центрах SRC (Стоутон, США), BESSY II (Берлин, Германия) и на XPS спектрометре фирмы KRATOS (Умея, Швеция).

Показано, что при температуре отжига 240°C в поверхностном слое образцов преобладающей фазой является монооксид олова. При увеличении температуры до 450 С фазовый состав соответствует диоксиду олова. Обнаружена повышенная сорбционная способность образцов, окисленных при 450°C. При поверхностном легировании нанослоев палладием наблюдаются Pd, PdO и PdO₂ с наиболее интенсивной компонентой PdO. Многократное попеременное воздействие газов O₂ и H₂ приводит к исчезновению диоксида палладия и восстановлению PdO до металлического Pd. При объемном легировании нанослоев палладием в поверхностном слое наблюдаются PdO и PdO₂, причем последний представлен двумя типами различных по размерам частиц.

Композиционная модель зонной структуры нанослоев SnO_x, полученная на основании совмещения данных XANES и XPS, выявила наличие перекрестных переходов с энергией 3,7 эВ в присутствии двух фаз SnO и SnO₂.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДЫ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГИСТЕРЕЗИСА В ОКИСЛЕНИИ ПРОПИЛЕНА НА ПАЛЛАДИИ МЕТОДАМИ РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Дубинин Ю.В., Матвеев А.В., Каичев В.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

E-mail: dubinin@catalysis.ru

В данной работе представлены результаты исследования реакции окисления пропилена кислородом на монокристаллах Pd(110) и Pd(551). Исследования проводились *in situ* методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и масс-спектрометрии [1] при давлений реакционной смеси в диапазоне от 10^{-7} до 10^{-2} мбар. Установлено, что активность катализатора в ходе нагрева резко возрастает при температурах 285, 230 и 210°C для отношений кислород/пропилен – 1:1, 10:1, 100:1, соответственно, в то время как резкий спад активности в процессе последующего охлаждения наблюдается при 150°C. Основными продуктами реакции являются CO₂ и вода.

Применение *in situ* РФЭС позволило подтвердить, что гистерезис активности тесно связан с гистерезисом содержания кислорода и углерода в приповерхностной области Pd. Состояние с низкой активностью соответствует фазе PdC_x, образующейся на поверхности из-за осаждения углерода и дальнейшего его частичного растворения в приповерхностных слоях. Данная фаза образуется при низкой температуре даже в избытке кислорода и приводит к дезактивации катализатора. При нагревании углерод удаляется кислородом газовой фазы. При охлаждении с высоких температур доминирующим процессом является образование слоя адсорбированного кислорода и поверхностного оксида, которые препятствуют осаждению углерода даже при 150 °С. Обнаружена строгая зависимость конверсии пропилена от отношения кислород/пропилен. Уменьшение степени конверсии пропилена с ростом парциального давления кислорода объясняется блокирующим эффектом адсорбирующегося кислорода и образующегося поверхностного оксида. Следовательно, наибольшую каталитическую активность проявляет чистая металлическая поверхность палладия, наличие которой является необходимым условием протекания диссоциативной адсорбции C₃H₆ и O₂.

[1]. Bukhtiyarov V.I., Kaichev V.V., Prosvirin I.P. // Topics Catal. 2005. Vol. 32. P. 3.

ЭЛЕКТРОННЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТА НА АЗОТ-СОДЕРЖАЩЕМ АМОРФНОМ УГЛЕРОДЕ ПО ДАННЫМ РФЭС

Исмагилов И.З.¹, Keller V.², Керженцев М.А.¹, Шикина Н.В.¹, Барнаков Ч.Н.³, Sakashita M.⁴, Bernhardt P.², Garin F.², Исмагилов З.Р.¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
iismaqil@catalysis.ru

²Université de Strasbourg, Strasbourg, France

³Институт угля и углехимии СО РАН, Кемерово, Россия

⁴Japan Technical Information Services Corporation, Tokyo, Japan

Катализаторы состоящие из переходных металлов нанесенных на модифицированные углеродные носители рассматриваются как альтернатива более дорогостоящим платиновым катализаторам применяемым в топливных элементах для катодной реакции $O_2 + 4H^+ + 4e^- = 2H_2O$ [1]. В данной работе методом РФЭС исследованы свойства катализаторов на основе кобальта нанесенного на азот-содержащий аморфный супермикропористый углерод [2]. Количественное разложение спектров основных уровней C1s, N1s, O1s и Co2p на компоненты по химическим состояниям показывает, что в состав исходного носителя, полученного пиролизом 1,10-фенантролина C₁₂H₈N₂, входят N- и O-содержащие группы. Нанесение Co из нитрата Co(NO₃)₂ влияет на спектры N1s и O1s, в то время как Co представлен в основном оксидами CoO и Co₃O₄, а также изолированными ионами Co²⁺ порфиринового типа связанными с атомами азота, что означает формирование активных центров катализатора [3]. Последующая обработка в H₂SO₄ приводит к селективному удалению избытка оксидов Co. Анализ областей валентных уровней O2s, Co3p и Oже-переходов O(KL₂₃L₂₃) дает дополнительную информацию об электронных свойствах катализаторов, их структурные особенности уточнены с использованием модели «случайно ориентированных слоев» углеродного носителя, и все это в целом позволяет интерпретировать их электрокаталитическую активность.

- [1]. Koshino N., Higashimura H., Platinum-free Catalysts for Fuel Cell Cathode, in: Molecular Catalysts for Energy Conversion, Springer Series in Materials Science, 2008, 111, 163-184.
- [2]. Ismagilov Z.R., Kerzhentsev M.A., Shikina N.V., Lisitsyn A.S., Okhlopkova L.B., Barnakov Ch.N., Sakashita M., Iijima T., Tadokoro K., Catal. Today 2005, 102-103, 58-66.
- [3]. Kiros Y., Int. J. Electrochem. Sci. 2007, 2, 285-300.

Благодарности: Авторы признательны NEDO (New Energy Development Organization, Tokyo, Japan) и INTAS (International Association for the promotion of co-operation with scientists from the New Independent States of the former Soviet Union, Brussels, Belgium) за организационную и финансовую поддержку представленной работы.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС СОСТОЯНИЙ КИСЛОРОДА, ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ ПЛАТИНОВОЙ ГРУППЫ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОКИСЛЕНИИ АКТИВИРОВАННЫМ КИСЛОРОДОМ

Ки́бис Л.С.¹, Стадниченко А.И.^{1,2}, Кощев С.В.¹, Боронин А.И.^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
Новосибирск 630090, пр. Ак. Лаврентьева, 5; E-mail: kibis@catalysis.ru

²Новосибирский государственный университет,
Новосибирск 630090, ул. Пирогова, 2

Платиновые металлы широко используются в гетерогенном катализе для осуществления реакций окисления. Одним из наиболее важных вопросов при изучении свойств катализаторов является определение форм кислорода, обладающих высокой реакционной способностью и ответственных за направление реакций. Для выяснения природы активных состояний катализатора в первую очередь необходимо проводить исследования на модельных системах представляющих собой наночастицы металлов на инертных носителях или системах типа Me/MeO_x.

Целью данной работы являлось исследование методом РФЭС состояний кислорода, образующихся при низкотемпературном окислении ВЧ-разрядом в O₂. Объектами изучения являлись массивные фольги металлов (Pt и Pd), а также окисленные наночастицы, полученные распылением металлической антенны в плазме кислорода. Эксперименты были проведены на приборе VG ESCALAB HP.

Прецизионное исследование спектров Pd3d окисленной палладиевой фольги позволило выделить наряду с линией оксида палладия PdO ($E_{св}(Pd3d_{5/2}) = 336.9$ эВ) состояние с $E_{св}(Pd3d_{5/2}) = 338.9$ эВ, которое может быть проинтерпретировано как оксид палладия PdO₂. Распыление палладиевой антенны ВЧ-разрядом в кислороде дало возможность получить наночастицы оксида палладия PdO₂ и надежно зафиксировать его характеристики в спектрах Pd3d и O1s. Плазменный разряд в атмосфере O₂, приложенный к платиновой антенне, приводил к формированию состояния в степени окисления Pt⁺⁴ ($E_{св}(Pt4f_{7/2}) = 74.0$ эВ), которое при повышении температуры переходило в состояние Pt⁺² ($E_{св}(Pt4f_{7/2}) = 72.6$ эВ). В работе было проведено исследование реакционной способности полученных окисленных форм платины по отношению к CO.

**АСМ - ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ И МОРФОЛОГИИ
ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ТВЕРДЫХ
КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ МЕДИ И ЖИДКОГО ГАЛЛИЯ**

Ковалёва С.А.¹, Витязь П.А.¹, Григорьева Т.Ф.²

¹*Объединённый институт машиностроения НАН Беларуси,
Минск, 220072, ул. Академическая, 12, sveta.kovaleva@tut.by*

²*Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Изучение взаимодействия меди с расплавом галлия лежит в основе разработок металлических клеев, характеризующихся хорошей смачиваемостью и адгезией не только к металлическим, но стеклянным и керамическим поверхностям, и обладающие металлической проводимостью и теплопроводностью. Основным продуктом такого взаимодействия является интерметаллид CuGa_2 . Этот процесс диффузионный, и предполагается, что при этом идёт взаимная диффузия через слой продукта. В процессе сплавообразования компонентов, один из которых находится в жидком состоянии, принципиально имеет значение вопрос о механизме диффузионного взаимодействия твердой и жидкой фаз.

В работе изучался процесс взаимодействия на границе твердой/жидкой фаз.

В работе методами атомно-силовой микроскопии, сканирующей электронной микроскопии в прямых и обратно рассеянных электронах, а также микрорентгеноспектрального анализа исследованы кинетика и морфология поверхности раздела меди и жидкого галлия.

Изучены морфология и особенности взаимного распределения фаз в многокомпонентных системах Cu-Bi-Ga , Cu-In-Ga , Cu-Sn-Ga . Формирование фаз в указанных системах может идти как параллельно, так и последовательно.

Работа выполняется в рамках интеграционного проекта СО РАН № 138 и БРФФИ №Т09СО-014 «Создание фундаментальных основ воздействия активации на регулирование процессов взаимодействия твердых металлов и их соединений с металлическими расплавами с целью создания функциональных материалов с заданной структурой и свойствами».

ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ПЛАТИНА-КОБАЛЬТ И ПЛАТИНА-НИКЕЛЬ

Козинкин А.В.¹, Власенко В.Г.¹, Куликова О.В.¹, Швачко О.В.¹,
Высочина Л.Л.², Гутерман В.Е.², Зубавичус Я.В.³

¹НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, kozinkin@ip.rsu.ru

²Химический факультет ЮФУ, Ростов-на-Дону

³Курчатовский синхротронный центр, Москва

Методами рентгеновской дифракции, рентгеновской эмиссионной и EXAFS - спектроскопии проведены исследования электронного и атомного строения металлических наночастиц, стабилизированных на углеродных носителях (Vulcan XC72 и TIMREX HSAG 300), в новых наноструктурированных катализаторах Pt_xCo/C и Pt_xNi/C различного состава, с мольным соотношением (x) платины и металлов (кобальта, никеля) от 1 до 3.

Рентгеновские спектры поглощения Co K - и Ni K - краев и Pt L_{III} - края получены в режиме пропускания на EXAFS-спектрометре в Курчатовском синхротронном центре (г. Москва). Рентгеновские эмиссионные CoKβ₅ -, NiKβ₅ - спектры получены на длинноволновом рентгеновском спектрографе ДРС–2м.

Наночастицы исследованных катализаторов и металлическая платина дают весьма близкие дифракционные картины. Установлено, что наночастицы в Pt_xCo/C и Pt_xNi/C (x=1-3) катализаторах имеют размер от 2 до 4 нм. Установлено, что расстояния Pt - Pt в наночастицах имеют меньшие значения, R = 2.68 – 2.72 Å, чем в объемной платине R= 2.75 Å, что характерно для металлических наночастиц. Доказано, что атомы кобальта и никеля образуют химические связи с атомами платины, т.е. исследованные наночастицы действительно являются биметаллическими.

Показано, что поверхностные атомы кобальта и никеля в наночастицах Pt_xCo и Pt_xNi взаимодействуют с атомами углерода матрицы. Для ряда образцов нанокатализаторов Pt_xCo/C и Pt_xNi/C наблюдается дополнительное окисление поверхностных атомов кобальта и никеля соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)», проект 2.1.1/3690.

**ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ
КОБАЛЬТА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ
МИКРОГРАНУЛ ОКСИДА КРЕМНИЯ**

**Козинкин А.В.¹, Власенко В.Г.¹, Татевосян М.М.¹, Швачко О.В.¹,
Волков А.Н.², Юрков Г.Ю.²**

¹*НИИ Физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, kozinkin@ip.rsu.ru*

²*Учреждение Российской академии наук, Институт металлургии и
материаловедения А.А. Байкова РАН, Москва*

Методами рентгеновской дифракции, рентгеновской эмиссионной и EXAFS - спектроскопий проведены исследования электронного и атомного строения наночастиц кобальта, стабилизированных на поверхности микрогранул оксида кремния. Средний размер микрогранул SiO₂ по данным электронной микроскопии составлял 750 нм, а размер наночастиц кобальта на их поверхности 15±5 нм. Для металлизации поверхности гранул SiO₂ использовался метод термического разложения металлсодержащих соединений [1]. В качестве исходных металлсодержащих соединений были выбраны формиат и ацетат кобальта.

Доказано, что из формиата кобальта образуются наночастицы кобальта имеющие кристаллическую структуру как ГЦК, так и ГПУ. EXAFS - спектры подтверждают образование металлических наночастиц, в МФП которых проявляются более 5 координационных сфер, что находится в хорошем соответствии с дифракционными данными. Наблюдается только небольшое уменьшение координационных чисел (КЧ), например для 1 координационной сферы КЧ=10. При прокаливании этого образца на воздухе, часть металлической фазы в наночастицах окисляется.

Из анализа EXAFS образца, полученного из ацетата кобальта, установлено образование только наночастиц оксида кобальта. Методом рентгеновской дифракции в этом случае не удастся зарегистрировать дифракционных пиков, что свидетельствует о том, что синтезированные наночастицы из ацетата кобальта являются рентгеноаморфными.

[1]. Юрков Г.Ю., Попков О.В., Кокшаров Ю.А., Баранов Д.А., Губин С.П. Неорганические материалы, 2006, том 42, № 8, с. 970–975.

СТРОЕНИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ

Кочубей В.И.¹, Конюхова Ю.Г.¹, Кособудский И.Д.³, Ушаков Н.М.²,
Музалев П.А.³, Кульбацкий Д.М.³

¹*Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, kochubey@optics.sgu.ru*

²*Саратовский филиал института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Саратов*

³*Саратовский государственный технический университет, Саратов*

Содержащие медь наночастицы с различной степенью окисления в полимерной матрице представляют интерес для создания оптоэлектронных устройств. Очевидно, что структура, оптические и электрические свойства таких частиц и нанокompозитных материалов на их основе зависит как от размера наночастиц, так и от степени окисления меди. В то же время состав наночастиц определяется технологией их синтеза и используемыми прекурсорами. В данной работе рассматриваются зависимости степени окисления медьсодержащих наночастиц, синтезированных в полиэтилене высокого давления, их структуры и оптических свойств от условий синтеза. Структура этих частиц, а также влияние на их структуру условий синтеза изучены методом EXAFS.

Синтез наночастиц проводился путем термического разложения одноводного диацетата меди $((\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Cu}\cdot\text{H}_2\text{O})$ в расплаве полиэтилена. Степень окисления, размеры и концентрация наночастиц варьировались временем синтеза и количеством использованного прекурсора. Распределение по размерам наночастиц устанавливалось с помощью электронной микроскопии.

Известно, что степень окисления меди в таких наночастицах изменяется с размером, и, как правило, центральное неокисленное ядро покрыто слоями с большей степенью окисления. Методом EXAFS получены данные, позволяющие сопоставить процентное соотношение различных фаз наночастиц в зависимости от их размера. Из экспериментальных спектров диффузного отражения и пропускания нанокompозитных образцов рассчитаны спектральные зависимости коэффициентов поглощения и рассеяния. Показано, что полидисперсность наночастиц в образцах приводит к сильному размытию формы края поглощения.

Работа частично финансировалась грантом РФФИ 08-02-00404.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ CuFeS_2

**Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Шкумат П.Н., Кулагин Б.Б.,
Никифоров И.Я.**

*Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону,
Россия, E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru*

Соединение CuFeS_2 является полупроводником, но выше температуры Нееля $T_N = 820$ К в нем наблюдается разрушение магнитного антиферромагнитного упорядочения, что приводит к наблюдаемой ширине запрещенной полосы E_g от 0.43 до 0.53 эВ [1]. Используя ab initio модифицированный метод ППВ (программа Wien2k [2]), проведено исследование систематического влияния магнитного упорядочения на электронно-энергетическую структуру соединения CuFeS_2 .

Было смоделировано ферромагнитное и антиферромагнитное упорядочение CuFeS_2 и получены зонные структуры $E(k)$ и плотности электронных состояний (DOS) для них. Согласно проведенным расчетам, в ферромагнитном состоянии CuFeS_2 является проводником, что не соответствует экспериментальным данным. В случае антиферромагнетика была получена нулевая запрещенная полоса. Это связано с известной проблемой приближения локального функционала плотности (LDA), для коррекции которого был использован LDA+U подход [3]. Для значения $U = 6$ эВ была получена $E_g = 0.381$ эВ, что соответствует экспериментальному значению E_g для CuFeS_2 [1].

- [1]. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ. Справочник. Под редакцией А.В. Новоселовой. М., «Наука», 1978, 338 с.
- [2]. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J. WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties. –Karlheinz Schwarz, Austria, Techn. Universität Wien, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
- [3]. Madsen G.K.H., Novak P. Charge order in magnetite. An LDA+U study. Europhys. Lett., 69(5), pp. 777-783 (2005).

КЛАСТЕРНЫЕ РАСЧЕТЫ И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОКСИДОВ $ZrTiO_4$ И $HfTiO_4$

Лаврентьев А.А.¹, Габрельян Б.В.¹, Шкумат П.Н.¹, Никифоров И.Я.¹,
Бондаренко Т.Н.², Копылова Е.И.², Хижун О.Ю.², Rehr J.J.³

¹*Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону,
Россия, E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru*

²*Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины,
Киев, Украина*

³*Department of Physics, University of Washington, Seattle, WA 98195-1560, USA*

Кластерным методом по программе FEFF8 [1] рассчитаны полные и парциальные плотности электронных состояний всех компонентов оксидов $ZrTiO_4$ и $HfTiO_4$ – изоструктурных соединений, которые кристаллизуются в орторомбической структуре типа α - PbO_2 [2]. Особенностью указанных титанатов является статистическое заполнение атомами титана и циркония(гафния) октаэдрических междоузлий, что делает чрезвычайно сложным использование зонных методов для исследования электронной структуры $ZrTiO_4$ и $HfTiO_4$ – диэлектриков, которые широко используются в беспроводных системах связи и спутниковой коммуникации [3,4]. В настоящей работе получены экспериментальные рентгеновские эмиссионные $TiL\alpha$ -, $ZrL\beta_{2,15}$ - и $Ok\alpha$ -полосы, отображающие, соответственно, энергетическое распределение преимущественно $Ti3d$ -, $Zr4d$ - и $O2p$ -состояний, а также рентгеновские фотоэлектронные спектры валентных и остовных электронов оксидов $ZrTiO_4$ и $HfTiO_4$. Данные FEFF8-расчетов свидетельствуют о том, что в указанных оксидах наибольший вклад в валентную зону осуществляют $O2p$ -состояния, причем их наибольший вклад наблюдается у потолка валентной зоны $ZrTiO_4$ и $HfTiO_4$. В указанных титанатах у дна зоны проводимости преобладают вклады $Ti3d^*$ -состояний, с немного меньшей долей вкладов $Zr4d^*/Hf5d^*$ - и $O2p^*$ -состояний. Достигнуто хорошее соответствие теоретических и экспериментальных данных для исследуемых титанатов циркония и гафния.

- [1]. A.L. Ankudinov, B. Ravel, J.J. Rehr, S.D. Conradson, Phys.Rev.B. 58, N12 (1998) 7565.
[2]. Krebs M.A., Condrate R.A., J. Mater. Sci. Lett., 1988, Vol. 7, p. 1327-1330.
[3]. Kim T., Oh J., Park B., Hong K.S., Appl. Phys. Lett., 2000, Vol. 76, p. 3043-3045.
[4]. Victor P., Bharadwaja S.S.N., Nagaradju J., Krupanidhi S.B., Solid State Commun., 2001, Vol. 120, p. 379-382.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА Ti_4Fe_2O ПО ДАННЫМ ЗОННОГО РАСЧЕТА «ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ» И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаврентьев А.А.¹, Габрельян Б.В.¹, Шкумат П.Н.¹, Никифоров И.Я.¹,
Завалий И.Ю.², Извеков А.В.³, Хижун О.Ю.³

¹*Донской государственной технической университет, Ростов-на-Дону,
Россия, E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru*

²*Физико-механический институт НАН Украины, Львов, Украина*

³*Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины,
Киев, Украина*

В настоящей работе получены экспериментальные рентгеновские эмиссионные $TiL\alpha$ -, $FeL\alpha$ - и $OK\alpha$ -полосы, отображающие, соответственно, энергетическое распределение преимущественно $Ti3d$ -, $Fe3d$ - и $O2p$ -состояний, а также рентгеновские фотоэлектронные (РФ) спектры валентных и остовных электронов соединения Ti_4Fe_2O – эффективного поглотителя водорода для энергетических ячеек. Модифицированным методом ППВ (программа WIEN2k [1]) рассчитаны полные и парциальные плотности электронных состояний всех компонентов оксида Ti_4Fe_2O . Данные ППВ-расчета соединения Ti_4Fe_2O , а также совмещение в единой энергетической шкале ультрамягких рентгеновских эмиссионных $TiL\alpha$ -, $FeL\alpha$ - и $OK\alpha$ -полос, свидетельствуют о том, что $O2p$ -состояния в этом оксиде локализованы преимущественно у дна валентной зоны, а основной вклад у потолка валентной зоны осуществляют $Fe3d$ - и $Ti3d$ -состояния. Основной вклад в дно зоны проводимости оксида Ti_4Fe_2O , по результатам настоящего ППВ-расчета, вносят $Fe3d^*$ - и $Ti3d^*$ -состояния. Рентгеноспектральными методами исследовано влияние нестехиометрии оксидной подрешетки на электронную структуру соединения Ti_4Fe_2O . Согласно данным РФ-исследований, в оксиде Ti_4Fe_2O небольшой перенос заряда наблюдается в направлении $Ti \rightarrow O$ и положительный эффективный заряд на атоме титана незначительно уменьшается в последовательности $Ti_4Fe_2O \rightarrow Ti_4Fe_2O_{0.5} \rightarrow Ti_4Fe_2O_{0.25}$. В вышеуказанной последовательности соединений наблюдается монотонное снижение относительной интенсивности $OK\alpha$ -полосы. При этом, энергетическое положение $TiL\alpha$ -, $FeL\alpha$ - и $OK\alpha$ -полос, совмещенных в единой энергетической шкале, не изменяется относительно положения уровня Ферми энергоанализатора электронного спектрометра ЭС-2401.

[1]. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J. WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties. –Karlheinz Schwarz, Austria, Techn. Universität Wien, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.

НАНОРАЗМЕРНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ PtCu/C: СИНТЕЗ И АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES

Ломаченко К.А., Ластовина Т.А., Гутерман В.Е., Солдатов А.В.

*Южный федеральный университет, 344006 Ростов-на-Дону,
ул. Большая Садовая, 105/42, kirlom@list.ru*

Низкотемпературные топливные элементы являются перспективными источниками электрической энергии. Для повышения их эффективности в материал катода вводят платиновые катализаторы, легированные d-металлами (Cu, Co, Fe, Ni, Cr, Ru, Re, V и др.). Распределение платины и легирующего компонента в наночастицах биметаллических катализаторов может оказывать существенное влияние на их свойства. Предельный случай биметаллических катализаторов с неоднородным распределением компонентов – катализаторы со структурой «оболочка-ядро».

Частицы Pt_xCu со структурой «оболочка-ядро» были синтезированы различными методами. Кроме того, путем одновременного восстановления платины и меди был получен образец сплава Pt-Cu на углеродной подложке.

Электрохимическое поведение катализаторов было определено методами циклической вольтамперометрии и хроноамперометрии, истинная площадь поверхности – электрохимической десорбцией CO.

Параметры локальной атомной и электронной структуры синтезированных наночастиц были определены методами спектроскопии XANES. Экспериментальные спектры XANES K-края Cu и L₃-края Pt были получены на лабораторном спектрометре Rigaku R-XAS в режиме флюоресценции. Дальнейшее теоретическое моделирование спектров исследуемых катализаторов проводилось методом полного многократного рассеяния (FEFF 9.0) и методом конечных разностей в полном потенциале (FDMNES 2009). Были построены модели, теоретический спектр которых имеет хорошее согласие с экспериментом. Структура наночастиц была определена путем сопоставления теоретических и экспериментальных спектров.

Существенные различия в XANES спектрах образцов, синтезированных различными методами, а также хорошее согласие теоретических результатов с экспериментальными свидетельствуют о возможности контролировать процесс синтеза для получения материалов с требуемыми характеристиками.

