

Важнейшие результаты КФТИ за 2025 г.

- 1. Дальнейшее развитие парадигмы спинового обмена и его проявления в ЭПР спектроскопии в разбавленных растворах парамагнитных частиц.**
- 2. Разработка структур сверхпроводящего спинового клапана с управляемым эффектом близости сверхпроводник/ферромагнетик.**
- 3. Экспериментальное доказательство повышения эффективности наблюдения термически активированной задержанной флюоресценции (TADF) в донорно-акцепторных диадах при формировании локализованного триплетного состояния, индуцированного рекомбинацией зарядов, вблизи триплета с разделенными зарядами.**
- 4. Концептуальные сценарии модификации поверхности германия вследствие ее распыления и набухания при ионном облучении.**
- 5. Свойства новых пьезоэлектрических материалов, полученных на основе дипептидов Phe-Leu и Leu-Phe.**

Казань, 20.11.2025 г.

Дальнейшее развитие парадигмы спинового обмена и его проявления в ЭПР спектроскопии в разбавленных растворах парамагнитных частиц

К.М. Салихов, М.М. Бакиров, Р.Б. Зарипов, И.Т. Хайрутдинов

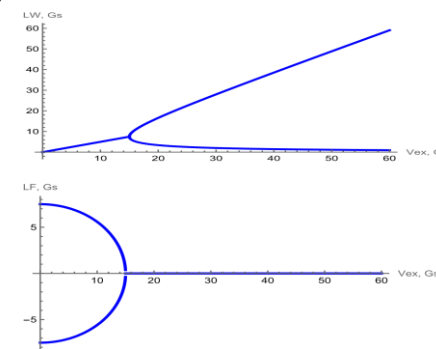
Обменное взаимодействие при бимолекулярных столкновениях парамагнитных частиц вызывает ряд процессов: декогеренцию спинов со скоростью $V_{ex}=K_{ex}C$, (C -концентрация радикалов), перенос квантовой когерентности (отдача) от партнера по столкновению ($V_{ex,sct}=q V_{ex}$), перенос энергии. Если эти процессы происходят с одинаковой скоростью, то спиновый обмен называют эквивалентным. Благодаря отдаче спиновой когерентности при случайных столкновениях формируются коллективные моды движения намагниченности спинов. И в эксперименте проявляются именно резонансные частоты возбуждения именно этих коллективных мод. В 2025 году мы провели детальный анализ проявления неэквивалентности спинового обмена в форме спектров ЭПР.

Для иллюстрации на рис.1 приведены рассчитанные резонансные частоты и их уширение, вызванные спиновым обменом для раствора радикалов с одним магнитным ядром.

Из рисунка можно сделать следующие заключения:

- Коллапс спектра ЭПР наступает при условии равенства скорости отдачи квантовой когерентности начальному расщеплению двух линий в спектре ЭПР, $q K_{ex}C=a$.
- В случае неэквивалентного спинового обмена эффект обменного сужения спектра может и не проявляться. Например, на рис. 1б видно, что и в условиях коллапса всего спектра обе резонансные линии продолжают уширяться с ростом скорости спинового обмена в отличие от ситуации эквивалентного обмена (см. рис.1а), когда в условиях коллапса одна из резонансных линий не уширяется, а сужается с ростом скорости спинового обмена. В тоже время заслуживает внимания, что в случае неэквивалентного спинового обмена в условиях коллапса спектра одна из линий уширяется с меньшим наклоном, чем другая (см. рис.1а,1б).

а) эквивалентный спиновый обмен



б) неэквивалентный спиновый обмен

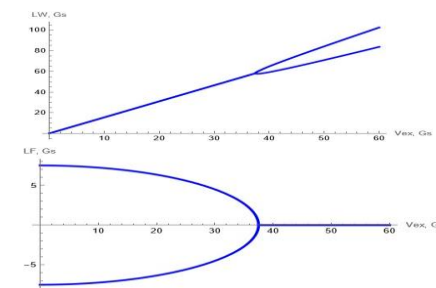


Рис.1. Зависимость от скорости спинового обмена $V_{ex}=(1/2)K_{ex}C$ резонансных частот (на рисунках они отложены по оси ординат и обозначены, как $LF=\omega_{res}$) и уширения линий $LW\equiv\Omega_k$ (см. (1)). Расчеты проведены для $a=15$ Гс, $1/T_2=0.02$ Гс. Все параметры даны в гауссах, единицах индукции магнитного поля, T_2 -это феноменологически введенное Блохом время фазовой релаксации (декогеренции). Для перевода в единицы 1/сек их нужно умножить на гиромагнитную постоянную $1.76 \cdot 10^8$ для электрона.

