

ВЫПУСК 9

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ  
АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ  
КЛАСТЕРОВ,  
НАНОСТРУКТУР  
И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Межвузовский сборник  
научных трудов

Тверь 2017

Министерство образования и науки  
Российской Федерации  
Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ  
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,  
НАНОСТРУКТУР  
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

***МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ***

**выпуск 9**

**ТВЕРЬ 2017**

Тверской государственный университет



Научная библиотека **00507415**

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

**Официальный сайт издания в сети Интернет:**  
[www.physchemaspects.ru](http://www.physchemaspects.ru)

**Ф50** Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

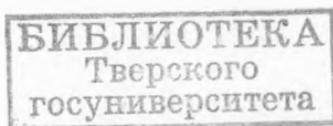
УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017  
© Тверской государственной  
университет, 2017



### РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

- Самсонов Владимир Михайлович – профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», профессор, д.ф.-м.н. (главный редактор);
- Сдобняков Николай Юрьевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», к.ф.-м.н., доцент (заместитель главного редактора, ответственный секретарь);
- Алымов Михаил Иванович – директор ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения имени А.Г. Мержанова Российской академии наук», член-корреспондент Российской академии наук, профессор, д.т.н.;
- Базулев Анатолий Николаевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», к.ф.-м.н., доцент;
- Ватолин Николай Анатольевич – главный научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук», академик Российской академии наук, д.т.н.;
- Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова», профессор, д.ф.-м.н.;
- Дулесов Александр Сергеевич – профессор кафедры информационных технологий и систем ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова», профессор, д.т.н.;
- Иванов Виктор Александрович – доцент кафедры физики полимеров и кристаллов ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», д.ф.-м.н.;
- Kaptay George – doctor of science, vice-director of the University of Miskolc, Hungary;
- Комаров Павел Вячеславович – профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», д.ф.-м.н., профессор;
- Ларин Сергей Владимирович – заместитель директора по научной работе ФГБУН «Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук», к.ф.-м.н.;
- Мазо Михаил Абрамович – старший научный сотрудник ФГБУН «Институт химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук», к.ф.-м.н.;