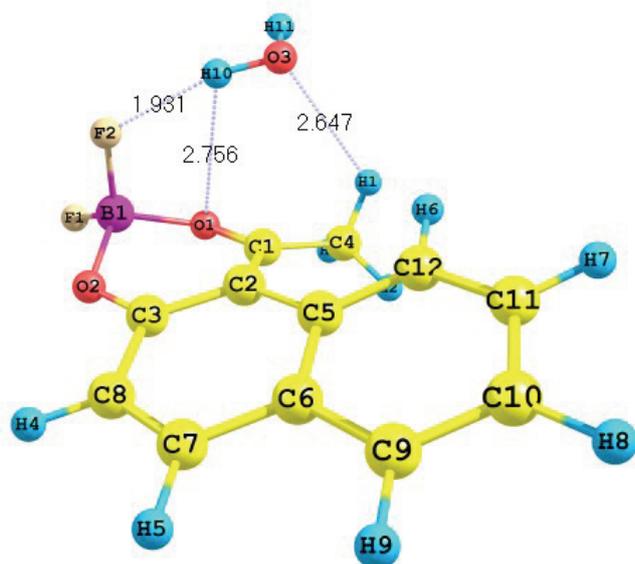
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ПРОЦЕССА ГИДРАТАЦИИ 2,2-ДИФТОРО-4-МЕТИЛНАФТО-[1,2-Е]-1,3,2-ДИОКСАБОРИНА

Львов И.Б.¹, Федоренко Е.В.², Вовна В.И.¹

¹Дальневосточный государственный университет, Владивосток,
ул. Суханова, 8, lvov@vdo.dvgu.ru

²Институт химии Дальневосточного отделения РАН, Владивосток

β -Дикетонаты дифторида бора, обладающие интенсивной флуоресценцией как в кристаллическом, так и в растворенном состоянии, являются перспективными для использования в качестве люминесцентных красителей для полимеров. Для некоторых соединений данного класса обнаружен эффект «включения-выключения» люминесценции при добавлении воды к их растворам в органических растворителях. С целью объяснения этого эффекта нами проведено квантовохимическое моделирование процесса гидратации 2,2-дифторо-4-метилнафто-[1,2-е]-1,3,2-диоксаборина (1-ацетил-2-нафтолята дифторида бора). Используемая программа – GAMESS/Firefly, метод ТФП,



базис 6-31**, функционал B3LYP5. Обнаружены места наиболее вероятной локализации молекулы растворителя (рис.). Такое расположение молекул воды, очевидно, способствует обратимому удалению молекулярных слоёв друг от друга, что ярко проявляется в спектрах люминесценции и поглощения и способствует эффекту

«включения-выключения» люминесценции. Экспериментально наблюдаемые сдвиги спектральных полос совпадают с результатами расчета электронных спектров методом TDDFT.

Квантовохимические расчеты позволили установить природу возбужденных состояний и электронных переходов. Помимо этого, подтверждена неплоская геометрическая структура 1-ацетил-2-нафтолята дифторида бора.

ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ КАК ТЕСТ НА РЕАКЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ЦЕНТРА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ОЛЕФИНОВ

Львовский В.Э., Фушман Э.А., Лалаян С.С.

*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН,
119991 Москва, ул. Косыгина, 4, vl.lvovskiy@mail.ru*

Полиолефиновая цепь в металлокомплексном катализе растет путем внедрения олефина по σ -связи переходный металл–углерод (M-C) в ионных парах $[LM-Alkyl]^+A^-$, образующихся в реакции соединения M с сокатализатором.

Наши *ab initio* расчеты энергетического барьера внедрения (ΔE) молекулы C_2H_4 в связь M-Me катионов $[LM-Me]^+$ (M = Ti, Zr; L = 2H, 2Cl, 2Cr, H_2CCr_2 , $H_2Si(Cr)NH$) методом MP2 и расчеты (CASSCF) энергии синглет-синглетного возбуждения $\Delta E(S_0 \rightarrow S_1)$, необходимого для переноса электронной плотности со связи на d-орбитали M в этих катионах, обнаружили линейную зависимость ΔE от $\Delta E(S_0 \rightarrow S_1)$. Это ранее предсказала качественная модель связи Ti-Me [1].

Если при изменении L в коротковолновую область сдвигается полоса поглощения нейтрального метильного производного металлоцена, которая соотносится с переходом, продиктованным переносом электронной плотности (M-Me) \rightarrow M, то это должно говорить об увеличении ΔE , то есть об уменьшении реакционной способности связи в каталитической частице. В частности, в случае Cr_2ZrMe_2 переходу (M-Me) \rightarrow M соответствует $\Delta E(S_0 \rightarrow S_1)$ (т.е. длинноволновая полоса поглощения в эксперименте ($\lambda_{max}=330$ нм)), а ΔE для $[Cr_2Zr-Me]^+$ равен 39.3 кДж/моль. Тогда как в спектре $Me_2CCr_2ZrMe_2$ за полосу (M-Me) \rightarrow M отвечает $\lambda_{(Zr-Me) \rightarrow Zr} = 309$ нм (в данном случае это переход $S_0 \rightarrow S_2$), а ΔE в $[Me_2CCr_2Zr-Me]^+$ составляет 56.8 кДж/моль.

Энергии $\Delta E(S_0 \rightarrow S_1)$ для отнесения полос в экспериментальных спектрах рассчитывали модифицированным нами методом INDO [2].

В случаях, когда в ряду метилированных комплексов полосе (M-Me) \rightarrow M соответствует переход $S_0 \rightarrow S_1$, λ_{max} в эксперименте является тестом на их активность (если внедрение – скорость-определяющая стадия). Очевидно, это имело место для анса-цирконоценов с IND-лигандами, активированных MAO [3].

[1]. Львовский В.Э., Фушман Э.А., Дьячковский Ф.С., Ж. физ. химии, 1982, т. 56, с. 1864-1875.

[2]. Львовский В.Э., Фушман Э.А., Лалаян С.С., Высокомол. соед., 2008, т. 50, с. 1935-1952.

[3]. Alonso-Moreno C. *et al.*, Applied Organomet. Chem., 2009, v. 23, p. 241-244.

Работа поддержана РФФИ (проекты 04-03-33042-а, 07-03-01141-а).

**ГРАНУЛИРОВАННЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ $Fe_x(SiO_2)_{100-x}$,
ПОЛУЧЕННЫЕ МЕХАНОАКТИВАЦИЕЙ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ**

Маратканова А.Н., Ломаева С.Ф.

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск
E-mail: alnima08@mail.ru*

В последнее время внимание исследователей привлечено к созданию гранулированных композиционных материалов, представляющих собой системы, состоящие из проводящих металлических гранул, равномерно диспергированных в матрице диэлектрика. Такие системы обладают комплексом особых электрофизических свойств, что позволяет рассматривать их как новые эффективные материалы для использования в устройствах СВЧ-радиоэлектроники. Кроме того, такие материалы могут быть использованы в качестве хорошо контролируемой системы для исследования фундаментальных физических явлений.

Одним из наиболее перспективных физических методов получения таких систем является механосинтез.

В работе методами рентгеноструктурного анализа, рентгеноэлектронной, Оже-электронной и мессбауэровской спектроскопии, магнитометрии исследованы структура, химический и фазовый состав, магнитные свойства нанокompозитов, полученных механохимическим синтезом из смесей $Fe_x(SiO_2)_{100-x}$, в различных весовых соотношениях ($x = 30, 70, 90, 95$). Механосинтез осуществляли в шаровой планетарной мельнице Fritsch-P7 с использованием шаров и ступок из стали ШХ15 в различных средах (Ag, воздух, ацетон, ВТЭС и др.).

Работа поддержана грантом РФФИ №09-08-00158.

**IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНОЛА НА ПЛАТИНЕ
МЕТОДАМИ РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ**

Миллер А.В., Каичев В.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
E-mail: miller@catalysis.ru*

Методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и масс-спектрометрии проведено *in situ* исследование окисления метанола на поверхности Pt(111). Эксперименты проводились на фотоэлектронном спектрометре VG ESCALAB HP, специально разработанном компанией «Vacuum Generators» (Великобритания) для записи фотоэлектронных спектров в режиме *in situ* [1, 2]. Аббревиатура HP в его названии обозначает «высокое давление» (*high pressure*) и отражает его отличие от серийных спектрометров возможностью записи фотоэлектронных спектров при давлении газа над образцом вплоть до 0.1 мбар, что на 5 порядков превышает давление, допустимое в обычных спектрометрах. Показано, что при низкой температуре в диапазоне 300–450 К поверхность платины покрыта углеродными отложениями, образующимися в результате разложения метанола, которые блокируют поверхность и препятствуют протеканию катализа. В присутствии кислорода в реакционной смеси при нагреве до температур выше 450 К происходит удаление углеродных отложений, и, как следствие, с заметной скоростью протекает конверсия метанола. Скорость конверсии увеличивается с ростом температуры. Основным маршрутом реакции является полное окисление метанола с образованием CO₂ и воды. Показано, что окисление метанола на платине протекает по двум конкурирующим маршрутам: полное дегидрирование метанола до CO с последующим его окислением до CO₂, и окисление метанола, протекающее через образование и разложение формиатов. В последнем случае образуются CO₂ и H₂, однако водород на платине также частично окисляется до воды.

- [1]. Joyner R.W., Roberts M.W., Yates K. A «High-Pressure» Electron Spectrometer for Surface Studies // Surf. Sci. 1979. Vol. 87. P. 501–509.
- [2]. Bukhtiyarov V.I., Kaichev V.V., Prosvirin I.P. X-Ray Photoelectron Spectroscopy as a Tool for *in situ* Study of the Mechanisms of Heterogeneous Catalytic Reactions // Topics Catal. 2005. Vol. 32. P. 3–15.

ОКИСЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ PbS (001) В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ

Неудачина В.С.^{1,2}, Яшина Л.В.^{1,2}, Иткис Д.М.³, Белогорохов А.И.²

¹*Химический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,*

e-mail: vera_neudachina@mail.ru

²*Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности (ОАО «ГИРЕДМЕТ»), Москва*

³*Факультет наук о материалах Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва*

Процессы на поверхности сульфида свинца широко исследовались ранее в связи с добычей и переработкой галенита, изготовлением и эксплуатацией различных оптоэлектронных и термоэлектрических устройств, однако полученные данные являются противоречивыми и зачастую неполными. В настоящей работе для получения информации о механизме процессов, протекающих при экспозиции поверхности монокристаллов PbS (001) на воздухе в течение длительного времени (3 мин – 6 месяцев) при различной влажности, был использован комплекс методов: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, в том числе с синхротронным источником излучения (BESSY 2, RGL), сканирующая туннельная микроскопия, атомно-силовая микроскопия.

В результате анализа совокупности экспериментальных данных обнаружено, что процесс окисления на воздухе включает три стадии: (1) процессы в пределах монослойного заполнения, (2) образование продуктов окисления свинца (карбонат, гидрокарбонат, гидроксид и т.д.) и увеличение соотношения концентраций Pb/S (предположительно за счет десорбции летучих продуктов окисления серы) и (3) образование термодинамически устойчивого продукта окисления – PbSO₄. На второй стадии окисления происходит образование островков продукта размером несколько нм, которые постепенно срастаются, в результате чего происходит переход к третьей стадии процесса. Кроме того, показано, что реакционная способность поверхности монокристаллов PbS (001) при комнатной температуре увеличивается в ряду: молекулярный кислород << сухой воздух < влажный воздух (относительная влажность около 50%). Предложено объяснение выявленной закономерности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-03-00991-а).

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС СОСТОЯНИЙ МЕДИ В СИЛИКАТНО-ФОСФАТНЫХ МАТРИЦАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ОКИЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СРЕД

Новиков Д.В.¹, Князев А.С.¹, Свинцицкий Д.А.², Боронин А.И.²

¹Томский государственный университет, Томск, 634050,
пр. Ленина, 40, e-mail: kas854@mail.ru

²Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

На данный момент в каталитическом производстве глиоксаля, одного из важнейших промышленных продуктов, используются катализаторы на основе металлов подгруппы Ib. Наиболее активными в процессе окисления этиленгликоля в глиоксаль являются нанесенные серебряные катализаторы. Медные системы, уступающие формально в активности серебряным, но имеющие более низкую стоимость и, возможно, большую устойчивость активного компонента в нанесенных системах, также представляют значительный интерес для исследователей. При исследовании катализаторов важным является изучение химического состояния, устойчивости и закономерностей формирования активного компонента (АК). Одним из весьма информативных методов для подобных исследований является метод РФЭС.

В данной работе образцы состава $\text{Cu}_n(\text{SiO}_2)_k(\text{P}_2\text{O}_5)_m$ с варьируемыми количествами меди и фосфатного модификатора были изучены методами ТПР, РФЭС и ПЭМ. При анализе данных, полученных методикой последовательных окислительных и восстановительных ТПР, была обнаружена структурообразующая роль фосфатного промотора. Метод ПЭМ показал, что исследуемые образцы представляют собой высокодисперсные медные частицы с размерами 5-100 нм, распределенные в силикатно-фосфатной матрице. Для изучения медных состояний, формируемых в АК в результате окислительной и восстановительной обработок, был привлечен метод РФЭС. При комплексном анализе фотоэлектронных Cu2p- и оже- CuLMM спектров удалось установить, что воздействие кислородной среды приводит к формированию окисленных состояний Cu^{2+} и Cu^{1+} , а также силиката меди(II) CuSiO_3 . АК после восстановления состоит из дисперсной металлической фазы с примесью малых количеств силиката меди(II) и массивного металла, что говорит об его относительно высокой устойчивости к спеканию. Было сделано предположение, что процесс окисления этиленгликоля на медных катализаторах в основном связан с восстановлением Cu^{2+} до металлического состояния.

ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА НА ФОРМИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ И АКТИВНОСТЬ Cu-ERI КАТАЛИЗАТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ СО

Олексенко Л.П.¹, Сенкевич А.И.²

¹Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,
Киев, ул. Владимирская, 60, E-mail: olexludmil@ukr.net

²Институт металлофизики НАН Украины, Киев, проспект Вернадского, 36

Природа активных центров нанесенных катализаторов гетерогенных процессов, является одним из ключевых вопросов катализа. Активность систем в газофазных реакциях окисления обусловлена состоянием катионов металла в их поверхностном слое. В данной работе изучено влияние природы прекурсора ($\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ и $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$) на формирование активных центров Cu-ERI катализаторов окисления СО. Установлено, что высокая активность Cu-ERI систем обусловлена наличием в их поверхностном слое изолированных координационно-ненасыщенных катионов Cu^{2+} , которые стабилизированы в тетрагонально-искаженном поле лигандов. Различие в активности 3%Cu-ERI систем, полученных из разных прекурсоров, согласно РФЭС, ЭСДО и ТПВ- H_2 спектрам, определяется разным количеством катионов меди Cu^{2+} в окружении лигандов с низкой симметрией кристаллического поля, которые характеризуются относительно большей долей ковалентности связи Cu-O и способны восстанавливаться в ходе реакции при $T < 400$ °С – чем больше их содержание в образцах, тем выше активность Cu-ERI систем. Меньшее соотношение интенсивностей сателлит–основной пик (I_S/I_M) и большее отношение содержания катионов меди в разных валентных состояниях ($A(\text{Cu}^+)/A(\text{Cu}^{2+})$) в РФЭС систем 3%Cu-ERI (табл.) свидетельствует о большем количестве катионов меди, которые принимают участие в катализе, что обуславливает более высокую активность Cu-эрионитов.

Характеристика поверхностного слоя 3%Cu-ERI систем по данным РФЭС

Прекурсор	Энергия связи электронов, эВ				I_S/I_M	$\frac{A(\text{Cu}^+)}{A(\text{Cu}^{2+})}$
	Si 2p	Al 2p _{3/2}	Cu 2p _{3/2}	Cu 2p _{1/2}		
$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$	102,3	74,2	933,1	953,2	0,05	6,26
$\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$	102,5	74,5	933,6	953,5	0,195	1,16
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$	102,4	74,2	933,8	954,1	0,27	0,26

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ
ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ
РАСПЛАВА $\text{Co}_{57}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{17}$**

Пономарёв А.Г., Холзаков А.В.

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
e-mail: xps@fti.udm.ru*

Методом рентгеноэлектронной спектроскопии проведено исследование сплава $\text{Co}_{57}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{17}$ в аморфном, кристаллическом и жидком состояниях. В рамках аморфного и жидкого состояний можно выделить две температурные области. Используя представления о кластерном строении аморфной фазы можно утверждать, что в первой температурной области в поверхностных слоях преимущественно присутствуют кластеры Fe-Si, во второй области состав поверхностных слоев изменяется и дополняется кластерами Co-B. Установлено, что характер изменения состава поверхностных слоев сплава $\text{Co}_{57}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{17}$ при нагревании идентичен в аморфном и жидком состояниях. В расплаве, при изменении температуры, обнаружены скачкообразные изменения состава поверхностных слоев, которые трактуются как структурные превращения в рамках жидкого состояния.

С применением модели идеальных растворов продуктов взаимодействия, методологии термодинамического моделирования, предположений об адсорбции и механизме образования поверхностного слоя рассчитано содержание структурных составляющих расплава исходного состава $\text{Co}_{57}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{17}$ в объеме и на поверхности при нагреве. Результаты оценки состава поверхностных слоев согласуются с данными рентгеноэлектронной спектроскопии расплавов.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИРОДЫ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА

Сараев А.А., Шуваева М.А., Бухтиярова Г.А., Каичев В.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

E-mail: asaraev@catalysis.ru

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии проведено исследование серии реперных образцов и нанесенных железосодержащие катализаторов окисления сероводорода. Синтез катализаторов осуществлялся методом пропитки силикагеля марки КСКГ в водном растворе сульфата Fe(II) с последующей сушкой при температуре 110°C и прокалкой при различных температурах в диапазоне от 400 до 900°C. Все катализаторы проявляют почти 100% селективность в реакции окисления H₂S до серы и водорода [1,2]. Активность катализаторов зависит от температуры прокаливания.

Методом РФЭС установлено, что в исходном, не прокаленном, катализаторе железо находится преимущественно в виде сульфата железа. Прокалка катализатора приводит к разрушению FeSO₄ и образованию оксида железа Fe₂O₃. Показано, что после прокаливания при 600°C и выше количество сульфатных групп на поверхности катализатора резко уменьшается. Наибольшую активность проявляют катализаторы, прокаленные при 900°C, в которых полностью отсутствует сера. Этот же катализатор проявляет наибольшую стабильность к сульфидированию, что, как было показано ранее, определяет 100% селективность в реакции окисления H₂S до серы и водорода [1,2]. Анализ формы и положения спектров Fe2p, S2s, O1s и Si2p, а также сравнение полученных данных с результатами месбауэровской спектроскопии [3], позволило сделать вывод о том, что наибольшую активность в окислении H₂S имеют мелкодисперсные частицы оксида железа ε-Fe₂O₃. Данная фаза оксида железа определяет стабильность катализаторов к сульфидированию.

[1]. Bukhtiyarova G.A., Bukhtiyarov V.I., Sakaeva N.S., Kaichev V.V., Zolotovskii B.P. // J. Mol. Catal. A. 2000. V. 158. P. 251-255.

[2]. Bukhtiyarova G.A., Delii I.V., Sakaeva N.S., Kaichev V.V., Plyasova L.M., Bukhtiyarov V.I. // React. Kinet. Catal. Lett. 2007. V. 92. P. 89-97.

[3]. Бухтиярова Г.А., Мартыанов О.Н., Якушкин С.С., Шуваева М.А., Баяков О.А. // ФТТ. 2010. Т. 52. С. 771-781.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА ВОССТАНОВЛЕНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА МЕДИ(II) МОНООКСИДОМ УГЛЕРОДА

Свинцицкий Д.А.^{1,2}, Стадниченко А.И.^{1,2}, Боронин А.И.^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, 630090,
пр. Академика Лаврентьева, 5, sad@catalysis.ru

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

В данной работе метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) применен для установления фундаментальных закономерностей образования реакционноспособных состояний кислорода на поверхности наноструктурированного оксида меди и исследования кинетики взаимодействия с монооксидом углерода. Для получения детальной информации о состояниях кислорода и меди, используя анализ спектров основных уровней O1s и Cu2p, были решены методические задачи вычитания фона и разложения спектров на компоненты. В работе детально излагаются все этапы идентификации состояний кислорода и их отнесение к определенным фазовым состояниям оксидов меди.

В данной работе было проведено количественное исследование методом РФЭС пошагового восстановления поверхности наноструктурированного оксида меди(II) монооксидом углерода при температуре 80 °С. Наноструктурированный оксид меди был получен окислением медной фольги кислородом в ВЧ-разряде при комнатной температуре в камере электронного спектрометра VG ESCALAB HP. По ходу титрования поверхности оксида CuO дозами CO восстановление меди(II) до меди(I) фиксировалось серией РФЭ-спектров. Исходя из площадей пиков индивидуальных состояний, полученных при разложении серии спектров, были построены кинетические кривые процесса восстановления наноструктурированного CuO и рассчитана его реакционная способность (РС) по отношению к CO. Значение РС по ходу протекания процесса уменьшается от 10^{-4} до 10^{-8} . Установлено, что высокая активность на начальном этапе титрования связана с наличием «сверхстехиометрического» кислорода, стабилизация которого происходит вследствие образования оксида меди в наноструктурированном состоянии.

Работа поддержана интеграционным проектом СО РАН №112.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ InAs(111)A И GaAs (001) ПОСЛЕ ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ В РАСТВОРАХ HCl (HF) - ИЗОПРОПИЛОВЫЙ СПИРТ МЕТОДАМИ РФЭС, АСМ И РМА

Селезнёв В.А.¹, Кеслер В.Г.¹, Максимовский Е.А.²

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, seleznev@isp.nsc.ru

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

Подготовка химически чистой, атомарно гладкой и стехиометрической полупроводниковой поверхности, является актуальной проблемой микроэлектроники. Считается, что наилучший результат по финишной очистке поверхности A_3B_5 достигается при использовании обработки в растворах HCl (HF) в изопропиловом спирте (iPA) [1,2,3]. Известные нам исследования главным образом базируются на изучении химического состава поверхности методом РФЭС и контроля структуры поверхности методами электронной дифракции. Данные методы обеспечивают информацию, усредненную по значительной площади поверхности образца. Информация о структуре поверхности на локальном уровне отсутствует, хотя она также необходима для корректной интерпретации полученных результатов и технологии микро- и нано-электроники. Методами РФЭС, АСМ и РМА нами проведено исследование химического состава приповерхностной области и микрорельефа образцов InAs и GaAs после химической обработки в растворах HCl(HF)-iPA. На поверхности образцов после химической обработки обнаружены локальные образования в виде «шипов» с нанометровыми размерами и с плотностью до $3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$, которые полностью исчезают после отжига в вакууме при температурах выше 300°C . С помощью совокупности методов исследования показано, что в состав «шипов» входит избыточный мышьяк и кислород.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 08-07-00230 и междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 97.

- [1]. Галицын Ю.Г., Мансуров В.Г., Пошевнев В.И., Соколов Р.А., Валишева Н.А., Поверхность. Физика, химия, механика. 1992, т. 5, с. 108-117.
- [2]. O.E. Tereshchenko, V.L. Alperovich, A.S. Terekhov, Surface Science, 2006, vol. 600, p. 577-582.
- [3]. Yun Sun, Piero Pianetta, Po-Ta Chen, et al., Appl. Phys. Lett., 2008, vol. 93, p. 194103.

ФОТОЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И СТРУКТУРА АТОМНО-ЧИСТОЙ ПОВЕРХНОСТИ SnS (100)

Семенов Д.А.^{1,2}, Волыхов А.А.^{1,2}, Яшина Л.В.^{1,2}, Васильев С.Ю.¹, Белогорохов А.И.²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, semenenko@inorg.chem.msu.ru

²ОАО «ГИРЕДМЕТ», Москва

В настоящей работе поверхность слоистого полупроводникового соединения SnS (100) исследована экспериментально методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теоретически в рамках теории функционала плотности (ТФП) в кластерном варианте.

Атомарно-чистая и окисленная поверхность SnS (100) исследовалась методами РФЭС (лабораторный спектрометр на монохроматическом Al K_α излучении), ДМЭ, СТМ, а также при помощи расчётов ab initio.

Поверхность (100) терминирована атомами олова. Однако, сдвиг между атомными слоями катионной и анионной подрешетки небольшой и составляет 0.34 Å. Каждый слой в объеме моносulfида олова содержит два наружных атомных подслоя олова и два внутренних – серы. Поверхность характеризуется прямоугольной решёткой с параметрами ячейки 4.3x4.0 Å.

Спектры Sn 4d описываются одним дублетом каждый, что говорит об эквивалентности всех атомов олова в пределах анализируемого слоя и, следовательно, отсутствии изменения электронной плотности при образовании поверхности (в пределах возможностей данного метода).

Поверхность моделировалась большим кластером (SnS)₃₄ (25/25/9/9). Химсдвиги оценивали в приближении эффекта начального состояния как изменение электростатического потенциала в центрах локализации данных атомов. Для оценки влияния эффекта конечного состояния определены энергии релаксации при помощи вагнеровского оже-параметра:

$$\alpha'(\text{Sn}) = BE(\text{Sn } 3d_{5/2}) + KE(\text{Sn } M_4N_{45}N_{45}) = 921.05 \text{ эВ.}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-03-00991-а).