K. M. Salikhov. Appl. Magn. Reson. **56**, 1077–1097 (2025).

K.M. Salikhov. Appl. Magn. Reson. **56**, 1099–1130 (2025).

I. T. Khairutdinov, K. M. Salikhov, M. M. Bakirov, R. B. Zaripov. Appl. Magn. Reson. **56**, 1145-1153 (2025)

Разработка структур сверхпроводящего спинового клапана с управляемым эффектом близости сверхпроводник/ферромагнетик

А.А. Камашев, Н.Н. Гарифьянов, А.А. Валидов, А.С. Осин, Я.В. Фоминов, И.А. Гарифуллин

Предложена и исследована новая структура сверхпроводящего спинового клапана (ССК) типа Ф1/И/С/И/Ф2. Ключевой особенностью конструкции является целенаправленная модификация границы раздела сверхпроводник/ферромагнетик (С/Ф) с помощью ультратонких диэлектрических прослоек (И), что позволяет управлять параметром прозрачности и, как следствие, эффектом близости С/Ф.

Максимальная величина эффекта ССК составила 0.36 К.

Важнейшим достижением является то, что этот значительный эффект наблюдается в относительно малом внешнем магнитном поле величиной 1 кЭ, что выгодно отличает предложенную структуру от известных аналогов. Полученные результаты открывают возможности для разработки новых энергоэффективных спинтронных устройств.

*A.A. Kamashev, N.N. Garif'yanov, A.A. Validov, A.S. Osin, Ya.V. Fominov, I.A. Garifullin, Superconducting spin valve effect in Fe/Si₃N₄/Pb/Si₃N₄/Fe heterostructures, Physical Review B **112**, 134509, 2025, DOI:10.1103/647c-6xj4, Q1*

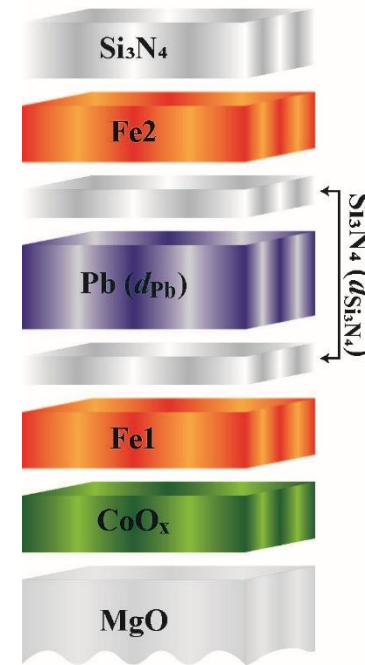


Рис. 1. Структура приготовленных образцов CoO_x(3.5нм)/Fe(3нм)/[Si₃N₄/Pb/Si₃N₄]/Fe(3нм)/Si₃N₄(85нм). Толщина слоя Pb (d_{Pb}) варьировалась от 40 до 60 нм, а толщины прилегающих слоев Si₃N₄ ($d_{Si_3N_4}$) — от 0 до 1.2 нм.

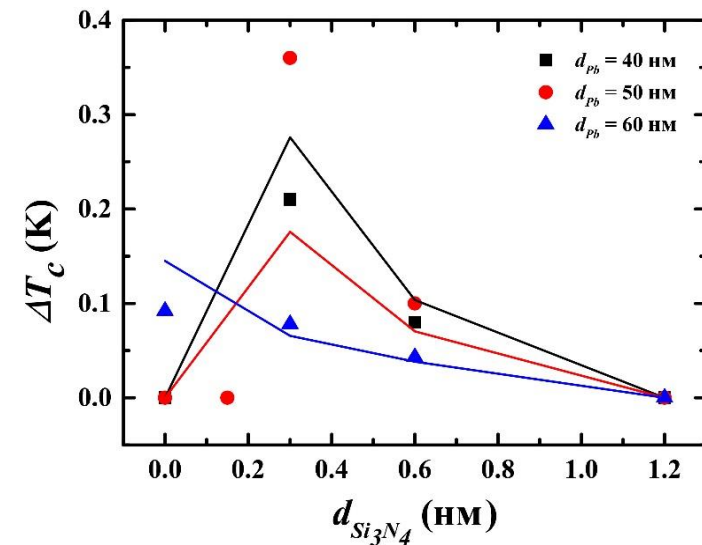


Рис. 2. Зависимость величины эффекта ССК ΔT_c от толщины слоев Si₃N₄ ($d_{Si_3N_4}$) для трёх серий образцов. Сплошные линии — теоретические кривые, рассчитанные согласно теории Фоминова и др. для структур ССК модели Ф1/С/Ф2.