- Попель Петр Станиславович – профессор кафедры физики и математического моделирования ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет», профессор, д.ф.-м.н.;
- Русанов Анатолий Иванович – заведующий кафедрой коллоидной химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», академик Российской академии наук, д.х.н.;
- Скворцова Зоя Николаевна – профессор кафедры коллоидной химии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», профессор, д.х.н.;
- Sobczak Natalia – doctor of science, professor of the Institute of Precision Mechanics, Warsaw, Poland; head of the Centre for High Temperature Studies of Foundry Res. Institute, Krakow, Poland;
- Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики ФГБОУ ВО «Северо-Кавказский горно-металлургический университет (Государственный технологический университет)», профессор, д.ф.-м.н.;
- Старов Виктор Михайлович – professor of the department of chemical engineering Loughborough University, Great Britain, профессор, д.ф.-м.н.;
- Сульман Эсфирь Михайловна – директор Института нано- и биотехнологий, заведующая кафедрой биотехнологии и химии ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», профессор, д.х.н.;
- Тарасевич Юрий Юрьевич – заведующий кафедрой прикладной математики и информатики ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет», профессор, д.ф.-м.н.;
- Щекин Александр Кимович – заведующий кафедрой статистической физики ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», профессор, член-корреспондент Российской академии наук, д.ф.-м.н.;
- Соколов Денис Николаевич – технический редактор, научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», к.ф.-м.н.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
<i>Антонов А.С., Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Мясниченко В.С., Романовский В.И.</i> Моделирование процесса взаимодействия в системе зонд СТМ – образец со сложным рельефом: рекомендации по штатному технологическому режиму работы	6
<i>Антонов А.С., Сдобняков Н.Ю., Иванов Д.В., Подболотов К.Б.</i> Исследование морфологии рельефа пленок меди на поверхности слюды	19
<i>Апеков А.М., Шебзухова И.Г.</i> Влияние поляризации металлических ионов переходного слоя на границе металл - неполярная органическая жидкость на межфазную энергию	27
<i>Арефьева Л.П., Шебзухова И.Г.</i> Поверхностная энергия тонких пленок тантала и ниобия при одноосной деформации	32
<i>Арефьева Л.П., Шебзухова И.Г.</i> Межфазная энергия урана на границе с расплавами металлов	38
<i>Аххубекова С.Н., Кумыков В.К., Лайтанов М.З., Манукянц А.Р., Созаев В.А., Хуболов Б.М.</i> Диффузионное взаимодействие и фазообразование в пленках никель-алюминий	45
<i>Ахмедов Э.Н.</i> Расчёт уравнения состояния и изобарических размерных зависимостей решеточных свойств нанокристалла молибдена	49
<i>Бабуркин П.О., Лебедев А.В., Комаров П.В.</i> Изучение характера распределения сомономеров в виртуально синтезированных блокпвкл-пвкл-пви-сополимерах	57
<i>Байдышев В.С., Цура В.А., Четкасов И.В.</i> Моделирование образования наночастиц $\text{SiAl}$ в процессе газофазного синтеза	64
<i>Баряхтин Б.К., Жуков А.С., Старицын М.В., Вершинина Н.А.</i> Строение агрегации, полученной селективным лазерным сплавлением порошка железа	71
<i>Бембель А.Г.</i> Прогнозирование сегрегации в бинарных наночастицах $\text{Au} - \text{Ag}$ с использованием молекулярно-динамического и термодинамического моделирования	81
<i>Бернацкий Д.П., Павлов В.Г.</i> Полевая десорбция атомов цезия с наноструктурированной поверхности рения	89
<i>Бибанаева С.А., Сабирзянов Н.А., Корюков В.Н.</i> Влияние кальцийсодержащих реагентов на выщелачивание бокситов по способу Байера	94
<i>Богданова Е.А., Скачкова О.В., Скачков В.М., Сабирзянов Н.А.</i> Влияние фторид-ионов на прочностные характеристики гидроксипатита и композиционных материалов на его основе	99
<i>Болотов А.Н., Новиков В.В., Новикова О.О.</i> Приборное и методическое обеспечение нестандартных исследований магнитных нанодисперсных смазочных масел	108
<i>Большакова Н.Н., Иванов В.В., Иванова А.И., Семенова Е.М., Сеньковский А.Д., Смирнов А.С.</i> Термоиндуцированные процессы переключения монокристаллов $\text{PIN} - \text{PMN} - \text{PT}$	114

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,  
наноструктур и наноматериалов**