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТАБИЛИЗАЦИИ Au В ЗОЛОТЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДАМИ XAFS И РФЭС

**Симакова И.Л.¹, Симаков А.В.², Кривенцов В.В.¹, Смоленцева Е.В.²,
Кастийон Ф.², Эстрада М.³, Варгас Э.⁴, Якимчук Е.П.¹, Максимовский Е.А.⁵,
Нечепуренко С.Ф.⁶, Аксенов Д.Г.¹, Андреев Д.В.¹, Новогородов Б.Н.¹,
Кочубей Д.И.¹, Фуэнтес С.²**

¹*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*

²*Центр Нанонаук и Нанотехнологии, 22860, UNAM, Энсенада, Мексика*

³*Аспирантура по физике материалов, CICESE, Энсенада, Мексика*

⁴*Аспирантура по науке и инженерии, UABC, Энсенада, Мексика*

⁵*Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

⁶*Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия*

Данная работа посвящена изучению методами XAFS и РФЭС различных стабилизированных форм Au, являющихся активным компонентом нанесенных на оксидные носители золотых катализаторов. Как известно, Au, вследствие своей электронной структуры, является наиболее химически инертным среди Me группы Pt, однако наноразмерные образования Au проявляют высокую каталитическую активность в промышленно важных реакциях. Они перспективны для тонкого органического синтеза – селективной изомеризации несопряженной линолевой кислоты, а также для задач экологического катализа, например окисления CO. Детальное исследование природы различных форм стабилизации Au необходимо для разработки новых эффективных катализаторов для различных приложений. При синтезе катализаторов (~1%Au/Al₂O₃) варьировался способ приготовления (золь-гель, ионный обмен, пропитка), температуры восстановления и методы активации носителя, включая модификацию Zr-Sr композициями. Комплексное исследование выявило образование различных образований Au, локализованных на поверхности носителя; катионов Au³⁺ (имеющих октаэдрическое кислородное окружение), наночастиц золота ~20Å, а также кластеров менее 10Å. Рассмотрены варианты структурных моделей. Полученные данные полностью соответствуют данным ПЭМВР и ЭСДО.

Работа проводилась при поддержке РФФИ (09-03-01012а, 08-03-01150а, 10-03-01005а, 10-03-01209а, 08-03-91758-AF_a, 08-03-92502-НЦНИЛ_a), ФАНИ РФ (№ 02.518.11.7128), Президиума РАН (программа 27) и фонда Мексикского университета UNAM-PAPIIT (IN 224510).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛЁНОК СУБОКСИДА КРЕМНИЯ СОДЕРЖАЩИХ НАНОКРИСТАЛЛЫ Si ПО ДАННЫМ МЕТОДОВ XANES, USXES И XPS

Терехов В.А.¹, Турищев С.Ю.¹, Панков К.Н.¹, Занин И.Е.¹,
Домашевская Э.П.¹, Тетельбаум Д.И.², Михайлов А.Н.²,
Белов А.И.², Николичев Д.Е.², Зубков С.Ю.²

¹Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru

²Нижегородский государственный университет, Н. Новгород

Возможность образования нанокристаллов элементарного кремния в плёнках субоксида SiO_x на подложке Si(111) при термических отжигах 900-1100 °С исследовались методами XANES, USXES и XPS. Исследованные структуры после отжигов обладали фотолюминесценцией при $h\nu \sim 1.6-1.7$ эВ, что свидетельствовало об образовании в них нанокристаллов размером ~ 4 нм. По данным рентгеновской дифракции в объёме плёнки обнаруживаются нанокристаллы со средним латеральным размером 20-60 нм в зависимости от температуры отжига. Эти нанокристаллы имеют преимущественную ориентацию параллельную плоскости подложки, хотя и находятся внутри плёнки SiO₂.

Данные XPS показывают, что плёнки SiO_x:Si/Si(111) имеют на поверхности довольно толстый слой чистого окисла ~ 60 нм. При этом значение энергии связи Si 2p- и O 1s- уровней увеличены относительно их положения в плёнке термического окисла. На глубине около 60 нм обнаруживается элементарный кремний с энергией связи Si 2p - уровня 99.3 эВ, а энергия связи Si 2p - уровня окружающего окисла соответствует значениям термической плёнки SiO₂ (103.7 эВ).

Наиболее интересные и необычные результаты получены по данным XANES исследований. В XANES спектрах плёнок после отжигов обнаруживается хорошо выраженная обращённая структура полного квантового выхода в области энергии фотонов $h\nu \geq 100-104$ эВ, т.е. в области электронных состояний элементарного кремния. Аномальное поведение XANES наблюдается в довольно большом диапазоне углов скольжения $\sim 30-90^\circ$ и может быть обусловлено интерференцией синхротронного излучения на нанокристаллах толщиной 3-6 нм.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПАЛЛАДИЙ – БОРИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ
РЕАКЦИЙ ГИДРИРОВАНИЯ МЕТОДАМИ EXAFS И РФЭС**

**Троицкий С.Ю., Просвирин И.П., Кривенцов В.В., Якимчук Е.Р.,
Новгородов Б.Н., Симакова И.Л.**

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
tsy@catalysis.nsk.su*

Методами РФЭС и EXAFS исследована возможность образования аморфных активных центров катализаторов, содержащих атомы палладия на углеродных носителях. Синтез катализаторов проведён в присутствии соединений бора, которые применялись в качестве восстановителей палладия (II), или в качестве ионной среды, использовавшейся в процессе осаждения комплексов палладия (II) на поверхность углеродного носителя из водных растворов. Показано, что аморфные каталитические центры полученных образцов представляют собой наноразмерные металлокерамические структуры.

Методом ТЕМ показана возможность спекания кластеров палладия, нанесённых на графит, в мягких условиях (комнатная температура, атмосферное давление водорода). Установлено, что спекание этих кластеров может быть лимитировано теплообменом с межбазальными слоями графита – элементом структуры пористых углеродных материалов. Методом EXAFS показано, что образование стеклообразных структур приводит к снижению интенсивности пиков РРА в ряду: 20% Pd/C > 10% Pd/C >> 10% Pd-B/C. Методом РФЭС определены значения энергии связи пиков Pd3d изученных образцов: 335.3 эВ – для Pd(0)/C, 336.9 эВ – для Pd (II)/C, 336.4 эВ – для Pd-B/C.

Найдено, что полученные Pd/C – катализаторы имеют аномально высокую стабильность при проведении процессов в агрессивных (окислительных и «условно–кислотных») средах. Показана высокая стабильность катализаторов в процессах гидрирования нитроароматических соединений. Предложен механизм, объясняющий эту стабильность образцов, основанный на термодинамических свойствах, в частности, теплопроводности и теплоёмкости каталитических центров и подложки катализаторов.

Работа проводилась при поддержке РФФИ (09-03-01012_a, 08-03-01150_a, 10-03-01005_a, 10-03-01209_a, 08-03-91758-AF_a, 08-03-92502-НЦНИЛ_a), ФАНИ РФ (контракт № 02.518.11.7128), проектов Президиума РАН по программе 27.

ОСОБЕННОСТИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ КРАЕВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}\dots\text{Si}(100)$

Турищев С.Ю.¹, Терехов В.А.¹, Кашкаров В.М.¹, Панков К.Н.¹,
Ховив Д.А.¹, Домашевская Э.П.¹, Ершов А.В.²

¹Воронежский государственный университет, Воронеж,
394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru

²Нижегородский государственный университет, Н. Новгород

Многослойные нанопериодические структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}\dots\text{Si}(100)$ были получены методом последовательного нанесения слоев SiO и Al_2O_3 на монокристаллические пластины кремния Si (100). Толщины слоев Al_2O_3 во всех партиях образцов составляли 3 нм, тогда как толщины слоев SiO варьировались от 2 до 6 нм. Полное число двойных слоев $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}$ (периодов наноструктур) составляло 9. Были зарегистрированы XANES спектры поверхностных слоев $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}\dots$ как неотожженных, так и отожженных при температурах до 1100 °С. Глубина анализа при измерении квантового выхода электронов в данной методике составляла более 3 нм, поэтому нам удалось зарегистрировать $L_{2,3}$ края поглощения не только алюминия, но и кремния, то есть спектры по крайней мере двух поверхностных нанослоев.

При данном способе получения слоев SiO в них всегда наряду с окислом содержится элементарный кремний, относительное содержание которого слабо зависит от температуры отжига вплоть до 1100 °С. Тем не менее повышение температуры отжига до 1100 °С приводит к увеличению контрастности края поглощения элементарного кремния. Покрывающий слой Al_2O_3 является аморфным, вплоть до температуры отжига 700 °С. При самых высоких температурах отжига велика вероятность его кристаллизации и образования алюмосиликатов.

Однако, самым интересным эффектом периодических наноструктур является эффект «обращенной интенсивности» в спектрах поглощения Al $L_{2,3}$ и Si $L_{2,3}$ при определенном соотношении толщин в областях энергий 75-85 эВ и 105-110 эВ, когда максимумам поглощения (a_{1g} , t_{2u}) слоев окислов кремния и алюминия, соответствуют минимумы в спектрах XANES нанопериодических структур. Эффект наблюдается в неотожженных наноструктурах и сохраняется вплоть до температур отжига 900 °С, следы этого эффекта сохраняются до температур 1100 °С.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛАСТИН КРЕМНИЯ, ПОДВЕРГНУТЫХ ОБРАБОТКЕ В ПЛАЗМЕ АРГОНА И ВОДОРОДА

Турищев С.Ю.¹, Терехов В.А.¹, Паринаева Е.В.¹, Федотов А.К.²

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, 394006, Университетская пл., 1, ftt@phys.vsu.ru*

²*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

Изучение структур, подвергнутых обработке в плазме, представляет большой практический интерес. Известно, что гидрирование моно- и поликристаллического кремния может существенно изменить свойства материала. Особый интерес для исследований представляют образцы, подвергнутые низкоэнергетичной ионно-лучевой обработке. Возможное изменение ряда свойств стандартных кремниевых пластин позволит расширить спектр их применения в современной электронике. Представлены результаты исследований пластин кремния n- и p- подвергнутых низкоэнергетичной ионно-лучевой обработке водородом или аргоном при различных температурах методами XANES и USXES.

Анализ экспериментальных данных XANES (глубина анализа ~ 5 нм) всех обработанных в плазме образцов показывает деградацию резкого края поглощения кремния со «ступенью» при энергии ~ 100 эВ и отсутствие тонкой структуры, обусловленной спин-орбитальным расщеплением Si 2p уровня. В случае ионно-лучевой обработки Ag⁺ зарегистрированы два аномальных спектра XANES при температурах 25°С для пластин p-типа и 350°С для n-типа. Подобная форма краев в спектрах поглощения наблюдалась ранее в аморфном карбиде кремния. Полученные данные свидетельствуют о нарушении характера гибридизации s, p состояний, характерных для естественного оксида кремния. Данные USXES также показывают на разупорядочение поверхностных слоев исследованных пластин кремния в более глубоких поверхностных слоях (до 60 нм.). Результаты фазового анализа по данным USXES показывают наличие в поверхностных слоях наряду с кристаллическим кремнием фазы разупорядоченного кремния.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

НЕМОНОТОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ 3d СПЛАВОВ В ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ ПРИ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ВЫДЕРЖКАХ

Холзаков А.В., Исупов Н.Ю.

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск,
ул. Кирова, 132, xps@fti.udm.ru*

Методом рентгеноэлектронной спектроскопии проведено исследование изменения состава поверхностных слоев сплавов на основе 3d-металлов в жидком состоянии при изотермических выдержках, в широком интервале температур. Образец в виде ленты помещался в исследовательскую камеру спектрометра [1], затем осуществлялся нагрев до температуры плавления. Плавление образца контролировалось по спектрам внутренних линий элементов сплава и по линии O1s. При переходе в жидкое состояние исследованных сплавов содержание кислорода в поверхностных слоях резко падает [2]. В дальнейшем нагрев осуществлялся ступенчато, с выдержкой при каждой температуре порядка 2 часов. При изотермической выдержке поочередно сканировались спектры внутренних уровней элементов. Поскольку важным представляется изменение состава поверхностных слоев расплава с течением времени, в качестве критерия выбиралось отношение интенсивностей двух определенных ранее линий.

В жидком состоянии при изотермических выдержках обнаружено немонотонное поведение состава поверхностных слоев металлических расплавов. Используя представления о кластерном строении жидкого металлического состояния можно предположить, что подобные изменения связаны с перераспределением кластеров поверхностной и приповерхностной области расплава. Для подтверждения этого утверждения проведено послойное изучение состава аморфных лент полученных быстрой закалкой, в результате которой структура расплава «замораживается» в твердом состоянии.

- [1]. Трапезников В.А., Шабанова И.Н., Варганов Д.В. и др. Создание автоматизированного электронного магнитного спектрометра для исследования расплавов. Отчет ВНИИЦентр, №12880067297, 1989.
- [2]. Shabanova I.N., Ponomarev A.G., Kholzakov A.V. XPS-studies of structure transformation and relaxation processes in transition metal melts $Zr_{60}Ti_{20}Ni_{20}$, $Ni_{72}Mo_{14}B_{14}$, $Ni_{81}P_{19}$ and $Ni_{82}B_{18}$. J. Electron Spectroscopy v.114-116, 2001, pp.603-608.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СВЕРХВЫСОКОВАКУУМНОГО НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА GPI CRYO

Шевлюга В.М.^{1,6}, Климов А.Н.^{1,6}, Ельцов К.Н.^{1,6}, Логинов Б.А.²,
Зайцев-Зотов С.В.³, Трофимов В.Н.⁴, Черников А.Н.⁴, Керрен Б.⁵,
Объедков О.В.⁶, Косяков А.Н.⁶

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,
119991 Москва, ул. Вавилова 38, eltsov@kapella.gpi.ru

²Московский институт электронной техники, Зеленоград

³Институт радиотехники и электроники им. В.Н. Котельникова РАН, Москва

⁴Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

⁵International Joint Laboratory IMTAS, Institut Jean Lamour,
Universite H. Poincare, Nancy, France

⁶ЗАО Научно-производственная фирма «Сигма Скан», Москва

В докладе представлены результаты тестирования метода сканирующей туннельной спектроскопии (СТС) в режиме аппаратного дифференцирования для низкотемпературного СВВ СТМ GPI CRYO, работающего в температурном диапазоне 5-300 К. В качестве модельного объекта были выбраны поверхностные электронные состояния типа Шокли на поверхности Ag(111), располагающиеся в запрещенной зоне и имеющие простую квадратичную зависимость дисперсионной кривой. Измерения были проведены при температурах образца 5 и 77 К, соответственно.

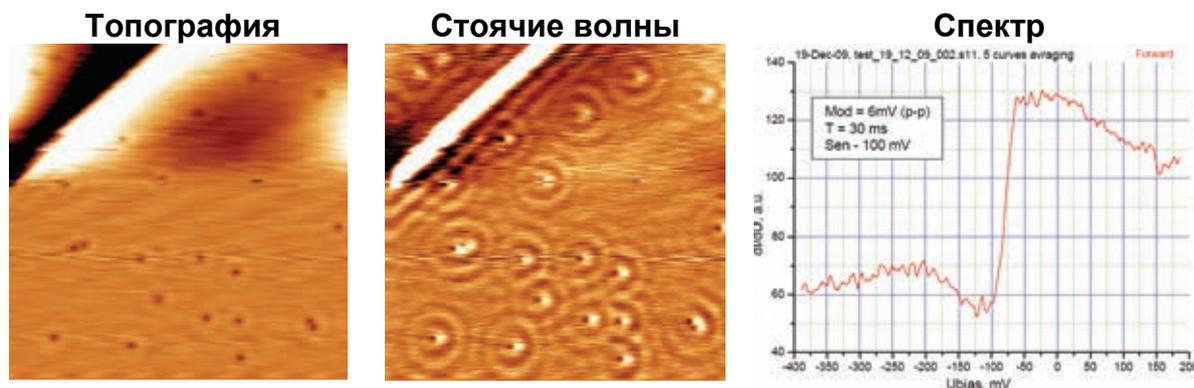


Рис. Топография, карта спектроскопии и спектр поверхностных электронных состояний типа Шокли на поверхности Ag(111), полученных при 5 К. Отчетливо видны стоячие электронные волны (standing waves), получаемые в результате отражения от атомной ступени и атомов примеси. Получаемый в спектре резкий край кривой определяется распределением электронов вблизи уровня Ферми в игле СТМ и позволяет оценить температуру иглы.

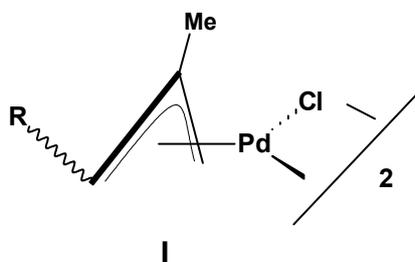
Полученные параметры, такие как чувствительность СТС (0.05 нА/В) и скорость дрейфа (менее 3 Å/час) сравнимы с соответствующими характеристиками приборов таких производителей как Omicron (www.omicron.de) и Createc (Германия).

СИН-АНТИ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ АЛЛИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ ПО ДАННЫМ ЯМР И РЭС

Эльхуссиен М., Чешков Д.А., Евстигнеева Е.М., Флид В.Р.*

Московская государственная академия тонкой химической технологии
им. М.В. Ломоносова, Москва, eme2003@list.ru

Димерные аллильные комплексы палладия **I**, являющиеся предшественниками ключевых интермедиатов важных каталитических реакций, хорошо изучены методами ЯМР ^1H и ^{13}C в растворах [1,2] и методом РЭС в твердом состоянии [3-5]. Обычно в растворах быстро устанавливается равновесие между син- и анти- изомерами **I**. При исследовании ЯМР спектров свежеприготовленных растворов комплексов **I** в слабо координирующемся растворителе CD_2Cl_2 мы обнаружили существенное замедление син-анти изомеризации в случае заместителей, содержащих метокси-группу. Так, при $\text{R}=\text{CH}_2\text{OMe}$ (**la**) в растворе обнаруживается только син-изомер комплекса, а в случае $\text{R}=\text{CO}_2\text{Me}$ (**lb**) время полупревращения син-**I** в анти-**I** при 25°C составляет 1 час. Таким образом, в твердом состоянии данные комплексы существуют в виде син-изомера. Анализ формы 3d пика в спектрах РЭС, полученных для **la,b**, с помощью программы UNIFIT for WINDOWS [6] не выявил присутствия второго пика, отличающегося величиной $E_{\text{св}}$. При этом величина



$E_{\text{св}}$ ($3d_{5/2}$), характеризующая зарядовое состояние металла, для **la** составляет 336,9 эВ и близка к значению для $\text{Pd}(\text{dba})_2$, равному 336,8 эВ. Полученные результаты, по-видимому, связаны с π -донорным эффектом MeO -заместителя.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №08-03-00743).

- [1]. Коллмен Дж., Хигедас Л., Нортон Дж., Финке Р. Металлоорганическая химия переходных металлов. Основы и применения. ч. 1. 1989.
- [2]. Евстигнеева Е.М., Флид В.Р., Бобкова Е.Н. *Известия РАН. Сер. Хим.*, 2009, (3) 539.
- [3]. Петров Г. Б., Белов А. П., Маркович Л. М., Рябцев А. В. *Ж. структ. хим.* 1983, 24 (6), 113.
- [4]. Нефедов В. И. Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений. Справочник. М.: Химия, 1984, 256 с.
- [5]. F. Bökman, A. Gogol, L. G. M. Petterson, O. Bohman, H. O. G. Siegbahn. *Organometallics* 1992, 11 (5), 1784.
- [6]. R. Hesse, T. Chassé, R. Szargan. *Fresenius' Journal of Analytical Chemistry* 1999, 365 (1-3), 48.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОДИСПЕРСНЫХ НАНОЧАСТИЦ
Pt, Pd, Au, Ni НА РАЗЛИЧНЫХ НОСИТЕЛЯХ ПРИ ПОМОЩИ РФЭС**

**Яшина Л.В.¹, Николаев С.А.¹, Ростовщикова Т.Н.¹, Гуревич С.А.²,
Кожевин В.М.², Явсин Д.А.²**

¹*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва,
Ленинские горы, д. 1, стр. 3, yashina@inorg.chem.msu.ru*

²*Физико-технический институт им. Иоффе РАН, Санкт-Петербурга*

Ансамбли разреженных монодисперсных частиц служат модельным объектом для исследования размерных эффектов в РФЭ-спектрах, а также для выявления переноса заряда между носителем и катализатором. Уникальные свойства таких каталитических систем хорошо известны. Их необычное поведение определяется, помимо малого размера частиц, изменением электронного состояния металла при контакте с близко расположенными частицами и материалом подложки [1]. В силу такого взаимодействия оказывается, что каталитическая активность сильно зависит от среднего расстояния между частицами или степени покрытия поверхности. Обнаруженные недавно синергетические эффекты в катализе нанокompозитами Au и Ni также, вероятно, связаны с изменением электронного строения металла [2,3]. В настоящей работе на примере моно- и биметаллических Pt, Pd, Au и Ni катализаторов методом РФЭС анализируется влияние на электронное строение металла таких факторов, как степень заполнения и природа подложки. Нанесение наночастиц на монокристаллический Si, графит, сибунит и γ -Al₂O₃ осуществляли методом лазерного электродиспергирования [4]. Преимущества этого метода связаны с равномерным покрытием поверхности носителя сферическими частицами металла одного размера (от 2 до 5 нм дл различных металлов).

Полученные данные открывают новые возможности повышения эффективности действия наноразмерных катализаторов.

- [1]. S.A. Gurevich et al., Charge effects on the properties of nanostructured metal catalysts. // in «Thin Films and Nano-structures. Physic-Chemical Phenomena in Thin Films and at Solid Surfaces», Ed. L.I. Trakhtenberg, S.H. Lin, O.J. Hegbusi, Elsevier, Amsterdam, 2007, v. 34, p. 726-754.
- [2]. S.A. Nikolaev, V.V. Smirnov, Catalysis Today, 2009, v. 147S, p. S336–S341.
- [3]. O.P. Tkachenko et al., Topics in Catalysis, 2009, v.52, p. 344-350.
- [4]. V.M. Kozhevin et al., J. Vac. Sci. Techn. B, 2000, v. 18, p. 1402-1405.

Исследование проведено в рамках госконтрактов № 02.740.11.0026 и 02.740.11.0139.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 5

**ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЭС БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ СЕРЕБРА(I)

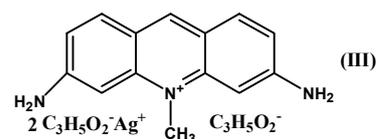
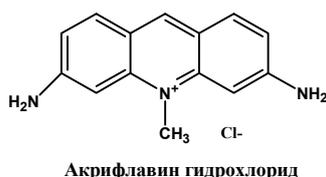
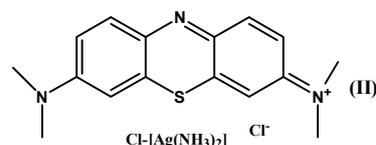
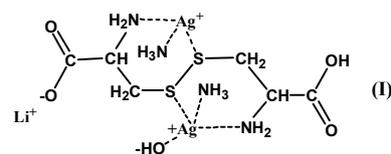
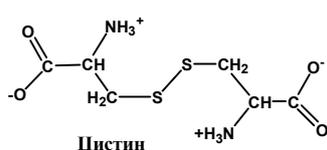
Варнек В.А.¹, Асанов И.П.¹, Оглезнева И.М.¹, Третьяков В.В.²,
Сильников В.Н.²

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск,
пр. Акад. Лаврентьева, 3, varnek@niic.nsc.ru

²Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
Новосибирск

С целью получения эффективных лекарственных препаратов на основе ионов серебра в настоящей работе были синтезированы и охарактеризованы комплексы серебра с цистином (I), метиленовым синим (II) и акрифлавином (III). Комплексы получали путем взаимодействия водных растворов красителей с солями серебра. Строение свободных лигандов и предполагаемое строение комплексов приведено ниже.

Для характеристики соединений использовали методы РЭС, ИК и УФ спектроскопии. При помощи метода РЭС были определены энергии связей внутренних уровней для всех атомов, входящих, как в состав комплексов, так и в состав свободных лигандов. Это



позволило изучить характер перераспределения электронной плотности на атомах лигандов при комплексообразовании. Наиболее интересные результаты были получены для комплекса I: показано, что электронная плотность на всех атомах лиганда при его вхождении в состав комплекса повышается. Это свидетельствует о существенном переносе электронной плотности с атома металла на лиганд. Подобный перенос не обнаружен для комплекса II, а для комплекса III он выражен в меньшей степени. Установлена корреляция полученных результатов с данными ИК-спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке Интеграционного проекта СО РАН №85.

**ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ,
ПОЛУЧЕННЫХ ВОССТАНОВЛЕНИЕМ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ,
МЕТОДАМИ РФЭС И XANES**

Воробьев С.А.^{1,2}, Сайкова С.В.², Романченко А.С.¹, Михлин Ю.Л.^{1,2}

¹*Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск,
ул. К. Маркса, 42, yumikh@icct.ru*

²*Сибирский федеральный университет, Красноярск*

Задача надежного синтеза наночастиц металлической меди, которые представляют интерес для катализа, сенсоров, электроники, до сих пор не решена из-за легкого окисления меди при контакте с атмосферой, следами окислителей, и даже водой. Остается проблемой и характеристика продуктов, полученных в водных растворах, так как данные разных методов нередко противоречат друг другу. Нами исследовано влияние на образование наноразмерных Cu-содержащих продуктов природы восстановителя (гидразин, боргидрид, аскорбиновая кислота и др.), других факторов; разработано несколько вариантов синтеза гидрозолей, содержащих сферические наночастицы Cu(0) от 7-10 нм, или оксида меди (I). В частности, предложен способ получения НЧ Cu (0) восстановлением ионов Cu²⁺ гидратом гидразина в присутствии цитрата или тартрата натрия. Образование наночастиц металлической меди подтверждено оптическими спектрами поглощения (максимум плазмонного резонанса около 580 нм), рентгенофазовым анализом, ПЭМ и АСМ. Для медьсодержащих наночастиц, синтезированных разными способами, были получены фотоэлектронные спектры Cu 2p и Оже-линии Cu L₃MM, TEY XANES Cu L-края. Изучено влияние метода получения зольей, а также способа подготовки образцов для исследования, в том числе природы подложки, времени высушивания гидрозоля на воздухе или в вакууме, промывки водой, и т.д. Как правило, фотоэлектронные Cu 2p и Оже-линии Cu L₃MM не позволяют однозначно определить наличие Cu(0) и характерны скорее для оксида Cu₂O, покрытого слоем оксигидроксидов Cu(II), тогда как спектры Cu L-края более информативны и подтверждают образование металла. Анализ результатов показал, что окисленный слой частично образуется ex situ, в том числе при испарении капли золя в вакууме. Предложены способы минимизации связанных с этим артефактов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-05-98002-р_сибирь_а) и ФЦП «Кадры» (ГК 02.740.11.0269).

ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $V_xTi_{1-x}Se_2$ И $V_xTi_{1-x}Se_2$ ($x = 0.05 - 0.5$)

Галиева Е.Г.¹, Титов А.Н.¹, Федорова О.М.², Рохин И.С.³

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург,
ул. Софьи Ковалевской, 18, 620041, physicsmet@yandex.ru

²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург

³Уральский государственный университет им. А.М. Горького, Екатеринбург

Управление термодинамической стабильностью интеркалатных соединений требует возможности управления уровнем Ферми. Для этого необходимо освоить методы акцепторного и донорного легирования, минимально возмущающего материнскую структуру исходного соединения. Донорное легирование возможно в двух вариантах – это интеркаляция и неизовалентное замещение. Сравнению этих двух методов и посвящена настоящая работа. При интеркаляции может возникнуть проблема, связанная с формированием ковалентных центров между интеркалантом и его ближайшим окружением, поэтому неизовалентное замещение может оказаться более предпочтительным.

В работе исследуется легирование ванадием, при этом атомы ванадия могут входить в решетку как в межслоевое пространство в качестве интеркаланта, так и в позиции титана как заместитель. Чтобы проанализировать эти два варианта мы синтезировали системы $V_xTi_{1-x}Se_2$ и $V_xTi_{1-x}Se_2$ ($x = 0.05 - 0.5$), и выполнили рентгеноструктурный анализ этих соединений.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №09-03-00053 и №09-08-00073

ОРГАНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗАТОР УЛЬТРАМЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Дуда Т.А.^{1,2}, Окотруб А.В.², Федосеева Ю.В.², Гузев А.А.¹

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Пирогова, 30, tanyaduda@mail.ru

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 3

Органические монокристаллы этиленгликольдистеарата (DSt, $2d = 92,2 \text{ \AA}$) могут использоваться в качестве диспергирующего элемента для измерения рентгеновских эмиссионных спектров соединений бора, углерода, хлора, лежащих в диапазоне длин волн 40-80 \AA . Кристаллы ромбоэдрической формы $15 \times 15 \times 0,5 \text{ мм}$ были получены из смеси гексана и хлороформа (5 : 1) при понижении температуры от 25° до 13° C со скоростью $0,3^\circ \text{ C/сутки}$. Проведены оптические и рентгеновские исследования полученных кристаллов.

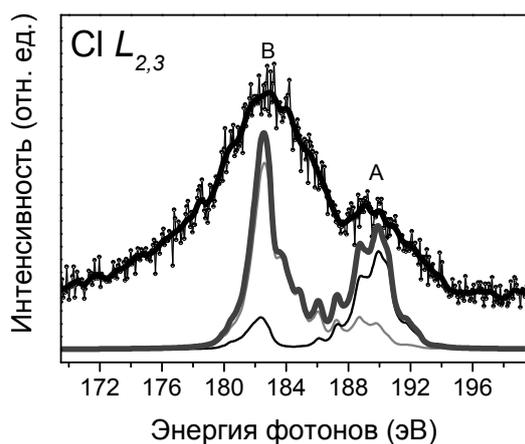


Рис. 1. Cl $L_{2,3}$ -спектр $C_{60}Cl_{30}$, верхний – экспериментальный, нижний – теоретический

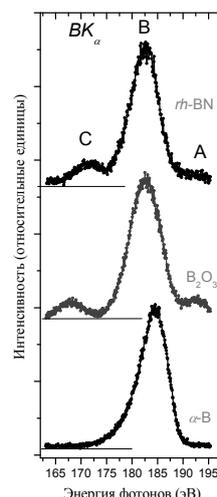


Рис. 2. B K_{α} -спектры BN (*rh*-BN), B_2O_3 и аморфного бора

С помощью DSt на лабораторном спектрометре «Стеарат» получены рентгеновские флуоресцентные спектры: Cl $L_{2,3}$ -спектр $C_{60}Cl_{30}$ (рис. 1) и B K_{α} -спектры образца, содержащего ромбоэдрический BN (*rh*-BN), оксид бора B_2O_3 и аморфный бор (B) (рис. 2). Сравнение ширин спектральных максимумов для борсодержащих соединений с контрольными величинами, полученными при измерении B K_{α} -спектров с использованием синхротронного излучения, позволяет оценить разрешающую способность DSt кристалла не хуже чем 0.6 эВ.

[1]. Лавская Ю.В., Дуда Т.А., Коротеев В.О., и др. ЖСХ, 2008, Т.49, S44-S50.

[2]. Lavskaya Yu.V., Duda T.A., Troyanov S.I., et al. J. Mol. Struct. 2009, V. 921. P. 264-267.

СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ И СОЛЬВАТНОЙ ОБОЛОЧКИ H_2PtCl_6 В РАСТВОРАХ

Канажевский В.В., Чесалов Ю.А., Кочубей Д.И.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, 630090,
просп. Академика Лаврентьева, 5, V.Kanazhevskiy@mail.ru*

Методом EXAFS и КР-спектроскопии исследовано строение комплексов H_2PtCl_6 в растворах диметилсульфоксида и воды в широком диапазоне концентраций на временах старения до полугода.

Согласно полученным данным атомы платины окружены атомами хлора. Длина связи Pt–Cl составляет 2.3 Å. Координационное число по хлору 6. Процессов гидролиза не происходит. Отсутствует прямое взаимодействие атомов платины. Также не наблюдается связей металл-металл через мостиковые атомы хлора.

Симметрия координационного окружения платины хлором снижается в результате длительного (полугодового) выдерживания растворов при нормальных условиях. Изменение симметрии связано с влиянием сольватной оболочки. В результате выдерживания растворов в течение 5 часов при температуре 80 °С изменений в окружении платины хлором не наблюдается.

Комплексы платины окружены прочно связанной сольватной оболочкой. Вне зависимости от типа растворителя, концентрации раствора и времени старения на кривых радиального распределения атомов наблюдаются максимумы в области расстояний 3.7-4.4 Å. Эти максимумы соответствуют атомам, входящим в состав сольватной оболочки. По всей видимости, сольватная оболочка комплекса платины состоит из катионов H_3O^+ , $\text{H}_5\text{O}_2^{2+}$ и молекул DMSO в зависимости от типа растворителя и концентрации платины.

Не исключена возможность связывания комплексов платины посредством сольватной оболочки. В таком случае расстояния Pt–Pt будут находиться на пределе чувствительности метода EXAFS по двум причинам. Во-первых, расстояние между атомами превысит 6 Å, а, во-вторых, интенсивность сигнала будет мала, вследствие высокой лабильности комплекса [1].

Работа частично финансировалась РФФИ (грант № 09–03–00780–а).

[1]. Кочубей Д.И., Шитова Н.Б., Никитенко С.Г. // Кинетика и катализ, – 2002. – **43**, № 4. – С. 601.

**МНОГОЭЛЕМЕНТНЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ ДЕТЕКТОР ДЛЯ
РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

**Лаврухина С.А., Мазалов Л.Н., Лабусов В.А., Коротаев Е.В.,
Селюнин Д.О., Бехтерев А.В., Федоренко А.Д.**

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
Новосибирск 630090, пр. Акад. Лаврентьева, 3, OtmutiUgeOtmutil@mail.ru*

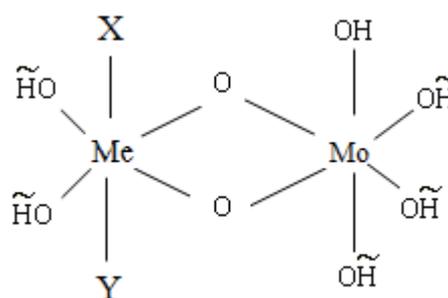
Рассмотрен новый линейный многоэлементный рентгеновский детектор, созданный на основе кремниевой линейки фотодиодов БЛПП-369М4 (количество фотодиодов 2612, шаг размещения 12,5 мкм, высота 4 мм, динамический диапазон 10^4). Приведены структура и характеристики многоэлементного детектора, а также зарегистрированные им рентгеновские эмиссионные $K_{\alpha 1,2}$, $K_{\beta 1}$, $K_{\beta 5}$ линии и К-спектр поглощения металлической меди на универсальном спектрометре УРС-2И. По разрешению и по отношению сигнал/шум эти спектры существенно превосходят спектры, зарегистрированные газовым ионизационным счетчиком СРПП-21 при одинаковом времени регистрации. Детектор обладает пространственным разрешением 20 мкм и пределом обнаружения рентгеновского излучения, равным 1 кванту при $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Он пригоден для изучения тонкой структуры спектров поглощения в области 1-10 \AA . Получены K_{β} – эмиссионные и К – спектры поглощения ряда металлоорганических комплексов меди и кобальта, полученные с помощью нового детектора и стандартного ионизационного счетчика.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР БИНАРНЫХ ОКСИДОВ 4d-ЭЛЕМЕНТОВ

Литинский А.О., Петров М.В., Новиков С.И.

Волгоградский государственный технический университет
400131, Волгоград, пр. Ленина, 28, кафедра «Физика», litinski@inbox.ru

Схема теории функционала плотности применена к расчету электронно-энергетической структуры поверхности смешанных оксидов $Mo_{1-x}Э_xO_3$ ($Э$: Nb; Tc) с использованием кластерных моделей (см. рисунок), в которых Me: Mo, Nb, Tc; Y: O \tilde{H} (если Me \equiv Mo), O \tilde{H}_2 (если Me \equiv Nb) и O (если Me \equiv Tc); X: OH (для гидроксидированной поверхности), вакансия (для дегидроксидированной поверхности), $C(R_F)_3$ (в случае контакта с фторуглеводородом); \tilde{H} – псевдородный атом (в качестве граничного условия). Получено:



1) *Гидроксидированная поверхность*. Область запрещенных энергий (ОЗЭ) для всех типов оксидов $\Delta\varepsilon \cong 2,5 - 3,5$ эВ, причем $\Delta\varepsilon(Nb) \cong \Delta\varepsilon(Tc) < \Delta\varepsilon(Tc)$. Состояния, примыкающие к границам ОЗЭ, обусловлены в основном орбиталями неподеленных пар атомов кислорода (для занятых состояний (ЗС)) и σ -связывающими (для ЗС) и σ -разрыхляющими орбиталями (для вакантных состояний (ВС)) Me–O связей;

2) *Дегидроксидированная поверхность* образуется при отрыве гидроксидной группы от Me-центров гидроксидированной поверхности. В ОЗЭ, отвечающей гидроксидированной структуре, появляется состояние с нескомпенсированным спином с энергией ε' , изменяющейся в пределах $-6,8 \div -4,5$ эВ, причем $\varepsilon'(Nb) > \varepsilon'(Mo) > \varepsilon'(Tc)$;

3) *Контакты с фторуглеводородами* – верхнему занятому состоянию отвечают связывающие орбитали Me– $C(R_F)_3$ связи. Энергия этого состояния ε'' находится в области $-7,1 \div -6,1$ эВ, причем $\varepsilon''(Nb) > \varepsilon''(Mo) < \varepsilon''(Tc)$. Нижним вакантным состояниям отвечают энергии, лежащие примерно в той же области, что и энергии нижних вакантных состояний гидроксидированной поверхности: $-5,0 \div -4,5$ эВ. Энергетическая щель между занятыми и вакантными состояниями $\Delta\varepsilon$ для Mo-центра \cong на 1,5 эВ выше, чем для Nb- или Tc- центра для любого Me– $C(R_F)_3$ контакта.

**ОЦЕНКА СТЕПЕНИ СШИТОСТИ НАНОРАЗМЕРНЫХ
ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА
АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ****Ляхович А.М.**

*Учреждение Российской академии наук,
Физико – технический институт УрО РАН,
426001, Ижевск, ул. Кирова, 132, E-mail: alalam@mail.ru*

Оценка степени сшитости наноразмерных полимерных покрытий представляет собой довольно трудную задачу. Во-первых, такие покрытия обладают малыми объемами (объемы экспериментальных образцов могут быть $< 10^{-10} \text{ м}^3$ при площади образцов 10^{-4} - 10^{-5} м^2). Методы, обычно применяемые для изучения физико-химических свойств полимеров, такие как, вискозиметрия, набухания в парах растворителя, теплофизические, механические и т.д. являются «объемными», требующими определенного (не менее 10^{-6} - 10^{-7} м^3) количества вещества. Для наноразмерных покрытий величины измеряемых характеристик объемными методами соизмеримы или даже меньше погрешности выше перечисленных методов, кроме того, эти покрытия практически невозможно отделить от субстрата. Для исследования таких покрытий необходимы методы, чувствительные к свойствам поверхности.

Методом атомно-силовой микроскопии (АСМ), обладающим высоким пространственным разрешением рельефа и свойств поверхности, исследованы наноразмерные полимерные покрытия, осажденные на металле в низкотемпературной плазме углеводородов. Совокупность характеристик поверхности, таких как микрорельеф, локальная полярность и твердость, полученных с использованием карт латеральных сил, карт сил адгезионного взаимодействия между поверхностью покрытия и иглой АСМ, карт фазового контраста поверхности, а также локальных характеристик твердости поверхности позволили оценить степень структурирования (степень полимеризации и степень сшитости) покрытий.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НАНОГРАФИТОВ С ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫМИ КРАЯМИ

Николенко Ю.М., Зиатдинов А.М.

*Институт химии ДВО РАН, Владивосток,
пр. 100-летия Владивостока, 159. E-mail: yury_nikolenko@mail.ru*

В работе представлены синтез и результаты исследования методом РФЭС фторированных и хлорированных наноразмерных частиц графита, являющихся структурными блоками активированных углеродных волокон (АУВ). АУВ имели удельную поверхность $\approx 2000 \text{ м}^2/\text{г}$. Согласно РФА, исследованные нанографиты состоят из 3-4 нанографенов со средним размером в плоскости $\approx 2 \text{ нм}$ и межплоскостным расстоянием $d_c \approx 0,405 \text{ нм}$. Рентгеновский фотоэлектронный спектр С1s исходного АУВ представлен асимметричной линией, характерной для проводящих углеродных материалов, $\pi \rightarrow \pi^*$ -возбуждениями и малоинтенсивными сигналами от углерода кислородсодержащих функциональных групп.

АУВ фторировались при температурах ($T_{\text{синт}}$) от $\approx 100 \text{ }^\circ\text{C}$ до $\approx 300 \text{ }^\circ\text{C}$. В спектрах С1s фторированных АУВ присутствует компонента с энергией связи ($E_{\text{св}}$) на $\sim 3,0 \text{ эВ}$ большей, чем $E_{\text{св}}$ основной линии и относится к углероду групп С–F. Интенсивность этой линии, а значит и степень фторирования, зависит от $T_{\text{синт}}$. В АУВ, фторированном при $T_{\text{синт}} \sim 150 \text{ }^\circ\text{C}$, интегральная интенсивность линии от С–F составляет 25-30% от общей интенсивности сигнала углерода, что приблизительно соответствует процентному содержанию краевых атомов нанографита в исследованных АУВ. Фотоэлектронные линии образца, фторированного при $T_{\text{синт}} \approx 300 \text{ }^\circ\text{C}$ сдвигаются в сторону меньших кинетических энергий, свидетельствуя об изменении электронного строения вещества. Симметризация основной линии и отношение интегральных интенсивностей компонент спектра С1s указывают на образование соединения, близкого по составу к $(\text{C}_2\text{F})_n$.

В спектрах С1s хлорированного АУВ присутствует компонента с $E_{\text{св}}$ на $\approx 1,5 \text{ эВ}$ большей, чем $E_{\text{св}}$ основной асимметричной линии углерода нанографита. $E_{\text{св}}$ С12р равна 199,8 эВ. На основании этих данных можно заключить, что хлор также образует ковалентную связь с краевыми атомами нанографита.

Таким образом, впервые синтезированы и изучены методом РФЭС нанографиты, края которых химически модифицированы атомами галогенов.

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ОКСИД МЕТАЛЛА И ХИТОЗАН

Николенко Ю.М.¹, Земскова Л.А.¹, Кайдалова Т.А.¹, Курявый В.Г.¹,
Баринов Н.Н.², Сергиенко В.И.¹

¹*Институт химии ДВО РАН, 690022 Владивосток,
пр. 100-летия Владивостока, 159*

²*Дальневосточный геологический институт ДВО РАН, 690022 Владивосток,
пр. 100-летия Владивостока, 159. E-mail: yury_nikolenko@mail.ru*

Органоминеральные композиты имеют актуальное значение для таких областей, как оптика, электроника, биология, биотехнология и т. д. Свойства этих композитов определяются свойствами органической и неорганической составляющей. Природные полисахариды и полимеры применяют для инкапсулирования или покрытия оксидов с использованием следующих методик: золь-гель, химическое соосаждение, синтез в микроэмульсиях и т. д. Большинство методик приводит к агрегации наночастиц в процессе синтеза. Для предотвращения кластерообразования используется синтез с применением темплатов. Улучшать характеристики керамических материалов, а также регулировать их формирование можно также с применением электрохимического осаждения.

В работе исследованы условия формирования биокомпозитов оксид металла (Ni, Cu)/хитозан, полученных методом катодного осаждения на углеродное волокно (УВ) либо электроосаждения на модифицированный хитозаном электрод из УВ. Катодное электроосаждение достигается через гидролиз ионов металлов или комплексов за счет генерируемого основания с образованием оксидов, осажденных на подложку (углеродное волокно).

Метод РФЭС был использован для оценки участия хитозана как комплексообразователя при формировании активного компонента в композите. Энергия связи остовных электронов переходного металла и наличие/отсутствие интенсивной сателлитной структуры в спектрах 2р-электронов позволили определить степень окисления никеля и меди в полученных материалах и характер окружения центрального иона. Полуколичественный элементный анализ по спектрам поверхности образцов в сравнении с данными других методов дает дополнительную информацию о распределении металла в приповерхностных слоях исследованных композитов.

ФОРМЫ НАХОЖДЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ (Hg, Cd, Pb) В СУЛЬФИДНЫХ МИНЕРАЛАХ В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ: ДАННЫЕ РФЭС, ЭОС, ААС ТВ

Пархоменко И.Ю., Таусон В.Л.

ИГХ СО РАН, Иркутск. E-mail: irapr@igc.irk.ru

Изучали распределение и формы нахождения ртути, кадмия и свинца в системах «сульфид – гидротермальный раствор» при $T = 400$ °С и $P = 0,5$ и 1 кбар. Сульфидные минералы представлены галенитом, сфалеритом, пиритом, пирротинном. Использовали метод «ловушек». Растворы из ловушек анализировали атомно-абсорбционным методом, ртуть определяли методом «холодного пара» на атомно-флуоресцентном спектрометре P.S.Analytical. Состав поверхности кристаллов определяли методами РФЭС и ЭОС с ионным травлением Ag^+ . Концентрации тяжелых металлов в различных формах их нахождения устанавливали методом атомно-абсорбционной спектроскопии термовыхода элемента (ААС ТВ), использующим различия в температурах максимума выхода относительно легко летучего элемента из образца (T_{max}), определяемые термической устойчивостью различных химических и фазовых его форм. Показано, что валовые коэффициенты распределения в большинстве случаев значительно превосходят «истинные» K_p для структурной примеси (кроме Cd и Hg в сфалерите, в основном, находящихся в структуре минерала). Ртуть поглощается поверхностью пирита в форме Hg(I), как в галените в присутствии вакансий свинца, а не Hg(II), как при нормальных условиях в отсутствие поверхностной неавтономной фазы [Behra P. et al. - Langmuir. 2001. V.17. P.3970]. При совместной кристаллизации пирита и сфалерита ртуть на поверхности пирита находится в форме Hg(I), тогда как на поверхности сфалерита – в форме Hg(II). Высокие содержания ртути на поверхности пирита, скорее всего, связаны с верхним хемосорбированным слоем, содержащим также хлор. В гидротермальных условиях преобладают механизмы, обеспечивающие удержание элемента за счет его вхождения в состав неавтономных поверхностных фаз и взаимодействия с поверхностными дефектами.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант № 09-05-00173-а) и СО РАН (проекты №117 и ОНЗ-5.1).

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В
ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБРАЗЦАХ НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ
МЕТАЛЛОВ**

Рябова В.И.¹, Сапожников Г.В.¹, Шабанова И.Н.²

¹*Удмуртский государственный университет, Ижевск, 426034,
Университетская, 1, E-mail: val-tina86@rambler.ru*

²*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

Проведено исследование образцов опытной партии наномодифицированных чугунов и сталей.

Методом электронной спектроскопии, т.к. данный метод весьма чувствителен к межатомному взаимодействию в веществах, на рентгеноэлектронном магнитном спектрометре ЭМС-100 проведено исследование характера межатомного взаимодействия в образцах.

Модификатор вступает во взаимодействие с атомами углерода и адсорбируются, прежде всего, на торцах кристаллов, где имеются свободные связи. В результате этого тормозится процесс разрастания пластин графита вдоль базисных плоскостей, замедляется процесс графитизации и создаются условия наращивания кристалла в поперечном направлении и образования компактных включений графита. Роль модификации в чугуне сводится к передаче части валентных электронов атомам графита с образованием определенной доли атомов с энергетически более устойчивой алмазоподобной sp^3 -гибридизацией электронов.

Итак, результаты проведенных исследований позволяют сделать выводы, касающиеся характера межатомного взаимодействия модифицированных чугунов и механизма образования разнообразных форм графита в них. Показана возможность создания в образцах алмазоподобной структуры углерода с sp^3 -электронной конфигурацией. Высокая прочность исследуемых образцов объясняется присутствием в них комплексов С-С с sp^3 -гибридизацией, которые будучи вкрапленными в матрицу упрочняют структурные элементы, задерживают развитие пачек скольжения при деформации.

**ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ
СТРУКТУРЫ БАНЧЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК
ИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ АТОМАМИ ЙОДА**

Смоленцев Н.Ю.¹, Солдатов А.В.¹, Alvarez L.², Bantignies J.L.²

¹*Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, 344090,
ул. Зорге, 5, smolentsev@mail.ru*

²*Laboratoire des Colloïdes, Verres et Nanomatériaux,
University of Montpellier – France*

Многие важные с точки зрения физико-химические свойства углеродных нанотрубок (например, проводимость) можно контролировать методом интеркалирования примесными атомами, как донорными, так и акцепторными. В работе исследована электронная и локальная атомная структуры углеродных нанотрубок, интеркалированных атомами йода. Были получены спектры рентгеновского поглощения (XANES) за L₁-краем йода. Теоретический анализ спектров проведен с помощью самосогласованного метода конечных разностей, реализованного в программе FDMnes2009, за пределами маффин-тин приближения для потенциала. Рассмотрены различные структурные модели: ион йода внутри нанотрубки, между двумя нанотрубками, в позиции замещения углерода. Рассмотрено также образование димера I₂ внутри нанотрубки и цепочки атомов йода. Определены структурные параметры в области вокруг атомов йода на основе метода многомерной интерполяции спектров, реализованный в программном комплексе FitIt2.11 и метода функционала электронной плотности (программные комплексы ADF2009.1b и ADF_Vand2009). Получены полные и парциальные плотности электронных состояний и пространственное распределение орбиталей HOMO и LUMO.

**ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ТЕТРААНИЛИНСИЛАНА ПО
РЕНТГЕНОВСКИМ И ЭЛЕКТРОННЫМ СПЕКТРАМ****Татевосян М.М.***НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, 344090, пр. Стачки, 194, mmtat@ya.ru*

В работе проведено исследование структуры молекулярных уровней соединения $\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_4$ по рентгеновскому флуоресцентному $\text{SiK}\beta_1$ – спектру.

Как известно [1], $\text{SiK}\beta_1$ – спектр многоатомного кремнийорганического соединения возникает в результате электронных переходов с уровней, МО которых содержат примесь 3p-АО Si, на 1s–уровень Si. При этом интенсивности компонентов $\text{SiK}\beta_1$ –спектра пропорциональны Si 3p-заселенностям МО соединения, а энергетическая структура спектра отражает структуру уровней лигандов, участвующих в химической связи с атомом Si.

В $\text{SiK}\beta_1$ –спектре тетраанилинсилана проявляется 8 компонентов. Два основных в сумме составляют 60% общей интенсивности спектра и отражают взаимодействия, обеспечивающие σ – связи с участием 1e - орбитали NH_3 , а также $2e_{1u}$ - и $2b_{1u}$ -орбиталей C_6H_6 . Среди других особое значение имеет чётко выраженный коротковолновый компонент, который проявляет наличие связей π - типа 3p Si – $2a_1(n)$ NH_3 и $1e_{1g}$ C_6H_6 .

Из анализа $\text{SiK}\beta_1$ – спектра и литературных данных ФЭС анилина, аммиака и бензола следует, что структура молекулярных уровней $\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_4$ представляет собой слабо возмущенную взаимодействиями с валентными уровнями кремния систему молекулярных уровней анилина, которая в свою очередь состоит из уровней бензола, возмущенных взаимодействиями с уровнями аммиака. В анилине σ – связи между фрагментами аммиаком и бензолом обеспечиваются в основном двумя МО, образованными комбинацией 1e – орбиталей аммиака с $2e_{1u}$ – и $2b_{1u}$ – орбиталями бензола. По рентгеновскому $\text{SiK}\beta_1$ – спектру $\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_4$ обнаружен сложный механизм π – связывания с участием Si 3p - орбиталей, неподелённой пары азота и π – системы бензола. Построена корреляционная диаграмма, которая иллюстрирует взаимосвязи между системами валентных электронных уровней тетраанилинсилана и составляющих её фрагментов.

