

**Перечень важнейших результатов
секции «Образование и структура кристаллов»
Научного совета РАН по физике конденсированных сред в 2012 году**

ИОФ им. А.М. Прохорова РАН

1. На основе новых наноструктурированных кристаллов диоксида циркония со специальными добавками редкоземельных (Ce, Nd) и переходных (Co) элементов разработана серия материалов для электрохирургического инструментария. Изготовлены и опробованы в медицинской практике ряд электрохирургических инструментов, включая: биполярные ножницы, биполярные скальпели, биполярные диссекторы, рассекатели.

Испытания, проведенные в плазме тлеющего разряда, имитирующего режим работы электрохирургического инструментария, показали, что материал режущего инструмента, изготовленного из этих кристаллов, обладает повышенной устойчивостью к плазмохимическим процессам в биологических средах и низкой адгезией к биотканям в широком температурном диапазоне, что обеспечивает низкие антипригарные свойства электрохирургического инструмента. Таким образом, улучшаются эксплуатационные характеристики электрохирургического инструмента, и увеличивается срок его службы.

2. Из кристаллов частично стабилизированного диоксида циркония (ЧСЦ) состава $ZrO_2-2,8\text{мол}\%Y_2O_3 + 1\text{вес}\% CeO_2$ изготовлены экспериментальные образцы натуральных втулок подшипников узла поворота лопаток осевого компрессора авиадвигателя. Проведенные предварительные триботехнические испытания на машине трения показали, что при работе с штатной втулкой, изготавливаемой из титанового сплава ВТ 9, втулки из кристаллов ЧСЦ в сравнении с материалом ВЖЛ обладают лучшими антифрикционными свойствами – по коэффициенту трения в 1,5 раза.

3. Разработана методика синтеза однофазовых ультрадисперсных порошков твердых растворов $Ca_{1-x}R_xF_{2+x}$ ($R = Nd^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+}$) для получения фторидной нанокерамики.

Разработана методика получения однофазных ап-конверсионных нанопорошков флюоритовых фаз $Sr_{1-x}R_xF_{2+x}$ ($R = Yb^{3+}, Er^{3+}, Tm^{3+}$), $x = 0,01 \div 0,30$, с различным соотношением редкоземельных элементов, перспективных для использования в качестве специальных люминесцентных меток для защиты от подделки документов.

4. Впервые на подложках кремния с буферным слоем германия получены гетероструктуры $A^{III}B^V$ двухкаскадных солнечных элементов с просветляющей и защитной пленкой фианита.

Найдены условия получения методом химического газового осаждения с горячей проволокой (HW-CVD) при низкой температуре (350°C) зеркально гладких, однородных по площади буферных слоев Ge на подложках Si (100) и (111).

5. Разработано фотоактивируемое лекарственное средство для лазерной элиминации папилломавируса человека высокого онкогенного риска. В состав препарата вводят специальные поглощающие лазерное излучение частицы углерода, микронного или нанометрового диапазона размеров и стабилизирующая, не поглощающая лазерное излучение гелеобразная основа. Разрабатываемый препарат предназначен для медицинской технологии контрастного термолазерного лечения аногенитальных поражений, ассоциированных с папилломавирусной инфекцией высокого онкогенного риска. В настоящее время препарат проходит сертификацию в установленном порядке. *(Совместно с ЗАО «Физтех»).*

ИК им. А.В. Шубникова РАН

1. Получены полные решения для эффективного коэффициента распределения примеси при направленной кристаллизации в присутствии конвекции в рамках моделей Бартона-Прима-Слихтера (БПС) и Острогорского-Мюллера (ОМ). Получены выражения для начального переходного режима в обеих моделях. Полностью профиль распределения примеси по кристаллу дается выражением:

$$k(x) = k_{eff} - (k_{eff} - k)e^{-\alpha x}, \text{ где}$$

$$\alpha = \frac{R}{D} \frac{k}{k_{eff}} \frac{1}{1 - (1 + \Delta)e^{-\Delta}}, \quad k_{eff} = \frac{k}{k + (1 - k)e^{-\Delta}}, \quad \Delta = \frac{R\delta}{D} \text{ - в модели БПС,}$$

$$\alpha = b \frac{k(1 - k)}{(k_{eff} - k)} \frac{1}{\delta}, \quad k_{eff} = \frac{1 + \eta}{1 + \eta/k}, \quad \eta = a \frac{V\delta}{RL} \text{ - в модели ОМ. Здесь } R \text{ - скорость роста кристалла, } D \text{ -}$$

коэффициент диффузии примеси в расплаве, δ - толщина диффузионного слоя, V - скорость потока, L - размер кристалла, a и b зависят от скорости конвекции. Показано, что совместный анализ стационарного и начального переходного режимов позволяет по данным о распределения примеси определить как скорость роста кристалла, так и скорость конвективного потока.

2. Изучены макромолекулярные комплексы уридинфосфорилазы клеток человека - фермента, принимающего участие в метаболизме противоопухолевых и антибактериальных препаратов. Впервые для исследования этих макромолекулярных комплексов использована совокупность *in silico* методов. На базе полученных структурных данных проведено рациональное конструирование новых ингибиторов уридинфосфорилаз методом комбинационного скрининга. Определены формулы 8-соединений, имеющие наибольшие константы связывания с бактериальными уридинфосфорилазами.

3. Предложен новый подход к созданию функциональных устройств микроэлектроники с использованием самоорганизующего эффекта нанорельефной поверхности подложки. Разработана и теоретически обоснована технология получения рельефных подложек лейкосапфира с шириной террас 10÷500 нм и высотой ступеней 0.22÷5 нм. Запатентован тестовый образец для калибровки атомно-силовых микроскопов. Получены упорядоченные ансамбли металлических нанокластеров, которые могут найти применение в качестве волноводов в наноплазмонике.

4. Разработана методика определения шероховатости и толщины нарушенных слоев на пластинах сапфира, основанная на измерении кривых полного внешнего отражения рентгеновских лучей от поверхностей полированных пластин сапфира, и независимом измерении рассеяния рентгеновского излучения от этих пластин в условиях полного внешнего отражения. Ожидаемым техническим эффектом от внедрения этой методики должно стать повышение выхода годности при получении структур кремний на сапфире для производства радиационно-стойких и СВЧ-микросхем.

ФирЭ им. В.А. Котельникова РАН, Фрязино.

На образцах керамики иттрий-алюминиевого граната ИАГ с различной стехиометрией (избыток оксида иттрия или алюминия до 5 мол.%) проведены эксперименты по твердофазному росту на затравке монокристаллов ИАГ из керамики с использованием промежуточных слоев оксида кремния. Отмечено резкое уменьшение концентрации пор в кристалле по сравнению с исходной керамикой. Максимальная скорость твердофазного превращения была зафиксирована в керамике с избытком 4 мол.% оксида алюминия и составила около 150 мкм в час при 1890 °С, что примерно в 20 раз выше, чем без использования промежуточных слоев оксида кремния. Получено положительное решение на выдачу патента по этой методике.

РХТУ им. Д.И. Менделеева

Разработан новый полирующий агент для механической обработки монокристаллического кварца, позволяющий сократить время полировки в два и более раз. В качестве полирующего агента используется суспензия полирита, представляющей собой смесь оксидов церия и ряда редкоземельных металлов, в водном растворе электролита (например, сульфат цинка). Добавление в водный раствор менее 1 % электролита, играющего роль ускорителя процесса, существенно сокращает время полировки без ухудшения качества поверхности.