<i>Васильев С.А., Романов А.А.</i> Изучение размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации нанокластеров платины методом молекулярной динамики	121
<i>Вирченко М.К., Егужокова Р.М., Залетов А.Б., Иванова А.И.</i> Магнитооптический контроль пространственных распределений магнитного поля микроэлектромеханических систем	128
<i>Воропаев С.А., Душенко Н.В., Аронин А.С., Шкинев В.М., Гацимов Э.М.</i> Исследование возможности образования алмаза при умеренных Р-Т	133
<i>Воскресенский В.М., Стародуб О.Р., Сидоров Н.В., Палатников М.Н.</i> Компьютерное моделирование структуры и размеров кислородно-октаэдрических кластеров в кристалле ниобата лития и динамики их развития при изменении состава	140
<i>Гагарин И.Д., Кулеш Н.А., Тонкушина М.О., Власов Д.А., Остроушко А.А.</i> Физико-химические аспекты электропереноса нанокластерных полиоксоанионов кеплатного типа в нативных мембранах	147
<i>Гафнер Ю.Я., Гафнер С.Л., Редель Л.В., Замулин И.С.</i> Моделирование перехода $L1_2 \rightarrow$ ГЦК в нанокластерах $Cu, Au$	153
<i>Гырдасова О.И., Бакланова И.В., Шалаева Е.В., Мелкозерова М.А., Булдакова Л.Ю., Сычева Н.С.</i> Фотокатализаторы на основе квазиодномерного $ZnO$ , активированного кобальтом и медью	160
<i>Дегтева О.Б., Семенова Е.М., Ляхова М.Б., Кузнецова Ю.В.</i> Магнитные свойства спеченных гетерогенных композиций на основе сплавов $3d$ – и $4f$ – переходных металлов	169
<i>Елекоева К.М., Касумов Ю.Н., Манукянц А.Р., Понежев М.Х., Созаев В.А., Шерметов А.Х.</i> Температурная зависимость углов смачивания расплавом $Pb-0,49$ ат. % $Na$ пористого никеля	177
<i>Елекоева К.М., Коротков П.К., Лайпанов М.З., Манукянц А.Р., Созаев В.А., Хуболов Б.М.</i> Фазообразование на границе двухслойной пленки медь-алюминий	182
<i>Журавлев Н.А., Суетин Д.В., Шешин И.Р., Скачков А.В., Савина А.А., Спиридонова Т.С., Буздуков А.Л., Денисова Т.А.</i> Локальное окружение катионов в двойных шеелитах $Li(Na)Bi(MoO_4)_2$ по данным ЯМР и квантово-химических расчетов	189
<i>Злыгостева О.А., Соковнин С.Ю., Ильвес В.Г.</i> Оценка свойств мезопористого диоксида кремния, допированного диоксидом марганца, полученного импульсным электронным испарением, для применения в биомедицине	199
<i>Иванов В.И., Мязотин А.В., Иванова Г.Д.</i> Электрострикционный механизм светолинзового отклика в наносuspензии	205
<i>Измайлов В.В., Новоселова М.В.</i> Влияние нанотопографии поверхностей на электрическое сопротивление дискретного контакта твердых тел	210

<i>Ильвес В.Г., Соковнин С.Ю., Мурзакаев А.М., Демина Т.М.</i> Свойства мезопористых аморфно-нанокристаллических порошков $Gd_2O_3 - SiO_2$ , полученных импульсным электронным испарением	217
<i>Кидяров Б.И., Стопоров А.С., Манаков А.Ю.</i> Экспериментальные и теоретические обоснования постадийного механизма образования кристаллов из жидкой фазы	223
<i>Клинов А.П., Зубова Е.А., Мазо М.А.</i> Зависимость эффективных потенциалов взаимодействия ионов $Na^+$ и $Cl^-$ в водном растворе от температуры и концентрации	230
<i>Клопотов А.А., Иванов Ю.Ф., Тересов А.Д., Марченко Е.С., Клопотов В.Д.</i> Образование МАХ-фаз электронно-ионно-плазменными методами	236
<i>Княтько М.В., Лапушкин М.Н.</i> Влияние переноса заряда в полупроводниковой пленке $NaAu$ , на ее эмиссионные свойства	245
<i>Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Мясниченко В.С., Сдобняков Н.Ю., Ершов П.М., Хорт А.А.</i> Исследование влияния точечных дефектов на термодинамические и структурные свойства нанокompактированных кобальта и меди	252
<i>Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д.</i> Внутреннее вращение в 1,1,1-трифторалканах	258
<i>Крутько В.К., Кулак А.И., Мусская О.Н., Сафронова Т.В.</i> Влияние фазы трикальцийфосфата на прочность гидроксипатитовой пенокерамики в процессе термического отжига	264
<i>Кузнецов Ю.А., Лапушкин М.Н.</i> Электронно-стимулированная десорбция атомов лития с окисленного вольфрама	271
<i>Логвинович А.С., Свиридова Т.В., Свиридов Д.В., Капариха А.В.</i> Микротрибологические свойства металл-матричных нанокompозитов на основе слоистых оксидов, выполняющих функции наноконтейнеров	278
<i>Ляхова М.Б., Жданова О.В., Семенова Е.М., Пастушенков Ю.Г., Карпенков Д.Ю., Карпенков А.Ю., Филимонов М.В.</i> Анализ SPD-метода для определения полей анизотропии ферромагнитных поликристаллов	283
<i>Магомедов М.Н.</i> О зависимости фазовой диаграммы сплава замещения от размера и формы нанокристалла	291
<i>Манухянц А.Р.</i> Поверхностные свойства щелочных металлов в электрическом поле с учетом релаксации	301
<i>Медянкина И.С., Пасечник Л.А., Скачков В.М., Яценко С.П., Бамбуров В.Г.</i> Взаимодействие кальция и алюминий содержащих фаз красных шламов с гидроксидом аммония	307
<i>Мусская О.Н., Крутько В.К., Кулак А.И.</i> Физико-химические свойства цементов на основе суспензий фосфатов кальция	317
<i>Мясниченко В.С., Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Кулагин В.В., Хорт А.А.</i> Моделирование процессов структурообразования в биметаллических наносплавах различного состава	323