[1]. Татевосян М.М., Шуваев А.Т., Землянов А.П., ЖСХ, 1977, т.18, №4, с. 684-686.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СТАБИЛЬНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ И КОМПЛЕКСОВ Cu(II) С КООРДИНИРОВАННЫМИ НИТРОКСИЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ

Федоренко А.Д.¹, Мазалов Л.Н.¹, Крючкова Н.А.¹, Фурсова Е.Ю.¹,
Овчаренко В.И.², Третьяков Е.В.²

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, e-mail: fad007@ya.ru

²Международный томографический центр СО РАН,
ул. Институтская, 3а, Новосибирск, 630090

Координационные соединения переходных 3d-металлов со стабильными нитроксильными радикалами в настоящее время привлекают большое внимание в связи с возможностью создания на их основе молекулярных магнетиков. Магнитные свойства рассматриваемых комплексов переходных металлов с многоатомными хелатными лигандами, имеющими в своем составе нитроксильную группу (N ÷ O), определяются характером электронных взаимодействий парамагнитных центров Cu²⁺ и N ÷ O.

Для понимания природы магнитных взаимодействий актуальным является изучение характера распределения электронной плотности, а также возможных каналов делокализации электронной плотности в соответствующих комплексах. Известно, что энергия внутренних уровней атомов (1s, 2p) входящих в состав химических соединений может служить хорошим индикатором зарядового состояния соответствующих атомов. В связи с этим в настоящей работе проведено рентгеноэлектронное изучение связи 1s-уровней атомов азота N(1s), углерода C(1s), кислорода O(1s), а также 2p_{3/2,1/2}-уровней атомов меди Cu(2p_{3/2}), Cu(2p_{1/2}), входящих в состав комплексов с пиразамещенными нитроксильными и 2-имидазолиновыми нитроксильными радикалами. Для уточнения механизмов взаимодействия нитроксильной группы лиганда с ионом меди были получены L α -спектры меди и Cu(3s)-рентгеноэлектронные спектры, а также проведены квантовохимические расчеты.

На основании полученных данных была проведена интерпретация отдельных компонент в экспериментальных рентгеноэлектронных спектрах свободных некоординированных нитроксильных радикалов и комплексах Cu(II) с координированными нитроксильными лигандами.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИРОВАННЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Федосеева Ю.В.¹, Булушева Л.Г.¹, Коротеев В.О.¹, Юданов Н.Ф.¹,
Окотруб А.В.¹, Felten A.², Flahaut E.³, Vyalikh D.V.⁴

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева,
Новосибирск, пр-т Ак. Лаврентьева, 3, E-mail: jjulia@ngs.ru

²Laboratoire Interdisciplinaire de Spwctroscopie Electronique,
Facultes Universitaires Notre Dame de la Paix, Namur, Belgium

³Centre InteruniVersitaire de Recherche et d'Ingenierie des Materiaux,
Universite Paul-Sabatier, 31062 Toulouse cedex 9, France

⁴Institute of Solid State Physics, Dresden University of Technology,
Dresden, Germany

Интерес к фторированным двухслойным углеродным нанотрубам (ДУНТ) связан с их уникальной структурой, а именно, атомы фтора присоединяются только к внешней трубе, при этом структура и свойства внутренней трубы не изменяются. В данной работе исследовались ДУНТ фторированные тремя различными методами: (1) F₂ при 200 °С, (2) CF₄ плазмой и (3) в парах BrF₃ при комнатной температуре. Для получения информации о структуре

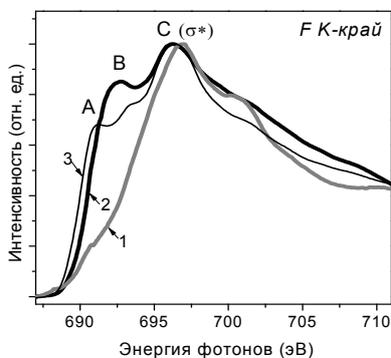


Рис. 1. Рентгеновские спектры поглощения вблизи F К-края ДУНТ, фторированных с использованием (1) CF₄ плазмы, (2) BrF₃ и (3) F₂.

фторированных ДУНТ использовались методы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФС), спектроскопии поглощения в предкраевой области (РСП) и рентгеновской эмиссионной спектроскопии (РЭС). РФС и РСП спектры были измерены на Берлинской станции синхротронного излучения (БЕССИ) с использованием оборудования Российско-Германского канала. РЭС спектры измерялись на лабораторном спектрометре «Стеарат». Содержание фтора в образцах (1), (2), и (3), определенное из разложения РФС C 1s спектров, составило 33, 22, и 17 ат.%. Найдено, что энергия компонент C 1s спектра различна для ДУНТ, фторированных разными методами. Кроме того, форма РСП вблизи F К-края зависит от метода фторирования и, как предполагается, является чувствительной к расположению атомов фтора на поверхности ДУНТ.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИРОВАННЫХ ОДНОСЛОЙНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Федосеева Ю.В.¹, Булушева Л.Г.¹, Юданов Н.Ф.¹, Окотруб А.В.¹,
Fonseca A.², Vyalikh D.V.³

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, Новосибирск,
пр-т Ак. Лаврентьева 3, E-mail: jjulia@ngs.ru*

²*Laboratoire de Chimie et d'Electrochimie des Surfaces, Namur, Belgium*

³*Institute of Solid State Physics, Dresden University of Technology, Dresden,
Germany*

Присоединение атомов фтора к поверхности углеродных нанотрубок (УНТ) приводит к изменению их химических и физических свойств. В данной работе для исследования фторированных однослойных и многослойных УНТ применялся комплексный подход, объединяющий методы рентгеновской спектроскопии и квантовой химии. Рентгеновская спектроскопия чувствительна к локальному окружению атома и позволяет извлечь информацию о характере связи. Были измерены рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФС) внутренних С 1s и F 1s уровней и валентной полосы, рентгеновские спектры поглощения (РСП) вблизи С К- и F К-краев, рентгеновские эмиссионные (РЭС) С К_α-спектры. Для интерпретации эксперимента использовались неэмпирические квантово-химические расчеты фторированного фрагмента графитовой плоскости, по результатам которых были смоделированы РФС спектр валентной полосы и РЭС С К_α-спектр. Просвечивающая электронная микроскопия показала, что трубчатая структура образцов УНТ сохраняется после фторирования. Состав фторированных одно- и многослойных УНТ оценивался из разложения С 1s линии. Установлено, что степень фторирования многослойных УНТ меньше, чем однослойных УНТ. Информация о плотностях валентных и незанятых уровней фторированных УНТ была получена из РФС валентной полосы, РЭС и РСП спектров. Было показано, что кривизна УНТ влияет на относительные интенсивности РСП вблизи F К-края. Фторированные однослойные УНТ подвергались прогреву в вакууме при 250 °С и бомбардировке ионами Ag⁺ (1 кэВ) с целью изучения их стабильности. Анализ РФС и РСП показал, что в результате таких воздействий происходит дефторирование образцов и образование дефектов в стенках УНТ.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДГЕЗИОННЫХ СВЯЗЕЙ В НАНОСЛОЕВОМ КОМПОЗИТЕ ДИОКСИД МАРГАНЦА – МЕТАЛЛ

Фомина Л.В.¹, Беляева Н.А.², Жуковский М.С.², Безносюк С.А.²

¹*Ангарская государственная техническая академия,
Ангарск, 60, ул. Чайковского, flvbaan@mail.ru*

²*Алтайский государственный университет, Барнаул*

Известны сопряжённые катализаторы на основе наночастиц платины и оксида железа [1]. Целью представленной работы является исследование нанокompозитного катализатора на основе сочетания двух веществ коллоидной дисперсности: диоксида марганца и переходного или благородного металла.

В работе кристаллохимическим анализом сопряжения модификаций диоксида марганца с металлическими подложками переходных и благородных металлов выявлено, что наибольшее число адгезионных связей N имеют наиболее устойчивая принадлежащая к тетрагональной сингонии β модификация MnO_2 и принадлежащие к кубической сингонии металлы δ -Mn, Co, β -Ni, Ag, Au. С применением пакета «Компьютерная Нанотехнология» [2] были построены компьютерные модели интерфейса нанокompозитов с наноструктурой размером $10 - 4 - 4$, состоящие из 160 элементарных ячеек, содержащих 1280 атомов: 640 атомов металла, остальное – атомы диоксида марганца. Адгезия слоёв атомов металла и диоксида марганца осуществлялась через атомы марганца. В табл. 1 даны суммарная энергия адгезии ΣE , число интерфейсных связей N и энергия адгезии E, приходящейся на одну интерфейсную связь Me- MnO_2 .

Таблица 1. Результаты расчёта энергии адгезии между нанослоями Me- MnO_2 .

Интерфейс	ΣE , эВ	N	E, эВ/связь
Mn – MnO_2	61.9	121	0.51
Co – MnO_2	37.4	121	0.31
Ni – MnO_2	55.8	121	0.46
Ag – MnO_2	14.9	121	0.12

[1]. Wang C., Daimon H. and Sun S. Nano. Lett., 2009; V. 9(4), p. 1493-1496.

[2]. Безносюк С.А., Жуковский М.С., Важенин С.В., Лерх Я.В. КомпНаноТех.

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2009613043 от 10.07.2009 г.

КЛАСТЕРНЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР НА ОКИСЛАХ

Чувылкин Н.Д., Нестеров И.Д.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук, Российская Федерация, 119991 Москва,
Ленинский просп., 47. E-mail: smolensk@server.ioc.ac.ru*

Любой гетерогенно-каталитический процесс неизменно сложен и нередко в нем полностью отображается все многообразие химии. Неудивительно поэтому, что химические аргументы и эмпирические доказательства, как правило, вызывают большее доверие, чем результаты квантово-химических расчетов элементарных стадий гетерогенных каталитических реакций. Однако вряд ли можно научиться управлять важными гетерогенно-каталитическими процессами, детально не проанализировав стереоэлектронные факторы, влияющие на механизмы протекания этих процессов.

Благодаря широкомасштабным приложениям спектроскопических методов и стремительному развитию вычислительной техники в квантовой химии хемосорбции и катализа во второй половине прошлого века возник новый подход, называемый сейчас кластерным. При этом пристальное внимание было не в последнюю очередь уделено интерпретации экспериментальной информации кластерного уровня о хемосорбционных частицах, регистрируемых различными спектроскопическими методами.

Нами охарактеризованы разработанные в ИОХ РАН кластерные подходы к квантово-химическому анализу процессов адсорбции и гетерогенного катализа на оксидах, сводящиеся к конструированию ковалентных, а также незаряженных и частично заряженных ионных кластерных моделей поверхностных активных центров и их комплексов с молекулами и свободными радикалами. Приведены примеры плодотворного использования таких моделей при извлечении структурно информации из радиоспектроскопических, ультрафиолетовых и инфракрасных спектров простых молекул и свободных радикалов, адсорбированных, на широко применяемых на практике, оксидных системах.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ МЕТОД МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ
ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ (МВФ), АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ
ПРИБЛИЖЕНИЮ ХАРТРИ–ФОКА**

**Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., Кузьмин И.В.,
Маслова Л.К., Зефилов Н.С.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук, Российская Федерация, 119991 Москва,
Ленинский просп., 47. E-mail: smolensk@server.ioc.ac.ru*

Исходным пунктом разработки предлагаемого нами подхода служит вывод о недостаточности общепринятой сейчас трактовки принципа Паули наряду со способом построения полных МВФ химических систем с помощью некоторой подгруппы симметрической группы, благодаря чему спиновые и пространственные координаты удается разделить для числа электронов $N > 2$. При таком построении МВФ расчеты упрощаются в несколько раз, вплоть до $N!$, поскольку исходная задача сводится к $N!$ изоморфным задачам, каждая из которых неизмеримо проще исходной. Например, для молекулы LiH ($N = 4$) можно ожидать повышения производительности расчетной процедуры по сравнению с традиционно применяемой до 24 раз.

К настоящему времени наглядные формы узловых поверхностей МВФ построены и проанализированы для традиционно представительных в квантовой химии тестовых систем: атомов гелия в триплетном состоянии 3S и лития в основном состоянии 2S , а также молекулы водорода в триплетном состоянии $^3\Sigma_u^+$.

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ

Шуваева В.А.¹, Шуваев А.Т.^{1†}, Чернышов А.А.², Зубавичус Я.В.²,
Велигжанин А.А.², Шуваева Е.Т.³, Власенко В.Г.¹

¹НИИФизики ЮФУ, 344090, Ростов-на-Дону,
пр. Стачки, 194, E-mail: v_shuvaeva@mail.ru

²КЦСИ «Курчатовский» институт, Москва

³Физический факультет ЮФУ, Ростов-на-Дону

В целях изучения особенностей строения слоистых соединений, относящихся к классу фаз Ауривиллиуса, нами проведено исследование локального окружения атомов Nb в $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$, $\text{Bi}_2\text{CaNaNb}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Bi}_5\text{CaNaNb}_3\text{O}_{18}$ на основе анализа рентгеновских спектров поглощения в области Nb K-края. Для структуры фаз Ауривиллиуса характерно чередование флюоритоподобного слоя $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$ и нескольких перовскитных слоев $[\text{A}_{m-1}\text{B}_m\text{O}_{3m+1}]^{2-}$ (значение m определяется количеством перовскитных слоев и может принимать целые или полуцелые значения в интервале 1-5). Изученные соединения различаются по количеству перовскитовых слоев (для $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$ m=1.5, для $\text{Bi}_2\text{CaNaNb}_3\text{O}_{12}$ m=2, и для $\text{Bi}_5\text{CaNaNb}_3\text{O}_{18}$ m=3). Атомы Nb во всех этих соединениях расположены внутри слоев со структурой перовскита и имеют октаэдрическое кислородное окружение.

Особенности предкраевой структуры спектров поглощения указывают на то, что атомы Nb во всех исследованных соединениях смещены из центров кислородных октаэдров. Характер радиального распределения атомов кислорода вокруг Nb свидетельствует о том, что в $\text{Bi}_2\text{CaNaNb}_3\text{O}_{12}$ Nb находится в более высокосимметричной позиции по сравнению с $\text{Bi}_5\text{CaNaNb}_3\text{O}_{18}$ и $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$, образуя несколько близких связей Nb-O. Это находится в соответствии с более высокосимметричной пространственной группой $I4/mmm$ этого соединения и указывает на то, что структурный беспорядок и связанное с ним отклонение положения Nb с оси четвертого порядка невелики. В двух других соединениях ромбическая макроскопическая симметрия допускает большой разброс расстояний Nb-O, в связи с чем на Фурье-трансформанте XAFS пик, соответствующий первой координационной сферы расщепляется на несколько максимумов.

РЕКЛАМА

В течение последних 30 лет компания *ThermoFisher Scientific* (ранее *VG scientific*) является мировым лидером в области оборудовании для анализа поверхности методами электронной спектроскопии.

ThermoFisher
SCIENTIFIC

THETA PROBE – настоящий прорыв в технологиях анализа поверхности и покрытий методами на основе РФЭС. Прибор позволяет проводить количественный и качественный анализ поверхности различных материалов и исследования ультратонких плёнок без разрушения. Прибор обладает уникальной функцией построения карт распределения химических элементов по поверхности, карт толщин покрытий, распределения примесей и т.д. **Уникальный 2D детектор с угловым разрешением** позволяет проводить широкий спектр неразрушающих исследований на неподвижном образце (последовательность слоёв, глубинное профилирование, анализ толщины скрытых слоёв, анализ однородности толщины, состава, и концентрации в отдельном слое и т.д.).



ESCALAB 250 XI – новейший многофункциональный рентгеновский микрозонд, позволяющий проводить полный спектр РФЭС (XPS) исследований. Прибор обладает уникальными возможностями построения электронно-оптических изображений выбранного участка без сканирования. **Отличается высочайшим спектральным разрешением (полнофункциональная спектроскопия с участка < 6 мкм), чувствительностью, лучшей скоростью регистрации на рынке.** В стандартном исполнении, комплекс обладает возможностью регистрации спектров ионного рассеяния и REELS, комплектуется модулями оже-спектроскопии, ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии, сканирующей электронной и оже-микроскопии. Анализ образцов различных конфигураций с широким спектром препаративных опций.



K-ALPHA – полностью интегрированный РФЭС спектрометр, отвечающий самым современным требованиям. Максимально компактный и простой в обращении прибор, сочетающий разумную цену с высокой функциональностью. Все процессы максимально автоматизированы, все операции проводятся без вмешательства пользователя (за исключением загрузки образца). Система комплектуется ионной пушкой с функцией зарядовой нейтрализации (для исследования полупроводников). 128-канальный анализатор для построения высококачественных спектральных карт. Автоматическое создание отчёта.



WWW.INTERTECH-CORP.RU

Systems & Components for Surface Analysis

- Electron Energy Spectrometers
- Ion, Electron, UV, and X-Ray Sources
- Scanning Probe Microscopes
- LEED Optics
- Deposition Equipment

... for XPS, UPS, AES, SEM/SAM,
STM/AFM, LEEM, PEEM, SIMS/
SNMS, LEED, HREELS, ISS



SPECS Surface Nano Analysis GmbH
Voltastrasse 5
13355 Berlin
Germany
Tel.: +49 30 46 78 24-0
Fax: +49 30 46 42 08-3
Email: support@specs.com
Web: www.specs.com



Innovation in Surface Spectroscopy and Microscopy Systems

**SPECS: STATE-OF-THE-ART INSTRUMENTS
FOR NANOSTRUCTURES ANALYSIS.
CURRENT STATE AND PROSPECTIVE**

Bondarchuk A., Heichler W.

SPECS GmbH, 13355 Berlin, Voltastrasse 5, Germany, a.bondarchuk@specs.de

Nanotechnology deals with particles and structures smaller than 100nm down to clusters only consisting of a couple of atoms. In this regime size effects and finally quantum size effects determine the properties of nanomaterials. To tailor nanomaterials the basic knowledge of these effects is crucial. While theoretical studies are widely used the application of experiments comes to the limit. Sensitivity, resolution, stability and the materials' environment in the working device are the limiting factors for many chemical, electronic and structural sensitive methods. During the last twenty years special techniques have been developed to study such materials with highest lateral resolution (e.g. Low energy electron microscopy (LEEM), Photoelectron emission microscopy (PEEM), different scanning probe microscopies (NC-AFM, STM)), as well as *in situ* methods in high pressures (high pressure photoelectron spectroscopy HP-PES and HP-SPM), in liquids, at extremely high and extremely low temperatures. This presentation gives an overview of the most promising existing methods and their commercially available realizations, summarizing chances and limitations for future developments from the perspective of a supplier of scientific instruments.

**ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ
ИЗУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ
ТВЁРДЫХ ТЕЛ**

Бредихин И.

TechnoInfo Ltd, London, United Kingdom

www.technoinfo.ru

E-mail: ivan.bredikhin@technoinfo.ru

Всё возрастающий интерес к исследованиям свойств структуры и состава поверхности твёрдых тел стимулирует как развитие традиционных методов и технологий, так и разработку новых подходов к анализу поверхности. Свойства и реакционная способность поверхности зависят от химического состава; химической структуры; атомной структуры; электронного состояния, химических связей; топографии поверхности.

При использовании одного метода невозможно получить всю необходимую информацию, однако для решения определенных задач редко требуется применение всех доступных методов. В докладе будет рассказано о современных XPS, Auger, TOF SIMS, LEIS, UPS (Компаний Kratos Analytical, IonTOF, FEI) системах для проведения комплексного анализа поверхности твёрдых тел.

СПИСОК УЧАСТНИКОВ

Авакян Леон Александрович

Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
E-mail: laavakyan@sfedu.ru

Альперович Игорь Гариевич

Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
E-mail: alperovich.igor@gmail.com

Андрюшечкин Борис Владимирович

Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН
ул. Вавилова, 38
119991, Москва
Тел.: +7 (499) 503-87-84
Факс: +7 (499) 503-87-69
E-mail: andrush@kapella.gpi.ru

Асанов Игорь Петрович

Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
E-mail: asan@che.nsk.su

Бабанов Юрий Александрович

Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-38-37
Факс: +7 (343) 374-52-44
E-mail: babanov@imp.uran.ru

Бакиева Ольга Ринатовна

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-01-63
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: ftiran@mail.ru

Безносок Сергей Александрович

Алтайский государственный университет
пр. Ленина, 61
656049, Барнаул
Тел.: +7 (3852) 36-86-36
Факс: +7 (3852) 36-39-21
E-mail: bsa1953@mail.ru

Бельская Людмила Владимировна

Омский научный центр СО РАН
ул. Нефтезаводская, 54
644040, Омск
E-mail: LudaB2005@mail.ru

Betz Wolfgang

Physical Electronics, Inc.
18725 Lake Drive East,
Chanhassen, MN,
USA, 55317
Phone: 952-828-6478
Fax: 952-828-6478
E-mail: microscop@microscop.ru

Блошкин Алексей Александрович

Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 13
630090, Новосибирск
Тел.: +7(383) 333-28-32
Факс: +7(383) 333-28-32
E-mail: bloshkin@isp.nsc.ru

Бондарчук Александр Борисович

SPECS GmbH
Voltastrasse, 5
13355, Berlin, Germany
Phone: + 49 30 47 78 24 9339
E-mail: a.bondarchuk@specs.de

Боронин Андрей Иванович

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-96-31
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: boronin@catalysis.ru

Бредихин Иван Сергеевич

Техноинфо Лтд.
Кутузовский проспект, д. 9, корп. 2а,
офис 77
121248, Москва
Тел.: +7 (499) 243-66-26
Факс: +7 (499) 243-66-26
E-mail: ivan.bredikhin@technoinfo.ru

Брыкалова Ксения Олеговна

Санкт-Петербургский государственный
университет
Университетская наб., д.7-9
199034, Санкт-Петербург
E-mail: ksenia_olegovna@mail.ru

Бувайло Андрей Иванович
Киевский национальный университет
имени Тараса Шевченко
ул. Владимирская, 60
01601, Киев, Украина
E-mail: crimea1@i.ua

Бугаев Лусеген Арменакович
Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-36
Факс: +7 (863) 297-51-20
E-mail: bugaev@sfedu.ru

Булушева Любовь Геннадьевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-53-52
E-mail: bul@che.nsk.su

Бухтияров Валерий Иванович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-67-71
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: vib@catalysis.ru

Валеев Ришат Галеевич
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел: +7 (3412) 43-02-94
Факс: +7 (3412)722529
E-mail: valeev@lasas.fti.udm.ru

Варнек Владимир Алексеевич
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
E-mail: varnek@niic.nsc.ru

Ведринский Ростислав Викторович
НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 222-37-56
Факс: +7 (863) 243-40-44
E-mail: vedr@ip.rsu.ru

Веригин Александр Александрович
ТОО «ТехноАналит»
ул. Крылова, 85
070004, Усть-Каменогорск, Казахстан
Тел.: 8 (7232) 25-87-77
Факс: 8 (7232) 25-87-77
E-mail: vaadaltek@ukg.kz

Власенко Валерий Григорьевич
НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 222-37-58
Факс: +7 (863) 243-40-44
E-mail: vlasenko@ip.rsu.ru

Вовна Виталий Иванович
Дальневосточный государственный
университет
ул. Суханова, 8
690600, Владивосток, ГСП
E-mail: vovna@vido.dvgu.ru

Володин Александр Михайлович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-94-21
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: volodin@catalysis.ru

Волыхов Андрей Александрович
Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова
Ленинские горы, д.1, стр.3
199991, Москва
E-mail: andyvolykhov@yandex.ru

Воробьев Сергей
Институт химии и химической
технологии СО РАН
ул. К. Маркса, 42
660049, Красноярск
E-mail: yumikh@icct.ru

Вялих Денис
Institute of Solid State Physics, Dresden
University of Technology
D-01062 Dresden, Germany
E-mail: vyalikh@physik.phy.tu-dresden.de

Гай Дмитрий Евгеньевич
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел: +7 (3412) 43-01-63
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: lasas@fti.udm.ru

Галахов Вадим Ростиславович
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-37-37
Факс: +7 (343) 374-52-44
E-mail: galakhov@ifmlrs.uran.ru

Галиева Елена Геннадьевна
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-37-37
Факс: +7 (343) 374-52-44
E-mail: physicsmet@yandex.ru

Герасимов Иван Николаевич
Институт геохимии им. А.П. Виноградова
СО РАН
ул. Фаворского, 1а, п/я 701
650033, Иркутск
Тел.: +7 (3952) 42-99-67
E-mail: alive_man@bk.ru

Гильмутдинов Фаат Залалутдинович
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-01-63
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: gilmutdinov_f@mail.ru

Голуб Алексей Яковлевич
Уральский государственный университет
им. А.М. Горького
пр. Ленина, 51
620083, Екатеринбург
E-mail: alegolub@yandex.ru

Гончаров Олег Юрьевич
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 72-14-36
E-mail: olaf@nm.ru

Горбатенков Дмитрий Михайлович
Intertech Corporation
ул. Зеленая Горка, корп.1, офис 315
6300606 Новосибирск
Тел./Факс: +7 (383) 335-96-35
E-mail: nsk@intertech-corp.ru
service-novosibirsk@intertech-corp.ru