Экспериментальное доказательство повышения эффективности наблюдения термически активированной задержанной флюоресценции (TADF) в донорно-акцепторных диадах при формировании локализованного триплетного состояния, индуцированного рекомбинацией зарядов, вблизи триплета с разделенными зарядами

А.А. Суханов, А.Е. Мамбетов, В.К. Воронкова, J. Zhao (Dalian)

TADF -эмиттеры на основе донорно-акцепторных (Д-А) диад, являются перспективными для создания нового поколения OLED. Знания о механизмах TADF в эмиттерах такого типа необходимы для повышения их эффективности, в частности важным является вопрос о роли фотоиндуцированного локализованного триплетного состояния 3LE в реализации TADF. Исследование большого ряда TADF излучателей типа Д-А показало, что спектры времяразрешенного (ВР)ЭПР являются суммой спектров двух триплетных состояний (3CS и 3LE) и увеличение вклада от 3LE коррелирует с увеличением времени TADF. Впервые наблюдаемая инверсия электронной спиновой поляризации состояния 3CS на больших временах и зависимость эффекта от температуры являются убедительными и прямыми экспериментальными доказательствами механизма спин-вибронной связи в процессах TADF.

1. K Ye, A. Sukhanov, Yu Pang et al. Time-resolved transient optical and electron paramagnetic resonance spectroscopic studies of electron donor-acceptor thermally activated delayed fluorescence emitters based on naphthalimide-phenothiazine dyads/ PCCP 27(2) p.813 Q1 DOI:10.1039/D4CP03629H

2. Y. Pei, A. Sukhanov, et al. The Photophysics of Naphthalimide-Phenothiazine Electron Donor-Acceptor Dyads: Revisiting the Heavy-Atom Effect in Thermally Activated Delayed Fluorescence. Chem Eur. J Volume31, Issue5, 2025 e202403542 <https://doi.org/10.1002/chem.2025>

3. Y. Pei, L. Bussotti, X. Liu, A. A. Sukhanov et al. Study of the thermally-activated delayed fluorescence (TADF) mechanism of phenothiazine dibenzothiophene-S,S-dioxide electron donor acceptor dyads using steady-state and time resolved optical and electron paramagnetic resonance spectroscopies, Chem. Sci., 2025, 16, 19737-19751 Q1 DOI: <https://doi.org/10.1039/D5SC03644E>

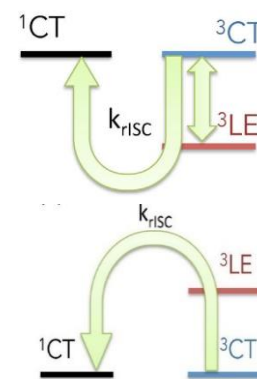
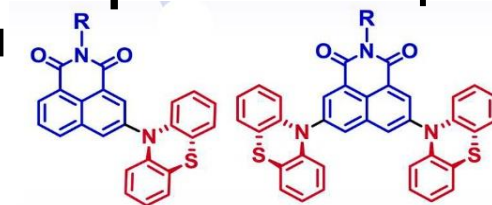


Рис.1. Возможные пути обратного ISC, где 3LE играет роль промежуточного состояния, так как переходы между 3CS и 1CS запрещены.



$\tau_{TADF} = 14 \mu s$ $\tau_{TADF} = 2 \mu s$

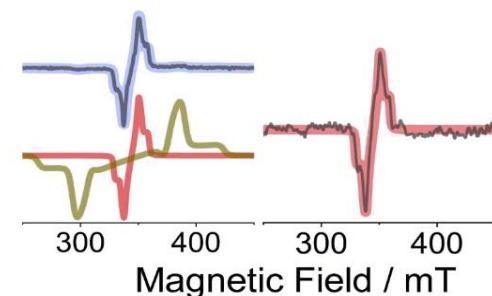


Рис. 2. Химические структуры эмиттеров NI-PTZ и NI-PTZ2 на основе нафталимида и фенотиазина, время жизни TADF этих эмиттеров и спектры ВР ЭПР, демонстрирующие формирование двух триплетных состояний при фотовозбуждении NI-PTZ.