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,  
наноструктур и наноматериалов**

<i>Мясниченко В.С., Ершов П.М., Сдобняков Н.Ю., Mikhov R., Kirilov L.</i> О термической стабильности кластеров меди с размером 100-150 атомов	330
<i>Нагаплежаева Р.Р., Оракова М.М., Люев В.К.</i> АСМ исследование морфологии поверхностного слоя сапфира после плазменной обработки поверхности	337
<i>Нагорный Ю.Е., Политаев Д.Н.</i> Исследование механических свойств силицена в рамках модели поля центральных сил	341
<i>Палатников М.Н., Сидоров Н.В., Макарова О.В., Иваненко Д.В., Панасюк С.Л., Куркамгулова Е.Р., Юдин И.В.</i> Взаимосвязь оптической и радиационной стойкости кристаллов ниобата лития различного химического состава	347
<i>Палатников М.Н., Щербина О.Б., Маслбоева С.М., Ефремов В.В., Иваненко Д.В., Владимирова С.В.</i> Структура и свойства керамики ниобата лития, полученной из шихты различного генезиса	356
<i>Петрик Г.Г.</i> Критерии термодинамического подбора: их источники и прогноз на молекулярном уровне	363
<i>Полухин В.А., Курбанова Э.Д.</i> Деформационные механизмы в армированных графеном слоистых и матричных металлокомпозитах. Эксперимент и моделирование	375
<i>Редель Л.В., Гафнер С.Л.</i> Компьютерный анализ сенсорных свойств наноструктурированных $SnO_2$ пленок. 1. Расчет проводимости газового сенсора на основе наночастиц $SnO_2$	383
<i>Редель Л.В., Гафнер С.Л.</i> Компьютерный анализ сенсорных свойств наноструктурированных $SnO_2$ пленок. 2. Использование перколяционного подхода при разработке газочувствительных сенсоров	390
<i>Редель Л.В., Гафнер С.Л.</i> Компьютерный анализ сенсорных свойств наноструктурированных $SnO_2$ пленок. 3. Анализ восприимчивости $SnO_2$ сенсора к угарному газу	397
<i>Садовская Л.Ю., Свиридова Т.В., Свиридов Д.В.</i> Синтез нанодисперсного диоксида титана за счет pH-контролируемой полимеризации титановой кислоты	404
<i>Самсонов В.М., Талызин И.В., Васильев С.А., Картошкин А.Ю.</i> Комплексное применение атомистического и термодинамического моделирования к исследованию размерной зависимости температуры плавления металлических наночастиц	411
<i>Самсонов В.М., Каптунов И.А., Иванов А.М., Талызин И.В., Третьяков С.А.</i> О смачиваемости поверхности кварца расплавом германия	422
<i>Свердлик Г.И., Выскребенец А.С., Максимов Р.Н., Атаева А.Ю.</i> Исследование параметров для получения пенного режима в струйном барботере	430
<i>Сергеева О.Н., Солнышкин А.В., Гудков С.И., Кукушкин С.А., Пронин И.П., Некрасова Г.М.</i> Диэлектрические и фотовольтаические свойства гетероструктур $SiC / Si$	435