Горбунов Вячеслав Алексеевич
Вологодский государственный
технический университет
ул. Ленина, 15
160000, Вологда
E-mail: vagor@mh.vstu.edu.ru

Гуда Александр Александрович
Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: guda_sasha@mail.ru

Гуляев Роман Владимирович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-82-69
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: gulyaev@catalysis.ru

Давыдова Наталья Валентиновна
Нижегородский государственный
педагогический университет
ул. Ульянова, 1, ГСП-37
603950, Нижний Новгород
E-mail: nati.d@mail.ru

Данилова Ирина Геннадьевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-97-88
E-mail: danig@catalysis.ru

Домашевская Эвелина Павловна
Воронежский государственный
университет
Университетская пл., 1
394006, Воронеж
Тел.: +7 (4732) 20-83-63
Факс: +7 (4732) 20-83-63
E-mail: ftt@phys.vsu.ru

Дубинин Юрий Владимирович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
E-mail: dubinin@catalysis.ru

Дуда Татьяна Александровна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
E-mail: tanyaduda@mail.ru

Евстигнеева Елена Михайловна
Московская государственная академия
тонкой химической технологии
им. М.В. Ломоносова
пр. Вернадского, 86
119571, Москва
Тел.: +7 (495) 936-89-14
E-mail: eme2003@list.ru

Евсюкова Марина Анатольевна
Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: marina-evsukova@mail.ru

Ельцов Константин Николаевич
Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН
ул. Вавилова, д.38
119991, Москва
Тел./Факс: +7 (499) 503-87-69
E-mail: eltsov@kapella.gpi.ru

Замулина Татьяна Владимировна
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел./Факс: +7 (383) 330-62-97
E-mail: zam@catalysis.ru

Зарубин Иван Андреевич
НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 222-37-58
Факс: +7 (863) 243-40-44
E-mail: zarubin@mail.ru

Иванов Кирилл Евгеньевич
Российский научный центр
«Курчатовский институт»
пл. Академика Курчатова, 1
123182, Москва
Тел.: +7 (499) 196-90-28
E-mail: ivanov@ignph.kiae.ru

Иванова Татьяна Михайловна
Институт общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова РАН
Ленинский пр., 31
119991, Москва
Тел.: +7 (495) 955-48-20
Факс: +7 (495) 954-12-79
E-mail: tiva@igic.ras.ru

Илясов Виктор Васильевич
Донской государственный технический
университет
пл. Гагарина, 1
344010, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 238-13-05
Факс: +7 (863) 232-79-53
E-mail: viily@mail.ru

Исмагилов Ильяс Зинферович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-76-70
Факс: +7 (383) 330-62-19
E-mail: iismagil@catalysis.ru

Исупов Никита Юрьевич
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-25-39
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: xps@fti.udm.ru

Каичев Василий Васильевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-97-74
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: vyk@catalysis.ru

Калинкин Александр Васильевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-95-27
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: avkalinkin@mail.ru

Канажевский Владислав Вацлавович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
E-mail: gugon@mail.ru

Канунникова Ольга Михайловна
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: uds@pti.udm.ru

Каныгин Михаил Андреевич

Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск

E-mail: mkanygin@gmial.com

Карбань Оксана Владиславовна

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск

E-mail: uds@pti.udm.ru

Карбовский Владимир Леонидович

Институт металлофизики
им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
Бульвар Вернадского, 36
03142, ГСП, Киев-142, Украина

Тел.: 0(44) 424-20-44

Факс: 0(44) 424-20-44

E-mail: karb@imp.kiev.ua

Кеслер Валерий Геннадьевич

Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 13
630090, Новосибирск

Тел.: +7 (383) 333-35-04

E-mail: kesler@isp.nsc.ru

Кибис Лидия Сергеевна

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск

E-mail: kibis@catalysis.ru

Ковалева Светлана Анатольевна

Объединённый институт
машиностроения НАН Беларуси
ул. Академическая, 12
220072, Минск, Беларусь

Тел.: +375 17 294-92-12

Факс: +375 17 284 -24-01

E-mail: sveta_kovaleva@tut.by

Кожевников Владимир Изосимович

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск

Тел.: +7 (3412) 21-69-66

E-mail: uds@pti.udm.ru

Козаков Алексей Титович

НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону

Тел.: +7 (863) 222-37-58

Факс: +7 (863) 243-40-44

E-mail: Kozakov_a@mail.ru

Козинкин Александр Владимирович

НИИ физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194

344090, Ростов-на-Дону

Тел.: +7 (863) 222-37-58

Факс: +7 (863) 243-40-44

E-mail: veles777@list.ru

Козинкин Юрий Александрович

НИИ физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194

344090, Ростов-на-Дону

Тел.: +7 (863) 222-37-58

Факс: +7 (863) 243-40-44

E-mail: Kozinkin_U@mail.ru

Кортаев Евгений Владимирович

Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск

E-mail: Jodow@rambler.ru

Кочубей Вячеслав Иванович

Саратовский государственный
университет им. Н.Г. Чернышевского
ул. Астраханская, 83

410012, Саратов

E-mail: kochubey@optics.sgu.ru

Кочубей Дмитрий Иванович

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5

630090, Новосибирск

E-mail: kochubey@catalysis.ru

Кочур Андрей Григорьевич

Ростовский государственный
университет путей сообщения
пл. Народного Ополчения, 2

344017, Ростов-на-Дону

Тел.: +7 (863) 235-75-92

Факс: +7 (863) 245-06-13

E-mail: agk@rqups.ru

Кривенцов Владимир Владимирович

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5

630090, Новосибирск

Тел.: +7 (383) 329-40-13

Факс: +7 (383) 330-80-56

E-mail: kriven@mail.ru

Кривулько Кирилл Фёдорович
Белорусский государственный
университет
пр. Независимости, 4
220030, Минск, Беларусь
Тел.: (375 17) 200-77-89
E-mail: kf.kriv@mail.ru

Крючкова Наталья Анатольевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 316-53-41
Факс: +7 (383) 330-94-90
E-mail: knatali@ngs.ru

Кузнецов Михаил Владимирович
Институт химии твёрдого тела УрО РАН
ул. Первомайская, 91
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 362-33-56
Факс: +7 (343) 374-44-95
E-mail: kuznetsov@ihim.uran.ru

Кукуева Виталина Витальевна
Академия Пожарной безопасности
им. Героев Чернобыля
ул. Оноприенка, 8
18034, Черкассы, Украина
Тел.: +38 0 47255-09-71
Факс: +38 0 47255-09-71
E-mail: kukueva@yahoo.com

Курмаев Эрнст Загидович
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 374-41-83
Факс: +7 (343) 374-52-44
E-mail: kurmaev@ifmlrs.uran.ru

Лаврентьев Анатолий Александрович
Донской государственный технический
университет
пл. Гагарина, 1
344010, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 273-85-41
E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru

Лаврухина Светлана Александровна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
E-mail: OtmutiUqeOtmutil@mail.ru

Лагутин Борис Михайлович
Ростовский государственный
университет путей сообщения
пл. Народного Ополчения, 2
344017, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 266-55-49
Факс: +7 (863) 255-32-83
E-mail: bml@rgups.ru

Ломаченко Кирилл Андреевич
Физический факультет
Южного федерального университета
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
E-mail: kirlom@list.ru

Львов Игорь Борисович
Дальневосточный государственный
университет
ул. Суханова, 8
690950, Владивосток
Тел.: +7 (4232) 42-93-00
Факс: +7 (4232) 42-93-00
E-mail: lvov@vido.dvqu.ru

Львовский Владимир Эльевич
Институт химической физики
им. Н.Н. Семенова РАН
ул. Косыгина, 4
119991, Москва
E-mail: vl.lvovskiy@mail.ru

Ляхович Алевтина Михайловна
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 21-26-55
Факс: +7 (3412) 72-14-36
E-mail: alalam@mail.ru

Мазалов Лев Николаевич
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-64-33
E-mail: lm@che.nsk.su

Маратканова Алена Николаевна
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: alnima08@mail.ru

Маслаков Константин Игоревич

Российский научный центр
«Курчатовский институт»
пл. Академика Курчатова, 1
123182, Москва

Тел.: +7 (499) 196-72-86

E-mail: nonvitas@gmail.com

Месилов Виталий Владимирович

Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург

E-mail: mesilov@imp.uran.ru

Микулинская Наталия Евгеньевна

Техноинфо Лтд.
Кутузовский проспект, д. 9, корп. 2а,
офис 77
121248, Москва

Тел.: +7 (499) 243-66-26

Факс: +7 (499) 243-66-26

Миллер Александр

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск

E-mail: miller@catalysis.ru

Михлин Юрий Леонидович

Институт химии и химической
технологии СО РАН
ул. К. Маркса, 42
660049, Красноярск

E-mail: yumikh@icct.ru

Молодцов Сергей Львович

European X-Ray Free Electron Laser
(XFEL)

Visiting address: Albert-Einstein-Ring
19 - Hamburg-Lurup

Mailing address:

c/o DESY - Notkestrasse 85

22607 Hamburg, Germany

Phone: +49 (0) 40 8998-5779

Fax: +49 (0) 40 8998-1905

E-mail: serguei.molodtsov@xfel.eu

Морозов Вадим Андреевич

Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
Ленинский пр., 47
119991, Москва

Тел.: +7 (499) 465-23-16

Факс: +7 (499) 135-53-28

E-mail: morozov@mail.ioc.ac.ru

Мурин Алексей Валерьевич

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск

E-mail: aleksey.v.murin@gmail.com

Мутас Инна Юрьевна

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск

Тел.: +7(383) 326-96-06

Факс: +7 (83) 330-62-97

E-mail: mutas@catalysis.ru

Наймушина Екатерина Александровна

Удмуртский государственный
университет

ул. Университетская, 1

426034, Ижевск

Тел.: +7 (3412) 43-25-39

E-mail: naimushka@mail.ru

Немцова Ольга Михайловна

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132

426000, Ижевск

Тел.: +7 (3412) 72-87-75

E-mail: nemtsova@fnms.fti.udm.ru

Неудачина Вера Сергеевна

Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова
Ленинские горы, д.1, стр.3
199991, Москва

E-mail: vera_neudachina@mail.ru

Нецкина Ольга Владимировна

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск

Тел.: +7 (383) 330-74-58

Факс: +7 (383) 330-76-91

E-mail: netskina@catalysis.ru

Низовский Александр Иванович

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН

пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск

E-mail: niz@catalysis.ru

Никифоров И.Я.

Донской государственный технический
университет

пл. Гагарина, 1

344010, Ростов-на-Дону

E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru

Николаев Валерий Иванович
ЗАО «Научные приборы»
Рижский пр., 26
198103, Санкт-Петербург
E-mail: nikolaevw@sinstr.ru

Николенко Юрий Михайлович
Институт химии ДВО РАН
пр. 100-летия Владивостока, 159
690022, Владивосток
Тел.: +7 (4232) 31-16-55
Факс: +7 (4232) 31-25-90
E-mail: yury_nikolenko@mail.ru

Новиков Дмитрий Владимирович
Томский государственный университет
пр. Ленина, 36
634050, Томск
E-mail: kas854@mail.ru

Овечкина Наталья Александровна
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-37-37
Факс: +7 (343) 374-52-44
E-mail: ovechkina@ifmlrs.uran.ru

Овчаренко Роман
НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
Тел.: +7 (812) 428-43-94
Факс: +7 (812) 428-70-42
E-mail: shulak@paloma.spbu.ru

Окотруб Александр Владимирович
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-53-52
Факс: +7 (383) 330-94-89
E-mail: spectrum@che.nsk.su

Олексенко Людмила Петровна
Киевский национальный университет
имени Тараса Шевченко
ул. Владимирская, 60
01033, Киев, Украина
Тел.: 8(044)239-33-55
E-mail: olexludmil@ukr.net

Осьмушко Иван Сергеевич
Дальневосточный государственный
университет
ул. Суханова, 8
690600, Владивосток, ГСП
E-mail: vanja@phys.dvgu.ru

Павлычев Андрей Алексеевич
НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
Тел.: +7 (812) 428-43-52
Факс: +7 (812) 428-72-40
E-mail: Andrey.Pavlychev@gmail.com

Панченко Валентина Николаевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-97-40
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: panchenko@catalysis.ru

Пархоменко Ирина Юльевна
Институт геохимии им. А.П. Виноградова
СО РАН
ул. Фаворского, 1а, п/я 701
650033, Иркутск
Тел.: +7 (3952) 42-99-67
Факс: +7 (3952) 42-99-67
E-mail: irapr@iqc.irk.ru

Петров М.В.
Волгоградский государственный
технический университет
пр. Ленина, 28
400131, Волгоград
E-mail: litinski@inbox.ru

Плахутин Борис Николаевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-94-23
E-mail: Plakhutin@catalysis.ru

Пономарёв Александр Геннадьевич
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: agp_mail@mail.ru

Просвирин Игорь Петрович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-97-74
E-mail: prosvirin@catalysis.ru

Радкевич Валентина Зеноновна
Институт физико-органической химии
НАН Беларуси
ул. Сурганова, 13
220072, Минск, Беларусь
E-mail: radkevich_vz@ifoch.bas-net.by

Разинкин Андрей Сергеевич
Институт химии твердого тела УрО РАН
ул. Первомайская, 91
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 362-33-56
E-mail: andrey@razinkin.ru

Raman Sankar
Physical Electronics, Inc.
18725 Lake Drive East,
Chanhassen, MN,
USA, 55317
Phone: 952-828-6478
Fax: 952-828-6478
E-mail: microscop@microscop.ru

Родина Ирина Сергеевна
НОЦ «Наноразмерная структура
вещества»
Южный федеральный университет
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
E-mail: irodina@inbox.ru

Романченко Александр Сергеевич
Институт химии и химической
технологии СО РАН
ул. К. Маркса, 42
660049, Красноярск
Тел.: +7 (391) 249-48-85
E-mail: romaas82@mail.ru

Рузанкин Сергей Филиппович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
E-mail: ruzankin@catalysis.ru

Рыжков Михаил Владимирович
Институт химии твердого тела УрО РАН
ул. Первомайская, 91
620990, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 364-35-54
E-mail: ryz@ihim.uran.ru

Рябова Валентина Игоревна
Удмуртский государственный
университет
ул. Университетская, 1
426034, Ижевск
E-mail: val-tina86@rambler.ru

Сайкова Светлана
Сибирский федеральный университет
пр. Свободный, 79
660041, Красноярск
E-mail: ssai@mail.ru

Сараев Андрей Александрович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
E-mail: asaraev@catalysis.ru

Свинцицкий Дмитрий Антонович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
E-mail: sad@catalysis.ru

Селезнёв Владимир Александрович
Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 13
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 333-06-99
E-mail: seleznev@isp.nsc.ru

Семененко Дмитрий Александрович
Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова
Ленинские горы, д.1, стр.3
199991, Москва
E-mail: semenenko@inorg.chem.msu.ru

Семущкина Галина Игоревна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
E-mail: lala6161@yandex.ru

Сенкевич Анатолий Иосифович
Институт металлофизики
им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
Бульвар Вернадского, 36
03680 ГСП, Киев-142, Украина
E-mail: aisenk@ukr.net

Симакова Ирина Леонидовна
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел. +7(383) 326-95-31
Факс: +7(383) 330-80-56
E-mail: simakova@catalysis.ru

Скориков Николай Александрович
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-35-49
E-mail: skorikov@ifmlrs.uran.ru

Смагунов Николай Владимирович
Институт геохимии им. А.П. Виноградова
СО РАН
ул. Фаворского, 1а, п/я 701
650033, Иркутск
Тел./Факс: +7 (3952) 42-99-67
E-mail: nicksm@igc.irk.ru

Смирнов Михаил Юрьевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-95-27
Факс: +7 (383) 330-80-56
E-mail: smirnov@catalysis.ru

Смоленский Евгений Анатольевич
Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
Ленинский пр., 47
119991, Москва
Тел.: +7 (499) 135-90-89
E-mail: smolensk@sever.ioc.ac.ru

Смоленцев Николай Юрьевич
НОЦ «Наноразмерная структура
вещества»
Южный федеральный университет
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: smolentsev@mail.ru

Солдатов Александр Владимирович
НОЦ «Наноразмерная структура
вещества»
Южный федеральный университет
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: soldatov@sfedu.ru

Сорокин Алексей Михайлович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-95-25
E-mail: sorokin@catalysis.ru

Стадниченко Андрей Иванович
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-95-37
E-mail: stad@catalysis.ru

Стахеев Александр Юрьевич
Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
Ленинский пр., 47
119991, Москва
E-mail: st@ioc.ac.ru

Сурнин Дмитрий Викторович
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-01-63
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: asas@fti.udm.ru

Сухарина Галина Борисовна
НОЦ «Наноразмерная структура
вещества»
Южный федеральный университет
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: sukharina@mail.ru

Сухоруков Виктор Львович
Ростовский государственный
университет путей сообщения
пл. Народного Ополчения, 2
344017, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 291-73-29
E-mail: sukhorukov_v@mail.ru

Сучкова Светлана Алексеевна
НОЦ «Наноразмерная структура
вещества»
Южный федеральный университет
ул. Зорге, 5
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 297-53-26
Факс: +7 (863) 290-10-03
E-mail: suchkova_sv@inbox.ru

Сюгаев Александр Вячеславович
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 21-69-66
E-mail: uds@pti.udm.ru

Татевосян Микаэль Мкртычевич
НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону
E-mail: mmtat@ya.ru

Таусон Владимир Львович
Институт геохимии им. А.П. Виноградова
СО РАН
ул. Фаворского, 1а, п/я 701
650033, Иркутск
Тел./Факс: +7 (3952) 42-99-67
E-mail: vltauson@igc.irk.ru

Теребова Надежда Семеновна
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-25-39
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: xps@fti.udm.ru

Терехов Владимир Андреевич
Воронежский государственный
университет
Университетская пл., 1
394006, Воронеж
Тел.: +7 (4732) 20-83-63
Факс: +7 (4732) 20-83-63
E-mail: fft@phys.vsu.ru

Тетерин Антон Юрьевич
Российский научный центр
«Курчатовский институт»
пл. Академика Курчатова, 1
123182, Москва
Тел.: +7 (499) 196-90-28
E-mail: Antonxray@yandex.ru

Тетерин Юрий Александрович
Российский научный центр
«Курчатовский институт»
пл. Академика Курчатова, 1
123182, Москва
Тел.: +7 (499) 196-92-52
E-mail: teterin@ignph.kiae.ru

Трапезников Виктор Александрович
Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: xps@fti.udm.ru

Тригуб Александр Леонидович
Российский научный центр
«Курчатовский институт»
пл. Академика Курчатова, 1
123182, Москва
E-mail: trigub85@mail.ru

Тринеева Вера Владимировна
Институт прикладной механики УрО РАН
ул. Т. Барамзиной, 34
426067, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 58-80-22
E-mail: vera_kodolova@mail.ru

Троицкий Сергей Юрьевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-97-51
Факс: +7(383) 330-80-56
E-mail: tsy@catalysis.ru

Трубина Светлана Владимировна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-44-47
Факс: +7 (383) 330-94-89
E-mail: svt@niic.nsc.ru

Турищев Сергей Юрьевич
Воронежский государственный
университет
Университетская пл., 1
394006, Воронеж
Тел./Факс: +7 (4732) 20-83-63
E-mail: fft@phys.vsu.ru

Устинов Александр Юрьевич
Институт химии ДВО РАН
пр. 100-летия Владивостока, 159
690022, Владивосток
Тел.: +7 (4232) 75-02-29
Факс: +7 (4232) 31-25-90
E-mail: les@ich.dvo.ru

Федоренко Анастасия Дмитриевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 316-53-41
E-mail: fad007@ya.ru

Федосеева Юлия Владимировна

Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-53-52
Факс: +7 (383) 330-94-89
E-mail: jjulia@ngs.ru

Филатова Елена Олеговна

НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
E-mail: feo@ef14131.spbu.edu

Фомина Лариса Валерьевна

Ангарская государственная техническая
академия
ул. Чайковского, 60
665835, Ангарск
E-mail: flvbaan@mail.ru

Харченко Валерий Иванович

Дальневосточный государственный
технический университет
ул. Пушкинская, 10
690950, Владивосток
Тел.: +7 (4232) 26-51-53
Факс: +7 (4232) 26-51-53
E-mail: vikharchenko@gmail.com

Холзаков Александр Владимирович

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
Тел.: +7 (3412) 43-25-39
Факс: +7 (3412) 72-25-29
E-mail: alkholza@yahoo.com

Чередниченко Александр Иванович

Институт химии ДВО РАН,
пр. 100-летия Владивостока, 159
690022, Владивосток
Тел.: +7 (4232) 72-38-49
Факс: +77 (4232) 26-10-25
E-mail: les@ich.dvo.ru

Чижов Юрий Владимирович

НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
Тел.: +7 (812) 428-45-65, 428-75-00
Факс: +7 (812) 428-72-40
E-mail: chizhov@photonics.phys.spbu.ru

Чолач Александр Романович

Институт катализа им. Г.К. Борескова
СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 5
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 326-95-40
E-mail: cholach@catalysis.ru

Чубаров Виктор Маратович

Институт геохимии им. А.П. Виноградова
СО РАН
ул. Фаворского, 1а, п/я 701
650033, Иркутск
E-mail: master-17@rambler.ru

Чуваenkova Ольга Александровна

Воронежский государственный
университет
Университетская пл., 1
394006, Воронеж
Тел./Факс: +7 (4732) 20-83-63
E-mail: fft@phys.vsu.ru

Чувылкин Николай Дмитриевич

Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
Ленинский пр., 47
119991, Москва
E-mail: smolensk@server.ioc.ac.ru

Шабанова Ирина Николаевна

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: xps@fti.udm.ru

Шаков Анатолий Анатольевич

Физико-технический институт УрО РАН
ул. Кирова, 132
426000, Ижевск
E-mail: toluoil@yahoo.com

Шафоростов Александр Андреевич

Intertech Corporation
Московское представительство:
127015, Москва,
Б. Новодмитровская, 36/4
Офисный центр «Хрустальный»
Тел.: +7 (495) 232-42-25, 783-35-90
(многоканальный)
Факс: +7 (495) 783-35-91
E-mail: info@intertech-corp.ru
8-800-200-4225 (звонок бесплатный по РФ)

Шикин Александр Михайлович
НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
Тел.: +7 (812) 428-43-67
Факс: +7 (812) 428-72-40
E-mail: shikin@paloma.spbu.ru

Шкварин Алексей Сергеевич
Институт физики металлов УрО РАН
ул. Софьи Ковалевской, 18
620041, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 378-38-49
E-mail: shkvarin@ifmlrs.uran.ru

Шкловер Владимир Яковлевич
ООО «Системы для микроскопии и
анализа»
Ленинский пр-т, д.59, стр.2
119333, Москва
Тел./Факс: +7 (495) 933-43-17
E-mail: microscop@microscop.ru

Шуваева Виктория Анатольевна
НИИ Физики Южного федерального
университета
пр. Стачки, 194
344090, Ростов-на-Дону
Тел.: +7 (863) 222-37-58
Факс: +7 (853) 243-40-44
E-mail: y_shuvaeva@mail.ru

Шулаков Александр Сергеевич
НИИ физики им. В.А. Фока
Санкт-Петербургский государственный
университет
ул. Ульяновская, 1
198504, Санкт-Петербург,
Старый Петергоф
Тел.: +7 (812) 428-43-94
Факс: +7 (812) 428-70-42
E-mail: shulak@paloma.spbu.ru

Щукарёв Андрей Васильевич
Umeå University
901 87 Umeå, Sweden
E-mail: andrei.shchukarev@chem.umu.se

Эренбург Симон Борисович
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
пр. Академика Лаврентьева, 3
630090, Новосибирск
Тел.: +7 (383) 330-44-47
Факс: +7(383) 330-94-89
E-mail: simon@niic.nsc.ru

Юрьев Анатолий Аркадьевич
Институт металлургии УрО РАН
ул. Амундсена, 101
620016, Екатеринбург
Тел.: +7 (343) 232-90-78
Факс: +7 (343) 267-91-86
E-mail: yurev_anatolii@mail.ru

Яржемский Виктор Георгиевич
Институт общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова РАН
Ленинский просп., 31
117907, Москва
Тел.: +7 (495) 955 4820
Факс: +7 (495) 954-12-79
E-mail: vgyar@igis.ras.ru

Яшина Лада Валерьевна
Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова
Ленинские горы, д.1, стр.3
199991, Москва
E-mail: yashina@inorg.chem.msu.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ	5
ПЛ-1 Кочур А.Г. КАСКАДНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЭЛЕКТРОННЫХ И ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРАХ	7
ПЛ-2 Солдатов А.В. РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ КАК МЕТОД АНАЛИЗА НАНОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА	8
ПЛ-3 Ельцов К.Н. СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ	9
ПЛ-4 Чижов Ю.В. ФОТОЭМИССИЯ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ	10
ПЛ-5 Молодцов С.Л. ВОЗМОЖНОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ: ОТ СИНХРОТРОНОВ К ЛАЗЕРАМ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ	11
ПЛ-6 Кузнецов М.В. ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ	12
ПЛ-7 Шикин А.М. ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2D, 1D и 0D НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ	13
ПЛ-8 Михлин Ю.Л. ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПОВЕРХНОСТИ МИНЕРАЛОВ	14
ПЛ-9 Стахеев А.Ю. РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ НАНЕСЕННЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ОКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ	15
КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ	17
КД-1 <u>Vyalikh D.V.</u>, Danzenbächer S., Kucherenko Yu., Laubschat C., Krellner C., Geibel C., Molodtsov S.L. ELECTRON <i>f-d</i> HYBRIDIZATION AND FINE STRUCTURE OF « <i>f</i> -BANDS» IN Yb-BASED HEAVY-FERMION MATERIALS	19
КД-2 <u>Вовна В.И.</u>, <u>Осьмушко И.С.</u>, <u>Короченцев В.В.</u> СТРУКТУРА ПОЛИВИНИЛСИЛОКСАНА С ПРИСОЕДИНЕННЫМ ХЕЛАТНЫМ КОМПЛЕКСОМ ХРОМА ПО ДАННЫМ РФЭС	20
КД-3 <u>Домашевская Э.П.</u>, <u>Казаков А.Т.</u>, <u>Рябцев С.В.</u>, <u>Сидашов А.В.</u>, <u>Терехов В.А.</u> XPS ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ОКИСЛЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК Ni/Si	21
КД-4 Курмаев Э.З. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА FeAs-СВЕРХПРОВОДНИКОВ	22