Концептуальные сценарии модификации поверхности германия вследствие ее распыления и набухания при ионном облучении

А.Л. Степанов, В.Ф. Валеев, В.И. Нуждин, А.М. Рогов, Д.А. Коновалов

Предложена классификация основополагающих концептуальных сценариев модификации поверхности Ge, сопровождающейся поробразованием, при высокодозовом ионном облучении, т.е. модификации, вызываемой конкурирующими физическими процессами распыления и набухания материала.

Предложенная парадигма ситуационного поведения и строгого характера изменения облучаемой поверхности (концептуальных сценариев) на примере облучаемого Ge, может быть рассмотрена и применена на практике к широкому классу полупроводниковых материалов (GaN, GaAs, GaSb, Si и др.), также демонстрирующих поробразование на своей поверхности при интенсивном ионном облучении.

A. L. Stepanov, I. A. Faizrakhmanov, V. I. Nuzhdin, V. F. Valeev, A. M. Rogov, D. A. Konovalov / *Thin germanium films created by ion-assisted stimulating deposition for formation of nanoporous layers* // *Appl. Phys. A*, 131, 647 (2054) (DOI: 10.1007/s00339-025-08773-8, WoS Q2);

КЛАССИФИКАЦИЯ КОНЦЕПТУАЛЬНЫХ СЦЕНАРИЕВ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ИОННО-ОБЛУЧАЕМОГО ГЕРМАНИЯ

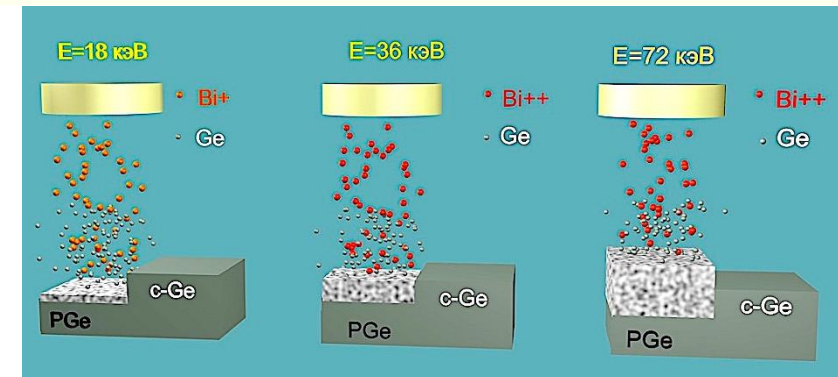
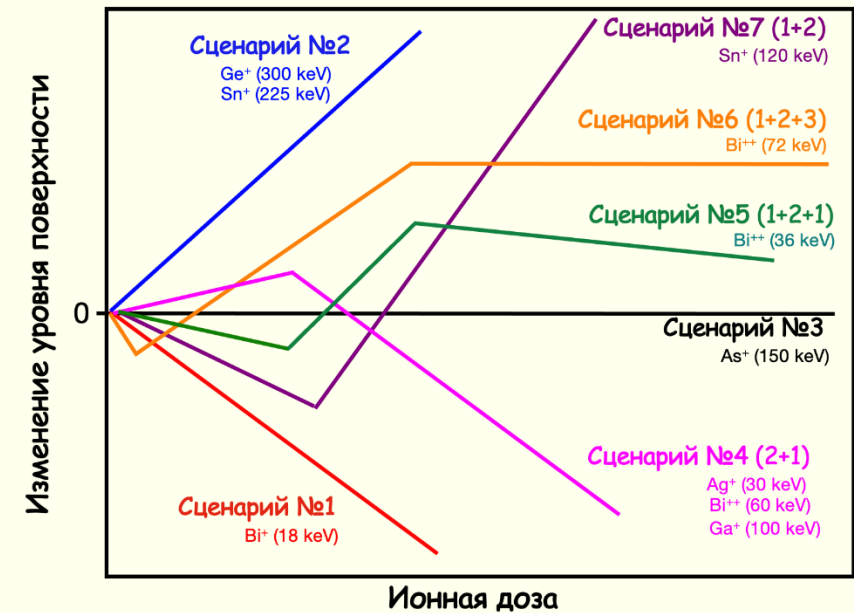


Рис. 1. Примеры концептуальных сценариев

Методами силовой микроскопии пьезоотклика были изучены свойства новых пьезоэлектрических материалов, полученных на основе дипептидов Phe-Leu и Leu-Phe

А.С. Морозова, Е.О. Кудрявцева, С.А. Зиганшина, Н.В. Курбатова, М.А. Зиганшин, А.А. Бухараев