<i>Сидоров Н.В., Теплякова Н.А., Палатников М.Н.</i> Исследование фоторефрактивных свойств кристаллов ниобата лития методами комбинационного и фотоиндуцированного рассеяния света	442
<i>Симаков В.В., Синёв И.В., Смирнов А.В., Осько И.Д., Гребенников А.И.</i> Влияние паров воды и освещения на проводимость тонких пленок диоксида олова при комнатной температуре	449
<i>Скачков В.М., Шевырев Н.А., Пасечник Л.А., Яценко С.П.</i> Композиционный припой на основе порошков металлов и галлиевого сплава	455
<i>Смирнов А.А., Каплунов И.А., Ольнев А.А., Никифорова А.Н.</i> Разработка математической модели процесса сбора заряда и формирования спектра в детекторах на основе $CdTe$ ( $CdZnTe$ ) при облучении гамма-квантами	465
<i>Сошина Т.О.</i> Коррозионные свойства покрытий на основе $Ti_{1-x}Al_xN$	475
<i>Тиньгаев М.И., Беленков Е.А.</i> Структура и электронные свойства гибридной углеродной фазы, формирующейся при полимеризации жгута нанотрубок (6,0)	481
<i>Филоненко В.П., Зибров И.П., Анохин А.С.</i> Нано- и микроразмерные гетероалмазы, полученные из смесей нитрида углерода и меламин с бором	488
<i>Хубежов С.А., Кесаев В.И., Тваури И.В., Бллев А.П., Ашхотов О.Г., Магкоев Т.Т.</i> Потенциал Гиббса для частиц на двумерной решетке в модели «маффин-тин»	495
<i>Чепкасов И.В., Артемова Н.Д., Байдышев В.С.</i> Термодинамическая стабильность наночастиц $Cu_xAg_{1-x}$	500
<i>Чепкасов И.В., Баев А.Ю., Байдышев В.С.</i> Оценка стабильности наночастиц $CuAu$ различного типа	505
<i>Чирков А.В., Самсонов В.М.</i> Молекулярно-динамическое исследование смачивания поверхности меди твердыми наночастицами свинца	510
<i>Шебзухова И.Г., Апеков А.М.</i> Вклад дисперсионного взаимодействия s-сфер в межфазную энергию кристаллов $\alpha-Li$ и $\alpha-Na$ на границе с неполярными органическими жидкостями	518
<i>Шепелевич В.Г.</i> Формирование микроструктуры сплава $Bi-40$ мас.% $Sn$ при высокоскоростной кристаллизации	522
<i>Шиманович Д.Л.</i> Технологические подходы для создания модифицированных многослойных покрытий на основе наноструктурированного пористого анодного $Al_2O_3$ и осажденных диэлектрических пленок	529
<i>Широкова А.Г., Богданова Е.А., Скачков В.М., Григоров И.Г., Сабирзянов Н.А.</i> Перспектива использования сканирующей электронной микроскопии для исследования биокмползитов с металлическим или органическим скаффолдом	536
<i>Шомахов З.В., Молоканов О.А., Кармоков А.М.</i> Исследование электропереноса в боратно-бариевом стекле	544
Аннотации статей на английском языке	549
Информация об авторах	575
Содержание	585

*Физико-химические аспекты изучения кластеров,  
наноструктур и наноматериалов*

---

*Научное издание*

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Тверской государственный университет».

# **ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

*Самсонов Владимир Михайлович – главный редактор;  
Сдобняков Николай Юрьевич – заместитель главного редактора,  
ответственный секретарь.*

Адрес редакции: 170002, Россия, г. Тверь, Садовый пер., д. 35, ауд. 217.

## **МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ**

*(зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных  
технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ  
ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011)*

Индекс издания в каталоге «Издания органов научно-технической информации» - 57378  
Каталожная цена – 1500 рублей.

## **выпуск 9**

Дата выхода в свет 15.12.2017

*Печатается с оригиналов авторов*

Подписано в печать 28.11.2017. Формат 60 × 84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>.

Усл. печ. л. 37,0. Тираж 500 экз. Заказ № 586 от 28.11.2017.

Издатель – Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Тверской государственный университет».

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33.

Отпечатано в редакционно-издательском управлении  
Тверского государственного университета.

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, Студенческий пер., д. 12, корпус Б.

Тел. РИУ: 8 (4822) 35-60-63.