КД-5 Мазалов Л.Н. РЕНТГЕНОВСКАЯ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ.....	23
КД-6 Сухоруков В.Л., Петров И.Д., Хотоп Х. ДИНАМИКА ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ МЕЖДУ ПЕРВЫМ И ВТОРЫМ ПОРОГОМ ИОНИЗАЦИИ	24
КД-7 Тетерин Ю.А., Рыжков М.В., Терехов В.А., Маслаков К.И., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е. РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ОСОБЕННОСТИ ПРИРОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В СОЕДИНЕНИЯХ ТОРИЯ	25
КД-8 Щукарёв А.В. БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	26
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ	27
СЕКЦИЯ 1 НОВЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В ОПИСАНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ. НОВЫЕ РАЗРАБОТКИ ЛАБОРАТОРНЫХ ПРИБОРОВ	27
УД-1-1 Raman S., Paul D., Hammond J., Betz W. CHEMICAL STATE IMAGING OF NANOCONES USING AUGER ELECTRON SPECTROSCOPY	29
УД-1-2 Булушева Л.Г., Окотруб А.В. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ФТОРУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ	30
УД-1-3 Мурин А.В., Шабанова И.Н., Холзаков А.В. ИЗУЧЕНИЕ КЛАСТЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ЖИДКИХ d-МЕТАЛЛОВ	31
УД-1-4 Немцова О.М., Канунникова О.М. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОМ АНАЛИЗЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ КВАРЦА	32
УД-1-5 Панченко В.Н., Захаров В.А., Brintzinger H.H. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ В НАНЕСЕННЫХ ЦИРКОНОЦЕНОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИЕЙ.....	33
УД-1-6 Плахутин Б.Н. ТЕОРЕМА КУПМАНСА ДЛЯ СИСТЕМ С ОТКРЫТЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ОБОЛОЧКАМИ.....	34
УД-1-7 Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Тетерин А.Ю. РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В ДИОКСИДЕ ТОРИЯ	35
УД-1-8 Таусон В.Л. МЕТОДЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ В ГЕНЕТИЧЕСКОЙ МИНЕРАЛОГИИ И ГЕОХИМИИ	36
УД-1-9 Трапезников В.А. ИЗМЕНЕНИЕ ПЛОТНОСТИ НЕЙТРИННОГО ПУЧКА ПРИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ НЕЙТРИНО НА ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ.....	37

УД-1-10 Филатова Е.О.
РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ КАК НЕРАЗРУШАЮЩИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ
СКРЫТЫХ МЕЖФАЗОВЫХ ГРАНИЦ 38

УД-1-11 Рузанкин С.Ф., Зильберберг И.Л.
АНАЛИЗ ПРЕДКРАЕВЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
КИСЛОРОДА В ОКСИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
DFT МЕТОДА И БАЗИСА ПАРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ 39

СЕКЦИЯ 2
ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ
ОЖЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ. ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ..... 41

УД-2-1 Гончаров О.Ю., Каннуникова О.М.
МЕТОДОЛОГИЯ АНАЛИЗА СОСТАВА И СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ
СИСТЕМ: ТЕРМОДИНАМИКА И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ..... 43

УД-2-2 Кодолов В.И., Шабанова И.Н., Благодатских И.И., Тринеева В.В.,
Теребова Н.С., Ляхович А.М.
РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ И МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ В НАНОРЕАКТОРАХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦ..... 44

УД-2-3 Теребова Н.С., Шабанова И.Н., Кодолов В.И.
РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ SP ЭЛЕМЕНТОВ II И III ПЕРИОДОВ
НА АКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР 45

УД-2-4 Чолач А.Р., Булгаков Н.Н., Тапилин В.М.
ИДЕНТИФИКАЦИЯ АДсорбированных состояний МЕТОДОМ
СПЕКТРОСКОПИИ ПОТЕНЦИАЛОВ ИСЧЕЗНОВЕНИЯ 46

СЕКЦИЯ 3
РЕНТГЕНОВСКАЯ ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ.
EXAFS И NEXAFS (XANES) 47

УД-3-1 Бабанов Ю.А., Саламатов Ю.А., Мухамеджанов Э.Х., Устинов В.В.
ДИАГНОСТИКА ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЕВ И ИНТЕРФЕЙСОВ
В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ: EXAFS СПЕКТРОСКОПИЯ С УГЛОВЫМ
РАЗРЕШЕНИЕМ 49

УД-3-2 Галахов В.Р., Шкварин А.С., Семенова А.С., Уймин Н.А., Ермаков А.Е.,
Курмаев Э.З.
АТТЕСТАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ 3d-ЭЛЕМЕНТОВ, КАПСУЛИРОВАННЫХ В
УГЛЕРОДНУЮ ОБОЛОЧКУ, МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 50

УД-3-3 Кочубей Д.И., Кочубей В.И., Бабенко В.П., Зайковский В.И.
СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ ПО ДАННЫМ EXAFS ДВУМЕРНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ
СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ХАЛЬКОГЕНАМИ 51

УД-3-4 Манукян А.С., Мирзаханян А.А., Шароян Э.Г., Гуда А.А., Солдатов А.В.,
Храпко В.В., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБРАЗЦОВ
ФТАЛОЦИАНИНА НИКЕЛЯ ДОПИРОВАННЫХ ЩЕЛОЧНЫМИ МЕТАЛЛАМИ
МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 52

УД-3-5 <u>Эренбург С.Б.</u>, Трубина С.В., Коваленко Е.А., Герасько О.А., Никитенко С.Г. МИКРОСТРУКТУРА «КАЛИБРОВАННЫХ» НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА ВНУТРИ ПОЛОСТЕЙ КУКУРБИТ[7]УРИЛА ПО Au EXAFS СПЕКТРАМ	53
УД-3-6 <u>Таранухина А.И.</u>, Новакович А.А., <u>Ведринский Р.В.</u> МНОГОКАНАЛЬНАЯ ВЕРСИЯ МЕТОДА ПОЛНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ: РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ.....	54
УД-3-7 <u>Турищев С.Ю.</u>, Терехов В.А., Кашкаров В.М., Леньшин А.С., Панков К.Н., Ховив Д.А., Паринова Е.В., Домашевская Э.П., Скрышевский В.А., Гаврильченко И.В. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ НАНОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ УЛЬТРАМЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.....	55
УД-3-8 <u>Терехов В.А.</u>, <u>Турищев С.Ю.</u>, Домашевская Э.П. ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАМЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ СТРУКТУРАМИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИЯХ XANES.....	56
УД-3-9 <u>Шкварин А.С.</u>, Ярмошенко Ю.М., Скориков Н.А., Меренцов А.И., Титов А.Н. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ $Cr_xTi_{1-x}Se_2$ МЕТОДАМИ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИИ И АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	57
 СЕКЦИЯ 4 ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ, КАТАЛИЗАТОРОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ	
УД-4-1 <u>Андрюшечкин Б.В.</u>, Черкез В.В., Киррен Б., Дидье К., Мальте Д., Ельцов К.Н. СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМНЫХ СТРУКТУР, СФОРМИРОВАННЫХ ХЛОРОМ НА ПОВЕРХНОСТИ Au(111)	61
УД-4-2 <u>Боронин А.И.</u> ФОТОЭМИССИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ.....	62
УД-4-3 <u>Валеев Р.Г.</u>, Бельтюков А.Н., Романов Э.А., Деев А.Н., Кривенцов В.В. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ТОНКИХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК ZnS МЕТОДОМ EXAFS-СПЕКТРОСКОПИИ	63
УД-4-4 <u>Каичев В.В.</u>, Просвирин И.П., Бухтияров В.И. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ IN SITU ИССЛЕДОВАНИЙ МЕХАНИЗМОВ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ.....	64
УД-4-5 <u>Калинкин А.В.</u>, Смирнов М.Ю., Низовский А.И., Бельская О.Б., Пашис А.В., Сорокин А.М., Просвирин И.П., Бухтияров В.И. НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ МЕТОДОМ РФЭС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОНОХРОМАТИЗИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ Ag L α	65
УД-4-6 <u>Кеслер В.Г.</u> ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АНОДНОГО ОКИСЛЕНИЯ InAs В ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА РФЭС IN-SITU	66
УД-4-7 <u>Просвирин И.П.</u>, Бекк И.Э., Бухтияров В.И. ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ ПОЛНОГО ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНА НА АЛЮМОПЛАТИНОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДАМИ IN SITU РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ	67

УД-4-8 Разинкин А.С., Кузнецов М.В. ОКСИДНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ НИОБИЯ (110): РФЭС-, РФД- И СТМ-ИССЛЕДОВАНИЕ	68
УД-4-9 Смирнов М.Ю., Вовк Е.И., Калинин А.В., Пашис А.В., Бухтияров В.И. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ОКИСЛЕНИЯ ЧАСТИЦ БЛАГОРОДНОГО МЕТАЛЛА, НАПЫЛЕННЫХ НА ПОВЕРХНОСТЬ ОКСИДНОГО НОСИТЕЛЯ, В РЕАКЦИИ С NO _x	69
УД-4-10 Сорокин А.М., Демидов Д.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И. СТМ/РФЭС/ОЭС-ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИГОТОВЛЕНИЯ ОБРАЗЦОВ МОДЕЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ Ag-Cu/ВОПГ	70
УД-4-11 Стадниченко А.И., Кибис Л.С., Боронин А.И. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ОКИСЛЕННЫХ ЗОЛОТЫХ КЛАСТЕРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ ПОМОЩИ ВЧ-РАЗРЯДА В АТМОСФЕРЕ КИСЛОРОДА.....	71
УД-4-12 Устинов А.Ю., Руднев В.С., Тырина Л.М., Лукиянчук И.В., Васильева М.С. РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ И АЛЮМИНИИ	72
 СЕКЦИЯ 5 ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ	
 УД-5-1 Асанов И.П., Окотруб А.В., Юданов Н.Ф., Булушева Л.Г., Гусельников А.В., Бабин К.С. ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКИХ УГЛЕРОДНЫХ СЛОЕВ, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ ФТОРИДА ГРАФИТА	75
УД-5-2 Карбовский В.Л., Шпак А.П., Курган Н.А. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ АПАТИТОВ	76
УД-5-3 Козинкин А.В. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА С ПОЛИМЕРНЫМИ МАТРИЦАМИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ КОНЦЕНТРАЦИИ.....	77
УД-5-4 Окотруб А.В., Булушева Л.Г., Асанов И.П. ЭЛЕКТРОННОЕ СОСТОЯНИЕ АТОМОВ АЗОТА В АЗОТСОДЕРЖАЩИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ	78
УД-5-5 Теребова Н.С., Шабанова И.Н. ЗАКОНОМЕРНОСТИ РОСТА НАНОФОРМ В НАНОРЕАКТОРАХ.....	79
УД-5-6 Низовский А.И., Калинин А.В., Шахтшнейдер Т.П., Дьяконова М.А., Болдырева Е.В., Kumar Rakesh ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС МЕХАНОХИМИЧЕСКИ ИММОБИЛИЗОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ.....	90

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	81
Секция 1. Новые теоретические подходы в описании электронной структуры. Новые разработки лабораторных приборов	81
СД-1-1 <u>Безносюк С.А.</u>, Жуковский М.С., Беляева Н.А., Фомина Л.В. РАСЧЁТ ЭНЕРГИИ АКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАРГАНЦА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ НАНОДИНАМИКИ	83
СД-1-2 <u>Блошкин А.А.</u>, Якимов А.И., Двуреченский А.В. ДЫРОЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВОЙНЫХ ВЕРТИКАЛЬНО-СОПРЯЖЕННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ Ge/Si II-ro ТИПА	84
СД-1-3 <u>Веригин А.А.</u>, Наумик А.И. ВОЗМОЖНОСТИ ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОГО РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА В ИССЛЕДОВАНИИ СОСТАВА КРИСТАЛЛОВ GaAs, ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНАМИ Te и S И ОБЛУЧЕННЫХ СИЛЬНОТОЧНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ.....	85
СД-1-4 <u>Гай Д.Е.</u> ПРОЦЕССЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ ВНУТРЕННИХ УРОВНЕЙ АТОМА ВЕЩЕСТВА ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ФОРМИРОВАНИИ ПРОТЯЖЕННЫХ ТОНКИХ СТРУКТУР СПЕКТРОВ ЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ 3d-МЕТАЛЛОВ И ИХ ОКСИДОВ	86
СД-1-5 <u>Демехин Ф.В.</u>, Петров И.Д., Демехина Л.А., Шморанцер Х., Эресманн А., <u>Сухоруков В.Л.</u> ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В УГЛОВОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ И ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ	87
СД-1-6 <u>Дубинин Н.Э.</u>, <u>Юрьев А.А.</u> ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И ТЕРМОДИНАМИКИ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМОЙ В КАЧЕСТВЕ СИСТЕМЫ СРАВНЕНИЯ	88
СД-1-7 <u>Евсюкова М.А.</u>, Кравцова А.Н., Щербаков И.Н., Туполова Ю.П., <u>Зубавичус Я.В.</u>, <u>Солдатов А.В.</u> АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЦИНКОВОГО КОМПЛЕКСА $C_{24}H_{24}ZnN_{10}O_2$: АНАЛИЗ НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ	89
СД-1-8 <u>Зарубин И.А.</u>, Власенко В.Г., Шуваев А.Т.† РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФЕРРОЦИАНИДОВ	90
СД-1-9 <u>Исупов Н.Ю.</u> СИСТЕМА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕГИСТРАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ НА ОСНОВЕ ПЗС МАТРИЦЫ ДЛЯ МАГНИТНОГО ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА	91
СД-1-10 <u>Кожевников В.И.</u>, Мерзляков П.Г., Трапезников В.А. МОДЕРНИЗАЦИЯ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ ЭС-2401 И ЭС-3201 ДЛЯ РЕШЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ	92
СД-1-11 <u>Козаков А.Т.</u>, Гуглев К.А., Илясов В.В., Ершов И.В., Никольский А.В., <u>Смотраков В.Г.</u>, <u>Еремкин В.В.</u> ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФЕРРИТА ВИСМУТА.....	93

СД-1-12 <u>Кукчева В.В.</u> , Фесак А.Ю. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В АРИЛВИНИЛОВЫХ ЭФИРАХ.....	94
СД-1-13 <u>Николаев В.И.</u> , Бахвалов А.С., Чижова Е.В. РЕНТГЕНОВСКИЙ МИКРОЗОНД-МИКРОСКОП РАМ-30 μ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ	95
СД-1-14 Новиков А.В., Бреславская Н.Н., Москвин А.В., <u>Плахутин Б.Н.</u> АКТИВНОЕ ПРОСТРАНСТВО ДЛЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ИОНИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ, ОПРЕДЕЛЯЕМОЕ ТЕОРЕМОЙ КУПМАНСА	96
СД-1-15 <u>Овечкина Н.А.</u> , Шкварин А.С., Галахов В.Р., Семенова А.С., Taubitz С., Cioroianu A.R., Neumann M., Козлов Е.А. СОСТОЯНИЯ ОКИСЛЕНИЯ ИОНОВ МЕДИ В НАНОСТРУКТУРНОМ CuO, ПОЛУЧЕННОМ УДАРНО-ВОЛНОВЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ.....	97
СД-1-16 <u>Скориков Н.А.</u> , McLeod J.A., Финкельштейн Л.Д., Курмаев Э.З., Mowes A. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ОКСИДОВ И ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ С ЗАПОЛНЕННОЙ d-ОБОЛОЧКОЙ.....	98
СД-1-17 <u>Смоленский Е.А.</u> , Рыжов А.Н., Чуваева И.В., Чувылкин Н.Д., Лapidус А.Л. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ МУЛЬТИПЛЕТОВ В ТЕОРИИ ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗА	99
СД-1-18 <u>Сухарина Г.Б.</u> , Кравцова А.Н., Солдатов А.В., Зубавичус Я.В., Мазалов Л.Н., Крючкова Н.А. ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НЕКОТОРЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ, КОБАЛЬТА И МАРГАНЦА	100
СД-1-19 <u>Сухоруков В.Л.</u> , Петров И.Д., Лагутин Б.М., Демёхин Ф.В., Демёхина Л.А., Шморанцер Х., Эресманн А. ФОТОИОНИЗАЦИЯ Хе В ОБЛАСТИ 5s ПОРОГА	101
СД-1-20 Финкельштейн Л.Д., McLeod J.A., <u>Скориков Н.А.</u> , Курмаев Э.З., Mowes A. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И ГИБРИДИЗАЦИЯ В 5p-ОКСИДАХ	102
СД-1-21 Шаков А.А. РАЗЛОЖЕНИЕ СЛОЖНЫХ РЕНТГЕНОФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ.....	103
СД-1-22 <u>Яржемский В.Г.</u> , Амусья М.Я., Авальди Л., Болоньези П. СЕЧЕНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ САТЕЛЛИТОВ ВБЛИЗИ ПОРОГА.....	104
СД-1-23 Яржемский В.Г. ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОРБИТАЛЕЙ НАНОЧАСТИЦ.....	105
Секция 2. Фотоэлектронная спектроскопия и электронная оже-спектроскопия. Фотоэлектронная дифракция	107
СД-2-1 Борисенко Е.С., Кривосенко Ю.С., Мистров Д.А., <u>Павлычев А.А.</u> ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ ФОТОИОНИЗАЦИИ ИХ ВНУТРЕННИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК.....	109

СД-2-2 Брыкалова К.О., Виноградов А.С., Павлычев А.А. РЕЗОНАНСЫ В СПЕКТРАХ НЕПРЕРЫВНОГО ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ ВНУТРЕННИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ И 1D СТРУКТУР ВНЕДРЕННЫХ В УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ.....	110
СД-2-3 Гильмутдинов Ф.З., Никонова Р.М., Михайлова С.С., Ладьянов В.И. ОБРАТИМЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫХ C1s - СПЕКТРАХ ФУЛЛЕРИТОВ C ₆₀ , C ₇₀ И ИХ СМЕСИ ПРИ ИХ НАГРЕВЕ И ПОСЛЕДУЮЩЕМ ОХЛАЖДЕНИИ	111
СД-2-4 Голуб А.Я., Неудачина Л.К., Кузнецов М.В., Ятлук Ю.Г. РФЭС-ИССЛЕДОВАНИЕ ТИОМОЧЕВИННЫХ КОМПЛЕКСОВ Pt НА ПОВЕРХНОСТИ ТИОКАРБОМОИЛПОЛИСИЛОКСАНА.....	112
СД-2-5 Горбунов В.А. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРОВ АЛЮМИНИЯ, СОДЕРЖАЩИХ ПРИМЕСНЫЕ АТОМЫ 3d- МЕТАЛЛОВ ПОДГРУППЫ ЖЕЛЕЗА.....	113
СД-2-6 Иванова Т.М., Кочур А.В., Щукарев А.В., Линко Р.В., Кискин М.А., Сидоров А.А., Новоторцев В.М., Еременко И.Л. РЕНТГЕНОФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ 3d-МЕТАЛЛОВ	114
СД-2-7 Илясов В.В., Ершов И.В., Ляхов Н.З., Григорьева Т.Ф., Козаков А.Т., Гуглев К.А. ЭВОЛЮЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И XPS СПЕКТРОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ Fe-Bi-КОМПОЗИТАХ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ.....	115
СД-2-8 Канунникова О.М., Шаков А.А., Карбань О.В., Сурнин Д.В. РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫЙ АНАЛИЗ АТОМНОГО СТРОЕНИЯ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИЛИКАТНЫХ ПЛЕНОК.....	116
СД-2-9 Карбань О.В., Саламатов Е.И., Хазанов Е.Н., Канунникова О.М., Хасанов О.Л. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА ИНТЕРФЕЙСНЫХ ОБЛАСТЕЙ ОКСИДНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ КЕРАМИК МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ И ФОНОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	117
СД-2-10 Коротаев Е.В., Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Крючкова Н.А., Диков Ю.П., Соколов В.В., Филатова И.Ю. РЕНТГЕНОВСКИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛИ- И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ	118
СД-2-11 Крючкова Н.А., Мазалов Л.Н., Коротаев Е.В., Федоренко А.Д., Торгов В.Г., Костин Г.А., Кальченко В.И. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТИАКАЛИКС[n]АРЕНОВ МЕТОДАМИ РФЭС, РЭС И КВАНТОВОЙ ХИМИИ.....	119
СД-2-12 Лагутин Б.М., Петров И.Д., Демёхин Ф.В., Демёхина Л.А., Сухоруков В.Л., Шморанцер Х. РЕЗОНАНСНЫЙ ОЖЕ-ЭФФЕКТ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ, ИССЛЕДОВАННЫЙ В РАМАНОВСКОМ РЕЖИМЕ.....	120
СД-2-13 Ляхович А.М. РФЭС – ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕВРАЩЕНИЙ, ПРОИСХОДЯЩИХ ПРИ ИММОБИЛИЗАЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ Pd В ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦАХ.....	121

СД-2-14 Михлин Ю.Л., Романченко А.С., Сапожникова Ю.П. РФЭС И АСМ ИЗУЧЕНИЕ ОТОЛИТОВ РЫБ ОЗЕРА БАЙКАЛ.....	122
СД-2-15 Морозов В.А., Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А. ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИЯ КАК СЛЕДСТВИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО РАСПАДА РАЗЛИЧНЫХ ИЗОМЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛЫ.....	123
СД-2-16 Наймушина Е.А., Кожевникова О.В., Шабанова И.Н., Барсуков А.К. РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ КОНЬЮГАТОВ АЛЬБУМИНА ЧЕЛОВЕКА.....	124
СД-2-17 Останина Т.И., Маратканова А.Н., Канунникова О.М. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ И ИК - СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРЕДМЕТОВ АРХЕОЛОГИЧЕСКОГО КЛАДА ЮВЕЛИРА КУЗЕБАЕВСКОГО ГОРОДИЩА.....	125
СД-2-18 Смагунов Н.В., Таусон В.Л. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РФЭС ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФОРМ НАХОЖДЕНИЯ ЗОЛОТА В МИНЕРАЛАХ.....	126
СД-2-19 Сурнин Д.В., Бакиева О.Р., Гай Д.Е. ПРОТЯЖЕННЫЕ ТОНКИЕ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ И СПЕКТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ОКСИДОВ 3d-МЕТАЛЛОВ	127
СД-2-20 Сюгаев А.В., Канунникова О.М., Агафонов А.Н., Лялина Н.В., Решетников С.М. РФЭС-ИССЛЕДОВАНИЯ ПАССИВНЫХ ПЛЕНОК НА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ Fe И КАРБИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.....	128
СД-2-21 Тетерин А.Ю., Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Курмаев Э.З., Маслаков К.И., Иванов К.Е., Федоренко В.В., Елохина Л.В. СТРУКТУРА РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫХ, РЕНТГЕНОВСКИХ O(F)K α -ЭМИССИОННЫХ И OKLL ОЖЕ-СПЕКТРОВ ThF ₄ и ThO ₂	129
СД-2-22 Тетерин А.Ю., Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Маслаков К.И., Райх Т., Молодцов С.Л. СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ЭМИССИИ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ UO ₂ , UO _{2+x} И U ₃ O ₈ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ СИ ВБЛИЗИ O _{4,5} (U)-ПОРОГА ПОГЛОЩЕНИЯ	130
СД-2-23 Тетерин А.Ю., Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Маслаков К.И., Райх Т., Молодцов С.Л. СТРУКТУРА РЕНТГЕНОВСКОГО СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВБЛИЗИ O _{4,5} (Th)-ПОРОГА И РЕЗОНАНСНОЙ ЭМИССИИ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ThO ₂	131
СД-2-24 Тихонов С.А., Вовна В.И., Львов И.Б. ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НЕКОТОРЫХ β -ДИКЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА	132
Секция 3. Рентгеновская эмиссионная спектроскопия. EXAFS и NEXAFS (XANES).....	133
СД-3-1 Авакян Л.А., Храпко В.В., Срабионян В.В., Жучков Д.В., Бугаев Л.А. К-СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ АЛЮМИНИЯ И КРЕМНИЯ В РЯДЕ ЦЕОЛИТОВ И МИНЕРАЛОВ. АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ ИСКАЖЕНИЙ.....	135