Впервые методами атомно-силовой микроскопии исследованы пьезоэлектрические свойства отдельных микро- и нанокристаллов дипептидов α -фенилаланил- α -лейцин (PheLeu) и α -лейцил- α -фенилаланин (LeuPhe), полученных из аморфных пленок. Охарактеризована морфология полученных кристаллов и методом силовой микроскопии пьезоотклика найдены значения эффективного пьезоэлектрического коэффициента. Для кристалла PheLeu они составили 71 пм/В при вертикальном смещении АСМ зонда и -73 пм/В при латеральном. Для кристалла LeuPhe 89 пм/В и -19 пм/В, соответственно.

Полученные значения сопоставимы с пьезоэлектрическим коэффициентом нанокристаллов на основе дифенилаланина и больше коэффициента, наблюдаемого у фибриллярных структур полигидроксibuтирата, найденных другими авторами. Полученные данные могут использоваться при разработке биосовместимых пьезоэлектрических устройств.

A.S. Morozova, E.O. Kudryavtseva, S.A. Ziganshina, N.V. Kurbatova, M.A. Ziganshin, A.A. Bukharaev / *New piezoelectric materials based on Phe-Leu and Leu-Phe dipeptides* // *Applied Materials Today*, 42, 102564, 2025
DOI: 10.1016/j.apmt.2024.10256 (WoS Q1)

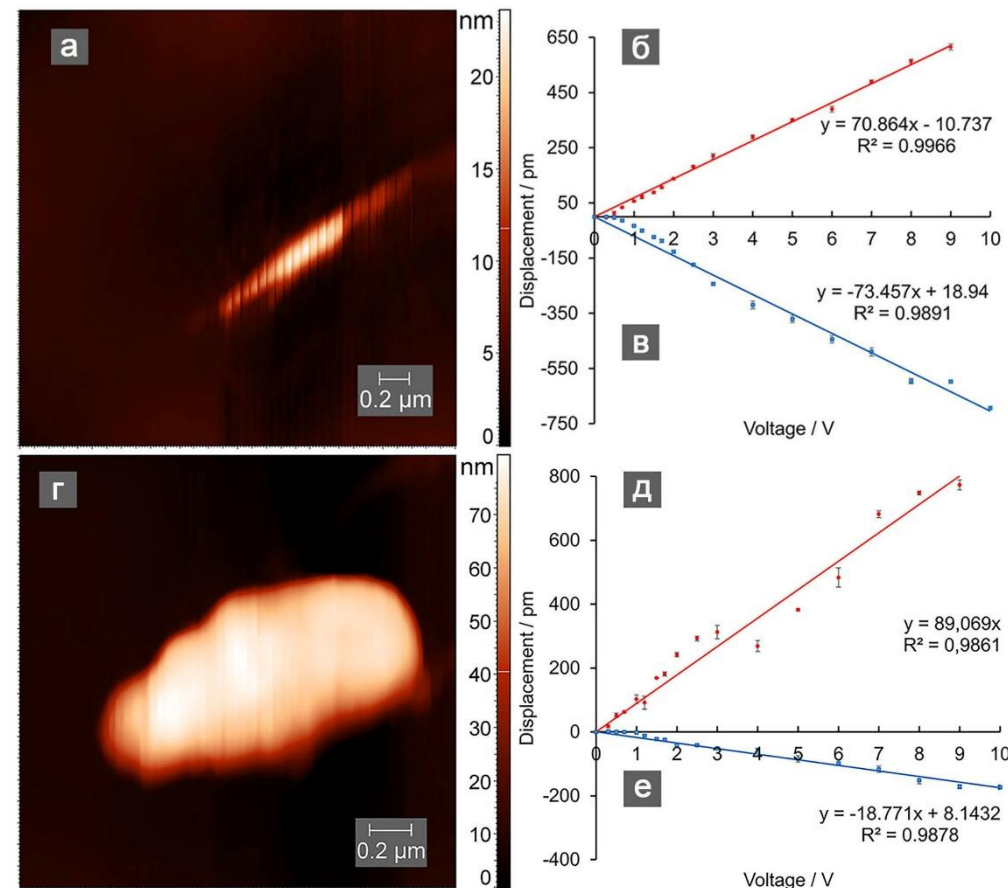


Рис. 1. АСМ-изображения кристаллов Phe-Leu (а) и Leu-Phe (г), графики корреляции вертикальных (б, д) и латеральных (в, е) смещений зонда с приложенным напряжением.