СД-3-2 <u>Альперович И.Г.</u>, Пушкарь Ю.Н., Душе М., Солдатов А.В. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ЗА $L_{2,3}$ КРАЕМ РУТЕНИЯ.....	136
СД-3-3 <u>Бакиева О.Р.</u>, Сурнин Д.В., Гай Д.Е. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ 3d-МЕТАЛЛ–КИСЛОРОД ПО ДАННЫМ EELFS СПЕКТРОСКОПИИ.....	137
СД-3-4 <u>Бельская Л.В.</u>, Голованова О.А. ПРИМЕНЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ БИОГЕННЫХ И АБИОГЕННЫХ АПАТИТОВ	138
СД-3-5 <u>Власенко В.Г.</u>, Зубавичус Я.В., Бурлов А.С., Ураев А.И., Машенко С.А., Гарновский Д.А., Васильченко И.С., Тригуб А.А., Гарновский А.Д. ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО АТОМНОГО ОКРУЖЕНИЯ Cu, Ni, Co и Zn В МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСАХ ПИРАЗОЛЬНЫХ АЗОМЕТИНОВ МЕТОДОМ XAFS.....	139
СД-3-6 <u>Гуда А.А.</u>, Солдатов А.В., Солдатов М.А., Мазалова В.Л. МАГНИТНЫЕ И НЕМАГНИТНЫЕ ПРИМЕСИ ДЛЯ РМП НА ОСНОВЕ ZnO.....	140
СД-3-7 <u>Даниленко Т.Н.</u>, Новакович А.А., <u>Ведринский Р.В.</u> РАСЧЕТЫ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЭМИССИИ АТОМОВ Si И O В КРИСТАЛЛЕ КВАРЦА И К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ АТОМОВ Al В МЕТАЛЛЕ И В КОРУНДЕ	141
СД-3-8 <u>Жерикова К.В.</u>, Морозова Н.Б., Гельфонд Н.В., Максимовский Е.А., Доровских С.И., Якимчук Е.П., Новгородов Б.Н., <u>Кривенцов В.В.</u>, Просвирин И.П. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТОЯНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ И БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ТОНКИХ МОСVD ПЛЕНКАХ.....	142
СД-3-9 <u>Каныгин М.А.</u>, Окотруб А.В., Куреня А.Г., Гусельников А.В. УГЛОВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВЫХОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПЛЕНОК ОРИЕНТИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ	143
СД-3-10 <u>Козинкин Ю.А.</u>, Новакович А.А., Ведринский Р.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТЫ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ХРОМА И КОБАЛЬТА.....	144
СД-3-11 <u>Коротаев Е.В.</u>, Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Крючкова Н.А., Диков Ю.П., Соколов В.В., Филатова И.Ю., Пичугин А.Ю. РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИХ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ	145
СД-3-12 <u>Кривенцов В.В.</u>, Бекк И.Э., Иванов Д.П., Якимчук Е.П., Новгородов Б.Н., Зайковский В.И., Просвирин И.П., Бухтияров В.И. ИЗУЧЕНИЕ СТАБИЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ И ПАЛЛАДИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРИРОДЫ НОСИТЕЛЯ.....	146
СД-3-13 <u>Кривенцов В.В.</u>, Якимчук Е.П., Новгородов Б.Н., Кочубей Д.И., Бекк И.Э., Симакова И.Л., Максимовский Е.А., Нечепуренко С.Ф., Чистяков А.В., Жмакин В.В., Цодиков М.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ И СОСТОЯНИЯ Pd В МОДЕЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ ПО ДАННЫМ XAFS.....	147
СД-3-14 <u>Кривулько К.Ф.</u>, Клищенко А.П. РАСЧЁТ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ АССОЦИАТОВ 5,10,15,20- ТЕТРАМЕТАГИДРОКСИФЕНИЛХЛОРИНА В ВОДНО-ЭТАНОЛОВОЙ СМЕСИ	148

СД-3-15 <u>Месилов В.В.</u>, Галахов В.Р., Гижевский Б.А., Овечкина Н.А., Семенова А.С., Келлерман Д.Г., Neumann M. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОБАЛЬТИТА LiCoO_2	149
СД-3-16 <u>Месилов В.В.</u>, Галахов В.Р., Семенова А.С., Келлерман Д.Г., Елохина Л.В. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ И ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ЛИТИЙ-НАТРИЕВОГО КОБАЛЬТИТА $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$	150
СД-3-17 Назаренко Е.С., Новиковский Н.М., Новакович А.А., <u>Ведринский Р.В.</u> МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ОКОЛОПОРОГОВОЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ В К-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ АТОМОВ МЕТАЛЛОВ И КИСЛОРОДА В КРИСТАЛЛАХ ТИТАНАТОВ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА.....	151
СД-3-18 <u>Нецкина О.В.</u>, Кочубей Д.И., Симагина В.И., Комова О.В., Ищенко А.В. СМЕШАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ РОДИЯ В Rh/TiO_2 КАТАЛИЗАТОРАХ ПО ДАННЫМ EXAFS И XANES СПЕКТРОСКОПИИ	152
СД-3-19 <u>Радкевич В.З.</u>, Вильсон К., Хаминец С.Г., Сенько Т.Л., Егиазаров Ю.Г. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ КАТАЛИЗАТОРОВ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕНИЯ СО	153
СД-3-20 <u>Родина И.С.</u>, Кравцова А.Н., Солдатов А.В., Берри А. Дж. АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ К – КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТИТАНА В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ ГРУППЫ ШПИНЕЛИ	152
СД-3-21 <u>Семущкина Г.И.</u>, Гуляев Р.В., Крючкова Н.А., Мазалов Л.Н., Басова Т.В., Пляшкевич В.А., Боронин А.И. РЕТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.....	155
СД-3-22 <u>Сучкова С.А.</u>, Солдатов А.В., Смоленцев Г.Ю., Dau H., Zaharieva I. МАРГАНЦЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ КАК МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ (ФОТОСИСТЕМА II): ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ XANES, РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ XES И ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ.....	156
СД-3-23 <u>Тригуб А.Л.</u>, Аль Ансари Я.Ф., Велигжанин А.А., Зубавичус Я.В., Чернышов А.А. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРФИРИНАТОВ ПЕРЕХОДНЫХ 3d-МЕТАЛЛОВ МЕТОДАМИ XAFS-СПЕКТРОСКОПИИ.....	157
СД-3-24 <u>Трубина С.В.</u>, Эренбург С.Б., Журавлев К.С., Свешникова Л.Л., Никитенко С.Г. EXAFS ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРОВ CdS И Cu_xS , СФОРМИРОВАННЫХ В МАТРИЦЕ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-БЛОДЖЕТТ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ.....	158
СД-3-25 Тупицын И.И., <u>Овчаренко Р.Е.</u>, Шулаков А.С. РАСЧЕТ ФОРМЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ ПОЛОС МАГНИЯ И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ.....	159
СД-3-26 <u>Чередниченко А.И.</u>, Карасев В.Е., Карасева Э.Т., Полищук А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕТРАХЛОРОАУРАТА ЦИПРОФЛОКСАЦИНИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	160

СД-3-27 Чередниченко А.И., Сушков Ю.В., Харченко В.И. ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И СОСТАВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ РФЭС И СПЕКТРОСКОПИИ ХПЭЭ	161
СД-3-28 Чубаров В.М., Финкельштейн А.Л. РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ FeO и MnO ₂ В ЖЕЛЕЗОМАНГАНЦЕВЫХ КОНКРЕЦИЯХ	162
СД-3-29 Шкварин А.С., Ярмошенко Ю.М., Титов А.А., Титов А.Н., Скориков Н.А. РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОЭМИССИЯ И АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ Cu _x TiSe ₂	163
СД-3-30 Шулаков А.С. РЕНТГЕНОВСКАЯ ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ С РАЗРЕШЕНИЕМ ПО ГЛУБИНЕ: ПРИМЕНЕНИЕ К ИССЛЕДОВАНИЮ НАНОСЛОЕВ.....	164
СД-3-31 Юматов В.Д., Давыдова Н.В. ИССЛЕДОВАНИЕ π-СОПРЯЖЕНИЯ В ЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛАХ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	165
Секция 4. Применение фотоэлектронной спектроскопии для исследования поверхности, катализаторов и полупроводников	167
СД-4-1 Бувайло А.И., Олексенко Л.П., Максимович Н.П., Матушко И.П. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СЕНСОРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ SnO ₂ МЕТОДОМ РФЭС	169
СД-4-2 Володин А.М., Кривенцов В.В., Медведев Д.А., Якимчук Е.П., Новгородов Б.Н. ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЯ Pd В НИЗКОПРОЦЕНТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ Pd/Al ₂ O ₃ ПО ДАННЫМ XAFS И ЭПР	170
СД-4-3 Волыхов А.А., Яшина Л.В., Васильев С.Ю., Чайка А.Н., Божко С.И. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МОНОТЕЛЛУРИДА ГАЛЛИЯ (1 0 -2).....	171
СД-4-4 Герасимов И.Н., Акимов В.В., Михлин Ю.Л., Феоктистова Л.П. СТРОЕНИЕ, СТРУКТУРА И ОКИСЛЕНИЕ ПЛЁНОК МЕТАЛЛОВ, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ МИШЕНЕЙ ЧИСТЫХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ.....	172
СД-4-5 Гуляев Р.В., Стадниченко А.И., Кощеев С.В., Боронин А.И. ЭФФЕКТЫ ПОДЗАРЯДКИ ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МЕТОДОМ ФЭС С ПРИМЕНЕНИЕМ СИ	173
СД-4-6 Данилова И.Г., Бекк И.Э., Худорожков А.К., Зубавичус Я.В., Велигжанин А.А., Зайковский В.И., Бухтияров В.И. ПРИМЕНЕНИЕ ЭСДО ДЛЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ PdO НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ	174
СД-4-7 Домашевская Э.П., Турищев С.Ю., Терехов В.А. ПРЕДКАРЕВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СТРУКТУРАХ «КРЕМНИЙ НА ИЗОЛЯТОРЕ».....	175
СД-4-8 Домашевская Э.П., Чувенкова О.А., Рябцев С.В., Турищев С.Ю., Кашкаров В.М., Юраков Ю.А., Шукарев А.В. ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И МОДЕЛЬ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСЛОЕВ ОКСИДОВ ОЛОВА	176

СД-4-9 <u>Дубинин Ю.В.</u> , Матвеев А.В., Каичев В.В. IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДЫ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГИСТЕРЕЗИСА В ОКИСЛЕНИИ ПРОПИЛЕНА НА ПАЛЛАДИИ МЕТОДАМИ РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ.....	177
СД-4-10 <u>Исмагилов И.З.</u> , Keller V., Керженцев М.А., Шикина Н.В., Барнаков Ч.Н., Sakashita M., Bernhardt P., Garin F., Исмагилов З.Р. ЭЛЕКТРОННЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТА НА АЗОТ-СОДЕРЖАЩЕМ АМОРФНОМ УГЛЕРОДЕ ПО ДАННЫМ РФЭС	178
СД-4-11 <u>Кибис Л.С.</u> , Стадниченко А.И., Кошечев С.В., Боронин А.И. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС СОСТОЯНИЙ КИСЛОРОДА, ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ ПЛАТИНОВОЙ ГРУППЫ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОКИСЛЕНИИ АКТИВИРОВАННЫМ КИСЛОРОДОМ	179
СД-4-12 <u>Ковалёва С.А.</u> , Витязь П.А., Григорьева Т.Ф. АСМ - ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ И МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ТВЕРДЫХ КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ МЕДИ И ЖИДКОГО ГАЛЛИЯ.....	180
СД-4-13 <u>Козинкин А.В.</u> , Власенко В.Г., Куликова О.В., Швачко О.В., Высочина Л.Л., Гутерман В.Е., Зубавичус Я.В. ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ПЛАТИНА-КОБАЛЬТ И ПЛАТИНА-НИКЕЛЬ	181
СД-4-14 <u>Козинкин А.В.</u> , Власенко В.Г., Татевосян М.М., Швачко О.В., Волков А.Н., Юрков Г.Ю. ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ МИКРОГРАНУЛ ОКСИДА КРЕМНИЯ.....	182
СД-4-15 <u>Кочубей В.И.</u> , Конюхова Ю.Г., Кособудский И.Д., Ушаков Н.М., Музалев П.А., Кульбацкий Д.М. СТРОЕНИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ	183
СД-4-16 <u>Лаврентьев А.А.</u> , Габрельян Б.В., Шкумат П.Н., Кулагин Б.Б., Никифоров И.Я. ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ CuFeS_2	184
СД-4-17 Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Шкумат П.Н., <u>Никифоров И.Я.</u> , Бондаренко Т.Н., Копылова Е.И., Хижун О.Ю., Rehr J.J. КЛАСТЕРНЫЕ РАСЧЕТЫ И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОКСИДОВ ZrTiO_4 И HfTiO_4	185
СД-4-18 <u>Лаврентьев А.А.</u> , Габрельян Б.В., Шкумат П.Н., Никифоров И.Я., Завалий И.Ю., Извеков А.В., Хижун О.Ю. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА $\text{Ti}_4\text{Fe}_2\text{O}$ ПО ДАННЫМ ЗОННОГО РАСЧЕТА «ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ» И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	186
СД-4-19 <u>Ломаченко К.А.</u> , Ластовина Т.А., Гутерман В.Е., Солдатов А.В. НАНОРАЗМЕРНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ PtCu/C: СИНТЕЗ И АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES	187
СД-4-20 <u>Львов И.Б.</u> , Федоренко Е.В., Вовна В.И. КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ПРОЦЕССА ГИДРАТАЦИИ 2,2-ДИФТОРО-4-МЕТИЛНАФТО-[1,2-E]-1,3,2- ДИОКСАБОРИНА	188

СД-4-21 <u>Львовский В.Э., Фушман Э.А., Лалаян С.С.</u> ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ КАК ТЕСТ НА РЕАКЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ЦЕНТРА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ОЛЕФИНОВ.....	189
СД-4-22 <u>Маратканова А.Н., Ломаева С.Ф.</u> ГРАНУЛИРОВАННЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ $Fe_x(SiO_2)_{100-x}$, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕХАНОАКТИВАЦИЕЙ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ.....	190
СД-4-23 <u>Миллер А.В., Каичев В.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.</u> IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНОЛА НА ПЛАТИНЕ МЕТОДАМИ РФЭС И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ.....	191
СД-4-24 <u>Неудачина В.С., Яшина Л.В., Иткис Д.М., Белогорохов А.И.</u> ОКИСЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ $PbS(001)$ В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ.....	192
СД-4-25 <u>Новиков Д.В., Князев А.С., Свинцицкий Д.А., Боронин А.И.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС СОСТОЯНИЙ МЕДИ В СИЛИКАТНО-ФОСФАТНЫХ МАТРИЦАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ОКИЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СРЕД.....	193
СД-4-26 <u>Олексенко Л.П., Сенкевич А.И.</u> ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА НА ФОРМИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ И АКТИВНОСТЬ $Cu-ER1$ КАТАЛИЗАТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ CO	194
СД-4-27 <u>Пономарёв А.Г., Холзаков А.В.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ РАСПЛАВА $Co_{57}Ni_{10}Fe_5Si_{11}B_{17}$	195
СД-4-28 <u>Сараев А.А., Шуваева М.А., Бухтиярова Г.А., Каичев В.В.</u> ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИРОДЫ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА.....	196
СД-4-29 <u>Свинцицкий Д.А., Стадниченко А.И., Боронин А.И.</u> ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РФЭС ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА ВОССТАНОВЛЕНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА МЕДИ(II) МОНООКСИДОМ УГЛЕРОДА.....	197
СД-4-30 <u>Селезнёв В.А., Кеслер В.Г., Максимовский Е.А.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ $InAs(111)A$ И $GaAs(001)$ ПОСЛЕ ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ В РАСТВОРАХ $HCl(HF)$ - ИЗОПРОПИЛОВЫЙ СПИРТ МЕТОДАМИ РФЭС, АСМ И РМА.....	198
СД-4-31 <u>Семенов Д.А., Волыхов А.А., Яшина Л.В., Васильев С.Ю., Белогорохов А.И.</u> ФОТОЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И СТРУКТУРА АТОМНО-ЧИСТОЙ ПОВЕРХНОСТИ $SnS(100)$	199
СД-4-32 <u>Симакова И.Л., Симаков А.В., Кривенцов В.В., Смоленцева Е.В., Кастийон Ф., Эстрада М., Варгас Э., Якимчук Е.П., Максимовский Е.А., Нечепуренко С.Ф., Аксенов Д.Г., Андреев Д.В., Новгородов Б.Н., Кочубей Д.И., Фуэнтес С.</u> ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТАБИЛИЗАЦИИ Au В ЗОЛОТЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ МЕТОДАМИ XAFS И РФЭС.....	200
СД-4-33 <u>Терехов В.А., Турищев С.Ю., Панков К.Н., Занин И.Е., Домашевская Э.П., Тетельбаум Д.И., Михайлов А.Н., Белов А.И., Николичев Д.Е., Зубков С.Ю.</u> ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛЁНОК СУБОКСИДА КРЕМНИЯ СОДЕРЖАЩИХ НАНОКРИСТАЛЛЫ Si ПО ДАННЫМ МЕТОДОВ XANES, USXES И XPS.....	201

СД-4-34 <u>Троицкий С.Ю.</u>, Просвирин И.П., Кривенцов В.В., Якимчук Е.Р., Новгородов Б.Н., Симакова И.Л. ИССЛЕДОВАНИЕ ПАЛЛАДИЙ – БОРИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ РЕАКЦИЙ ГИДРИРОВАНИЯ МЕТОДАМИ EXAFS И РФЭС	202
СД-4-35 <u>Турищев С.Ю.</u>, Терехов В.А., Кашкаров В.М., Панков К.Н., Ховив Д.А., Домашевская Э.П., Ершов А.В. ОСОБЕННОСТИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ КРАЕВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР $Al_2O_3/SiO/Al_2O_3/SiO...Si(100)$	203
СД-4-36 <u>Турищев С.Ю.</u>, Терехов В.А., Парина Е.В., Федотов А.К. ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛАСТИН КРЕМНИЯ, ПОДВЕРГНУТЫХ ОБРАБОТКЕ В ПЛАЗМЕ АРГОНА И ВОДОРОДА	204
СД-4-37 <u>Холзаков А.В.</u>, Исупов Н.Ю. НЕМОНОТОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ 3d СПЛАВОВ В ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ ПРИ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ВЫДЕРЖКАХ.....	205
СД-4-38 Шевлюга В.М., Климов А.Н., <u>Ельцов К.Н.</u>, Логинов Б.А., Зайцев-Зотов С.В., Трофимов В.Н., Черников А.Н., Керрен Б., Объедков О.В., Косяков А.Н. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СВЕРХВЫСОКОВАКУУМНОГО НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО СКАНИРУЮЩЕГО ТУННельНОГО МИКРОСКОПА GPI CRYO	206
СД-4-39 Эльхуссиен М., Чешков Д.А., <u>Евстигнеева Е.М.</u>, Флид В.Р. СИН-АНТИ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ АЛЛИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ ПО ДАННЫМ ЯМР И РЭС.....	207
СД-4-40 <u>Яшина Л.В.</u>, Николаев С.А., Ростовщикова Т.Н., Гуревич С.А., Кожевин В.М., Явсин Д.А. ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОДИСПЕРСНЫХ НАНОЧАСТИЦ Pt, Pd, Au, Ni НА РАЗЛИЧНЫХ НОСИТЕЛЯХ ПРИ ПОМОЩИ РФЭС	208
Секция 5. Применение фотоэлектронной спектроскопии для исследования наноструктурированных и функциональных материалов	209
СД-5-1 <u>Варнек В.А.</u>, Асанов И.П., Оглезнева И.М., Третьяков В.В., Сильников В.Н. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЭС БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ СЕРЕБРА(I).....	211
СД-5-2 <u>Воробьев С.А.</u>, Сайкова С.В., Романченко А.С., Михлин Ю.Л. ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ, ПОЛУЧЕННЫХ ВОССТАНОВЛЕНИЕМ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ, МЕТОДАМИ РФЭС И XANES	212
СД-5-3 <u>Галиева Е.Г.</u>, Титов А.Н., Федорова О.М., Рохин И.С. ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ V_xTiSe_2 И $V_xTi_{1-x}Se_2$ ($x = 0.05 - 0.5$).....	213
СД-5-4 <u>Дуда Т.А.</u>, Окотруб А.В., Федосеева Ю.В., Гузев А.А. ОРГАНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗАТОР УЛЬТРАМЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	214
СД-5-5 <u>Канажевский В.В.</u>, Чесалов Ю.А., Кочубей Д.И. СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ И СОЛЬВАТНОЙ ОБОЛОЧКИ H_2PtCl_6 В РАСТВОРАХ	215

СД-5-6 <u>Лаврухина С.А.</u> , Мазалов Л.Н., Лабусов В.А., Коротаев Е.В., Селюнин Д.О., Бехтерев А.В., Федоренко А.Д. МНОГОЭЛЕМЕНТНЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ ДЕТЕКТОР ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	216
СД-5-7 <u>Литинский А.О.</u> , <u>Петров М.В.</u> , Новиков С.И. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР БИНАРНЫХ ОКСИДОВ 4d-ЭЛЕМЕНТОВ	217
СД-5-8 <u>Ляхович А.М.</u> ОЦЕНКА СТЕПЕНИ СШИТОСТИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ	218
СД-5-9 <u>Николенко Ю.М.</u> , <u>Зиатдинов А.М.</u> СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РФЭС ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НАНОГРАФИТОВ С ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫМИ КРАЯМИ	219
СД-5-10 <u>Николенко Ю.М.</u> , <u>Земскова Л.А.</u> , <u>Кайдалова Т.А.</u> , <u>Курявый В.Г.</u> , <u>Баринов Н.Н.</u> , <u>Сергиенко В.И.</u> ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ОКСИД МЕТАЛЛА И ХИТОЗАН.....	220
СД-5-11 <u>Пархоменко И.Ю.</u> , <u>Таусон В.Л.</u> ФОРМЫ НАХОЖДЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ (Hg, Cd, Pb) В СУЛЬФИДНЫХ МИНЕРАЛАХ В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ: ДАННЫЕ РФЭС, ЭОС, ААС ТВ	221
СД-5-12 <u>Рябова В.И.</u> , <u>Сапожников Г.В.</u> , <u>Шабанова И.Н.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБРАЗЦАХ НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ	222
СД-5-13 <u>Смоленцев Н.Ю.</u> , <u>Солдатов А.В.</u> , <u>Alvarez L.</u> , <u>Bantignies J.L.</u> ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРЫ БАНЧЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ АТОМАМИ ИОДА.....	223
СД-5-14 <u>Татевосян М.М.</u> ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ТЕТРААНИЛИНСИЛАНА ПО РЕНТГЕНОВСКИМ И ЭЛЕКТРОННЫМ СПЕКТРАМ.....	224
СД-5-15 <u>Федоренко А.Д.</u> , Мазалов Л.Н., <u>Крючкова Н.А.</u> , <u>Фурсова Е.Ю.</u> , <u>Овчаренко В.И.</u> , <u>Третьяков Е.В.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СТАБИЛЬНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ И КОМПЛЕКСОВ Cu(II) С КООРДИНИРОВАННЫМИ НИТРОКСИЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ	225
СД-5-16 <u>Федосеева Ю.В.</u> , <u>Булушева Л.Г.</u> , <u>Коротеев В.О.</u> , <u>Юданов Н.Ф.</u> , <u>Окотруб А.В.</u> , <u>Felten A.</u> , <u>Flahaut E.</u> , <u>Vyalikh D.V.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИРОВАННЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	226
СД-5-17 <u>Федосеева Ю.В.</u> , <u>Булушева Л.Г.</u> , <u>Юданов Н.Ф.</u> , <u>Окотруб А.В.</u> , <u>Fonseca A.</u> , <u>Vyalikh D.V.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИРОВАННЫХ ОДНОСЛОЙНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	227
СД-5-18 <u>Фомина Л.В.</u> , <u>Беляева Н.А.</u> , <u>Жуковский М.С.</u> , <u>Безносюк С.А.</u> КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДГЕЗИОННЫХ СВЯЗЕЙ В НАНОСЛОЕВОМ КОМПОЗИТЕ ДИОКСИД МАРГАНЦА – МЕТАЛЛ.....	228

СД-5-19 <u>Чувылкин Н.Д.</u>, Нестеров И.Д. КЛАСТЕРНЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР НА ОКИСЛАХ.....	229
СД-5-20 <u>Чувылкин Н.Д.</u>, Смоленский Е.А., Кузьмин И.В., Маслова Л.К., Зефиоров Н.С. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ МЕТОД МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ (МВФ), АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ ПРИБЛИЖЕНИЮ ХАРТРИ–ФОКА.....	230
СД-5-21 <u>Шуваева В.А.</u>, Шуваев А.Т.†, Чернышов А.А., Зубавичус Я.В., Велигжанин А.А., Шуваева Е.Т., Власенко В.Г. ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ	231
РЕКЛАМА	233
1. INTERTECH Corporation.....	235
2. SPECS GmbH <u>Bondarchuk A.</u>, <u>Heichler W.</u> SPECS: STATE-OF-THE-ART INSTRUMENTS FOR NANOSTRUCTURES ANALYSIS. CURRENT STATE AND PROSPECTIVE.....	236
3. TECHNOINFO Ltd Бредихин И. ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ТВЁРДЫХ ТЕЛ.....	238
СПИСОК УЧАСТНИКОВ	239
СОДЕРЖАНИЕ	252

**XX Всероссийская научная конференция
«Рентгеновские и электронные спектры и
химическая связь»**

**Сборник тезисов докладов
Под общей редакцией д.х.н. А.И. Боронина и
д.ф.-м.н. А.В. Окотруба**

Тезисы подвергнуты мягкой редакторской правке, ответственность за
содержание тезисов остается за авторами

Составители:	И.Ю. Мутас Т.В. Замулина
Компьютерная обработка	Н.А. Цыганкова
Обложка:	Н.Ф. Потеряева
Компакт-диск	А.А. Спиридонов

Подписано в печать 22.04.2010
Печ.л. 16,75

Заказ № 23

Формат 60x84/16
Тираж 250

Отпечатано на полиграфическом участке издательского отдела
Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 5
